



Séminaire du LCP-A2MC

## **Etude par simulation de l'effet isotopique dans le lithium liquide**

J.-F. Wax<sup>1</sup>, N. Harchaoui<sup>2</sup>

<sup>1</sup>LCP-A2MC, Université de Lorraine, Metz, France.

<sup>2</sup>LPCQ, Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, Algérie.

Parmi les métaux purs, le lithium est celui qui présente le rapport de masse le plus élevé entre ses isotopes stables. Dans cette étude, nous utilisons la dynamique moléculaire pour déterminer la sensibilité de diverses propriétés physiques à la présence de ces deux isotopes. Dans ce but, nous considérons plusieurs échantillons dans lesquelles la composition isotopique varie, allant de 100% de <sup>6</sup>Li à 100% de <sup>7</sup>Li.

Nous nous focalisons sur la structure statique qui, sans surprise, n'est pas affectée par les différences de masses isotopiques puisque les forces interatomiques en sont indépendantes. Ce n'est évidemment plus le cas lorsqu'on considère le coefficient d'auto-diffusion, la viscosité ou le facteur de structure dynamique. Des différences entre isotopes sont clairement mises en évidence et leur influence quantitative sur ces propriétés est discutée. De manière assez inattendue, elles posent la question de l'existence possible d'effets quantiques dans le lithium.

### **Simulation study of the isotopic effect in liquid lithium**

Among pure metals, lithium is the one with the highest mass ratio between existing stable isotopes. In this study, we use classical molecular dynamics simulations in order to determine the sensitivity of different properties to the presence of these two isotopes. For this purpose, we first consider several samples which composition changes from 100% <sup>6</sup>Li to 100% <sup>7</sup>Li.

We first focus on the static structure which, as could be expected, is not affected by the isotopic mass since the interatomic forces are independent on the isotopic species. This is obviously not the case when considering the self-diffusion coefficients, the viscosity or the dynamic structure factor. The differences between behaviours of both species are highlighted and their influence on the measured properties is discussed. Quite surprisingly, they question about the possible existence of quantum effects in lithium.

**Mardi 7 octobre 2025 à 14h00**

**Salle 6 – I.C.P.M.**

**1, boulevard Arago, Metz-Technopôle**