

Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

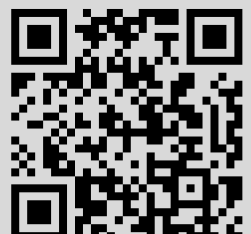
Э. А. Аллахьяров, В. Б. Бобров, С. А. Тригер, Структурный фактор жидких металлов при малых волновых векторах и модель однокомпонентной плазмы, *ТВТ*, 1994, том 32, выпуск 3, 363–372

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.97.14.85

18 марта 2025 г., 19:08:00



**ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ
СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВА**

УДК 533.93

**СТРУКТУРНЫЙ ФАКТОР ЖИДКИХ МЕТАЛЛОВ
ПРИ МАЛЫХ ВОЛНОВЫХ ВЕКТОРАХ
И МОДЕЛЬ ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ ПЛАЗМЫ**

© 1994 г. Э. А. Аллахяров, В. Б. Бобров, С. А. Тригер

НО ИВТ РАН, г. Москва

Поступила в редакцию 14.09.93 г.

Проведен анализ результатов применения для описания структурного фактора $S_{ii}(q)$ жидких металлов при малых волновых векторах q традиционного подхода, основанного на введении эффективного потенциала межоионного взаимодействия, и подхода, использующего в качестве исходного приближения модель однокомпонентной плазмы (one-component plasma – ОСП). Показано, что использование модели ОСП дает не только простое аналитическое описание функции $S_{ii}(q)$ при малых q , но и согласованное с термодинамическим выводом выражение для изотермической сжимаемости жидкого металла. Исследовано влияние на величину $S_{ii}(q)$ различных способов учета обменно-корреляционных эффектов в электронной жидкости и различных типов псевдопотенциала электрон-ионного взаимодействия. Имеется хорошее согласие с экспериментальными результатами.

1. Начиная с работы [1], теоретическому исследованию структурных факторов жидких металлов уделяется большое внимание. Это обусловлено как интенсивными экспериментальными исследованиями [2], так и потребностями расчетов термодинамических, кинетических и электромагнитных свойств жидких металлов [3, 4].

В настоящее время при исследовании ионного статического структурного фактора $S_{ii}(q)$ наиболее распространенным является подход, основанный на использовании эффективного парного потенциала $U_{ii}^{eff}(r)$ межоионного взаимодействия, в котором учитывается косвенное взаимодействие между ионами через электроны в рамках теории псевдопотенциала электрон-ионного взаимодействия [3, 4]. При этом, однако, следует иметь в виду, что истинный потенциал межчастичного взаимодействия является микроскопической величиной, не зависящей от термодинамических параметров системы. В то же время потенциал

$U_{ii}^{eff}(r)$, который принято считать кулоновским потенциалом межоионного взаимодействия, экранированного электронами, зависит от этих параметров через электронную диэлектрическую проницаемость. Это означает, что экранирование поля ионов электронами происходит в среднем, а не на микроскопическом уровне. Тем самым использование потенциала $U_{ii}^{eff}(r)$ в качестве истинного потенциала межоионного взаимодействия является одной из возможных моделей жидкого металла. Причина же широкого использования эффективного потенциала $U_{ii}^{eff}(r)$ во многих

работах заключена в истории развития современной теории жидких металлов, берущей свое начало в 60-е годы. Тогда фактически единственной относительно развитой была теория простой жидкости с потенциалом твердых сфер. Теоретические результаты для этой системы довольно хорошо согласуются с экспериментальными данными по структуре для многих жидкостей, включая жидкие металлы. В этой ситуации и возникла идея о необходимости введения в теорию жидких металлов короткодействующего потенциала, описывающего взаимодействие ионов в жидких металлах, что и обусловило появление

потенциала $U_{ii}^{eff}(r)$. В рамках этого подхода большое количество работ посвящено численным методам исследования структурного фактора как на основе машинных экспериментов [5, 6], так и на основе решения интегральных уравнений для ионной парной корреляционной функции $g_{ii}(r)$ [7, 10], непосредственно связанной со статическим структурным фактором $S_{ii}(q)$ [4],

$$S_{ii}(q) = 1 + n_i \int d^3r \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) \{g_{ii}(r) - 1\}, \quad (1)$$

где n_i – средняя плотность числа ионов. Однако численные методы исследования функции $S_{ii}(q)$ на основе (1) имеют существенный недостаток, связанный с проблемой описания области малых волновых векторов. Согласно (1), функция $S_{ii}(q)$ при малых q определяется асимптотическим поведением парной корреляционной функции $g_{ii}(r)$, которое невозможно выяснить численными методами. Вместе с тем проблема вычисления структурного фактора $S_{ii}(q)$ при малых волновых

векторах q , благодаря точному предельному соотношению (см., например, [11])

$$\lim_{k \rightarrow 0} S_{ii}(q) = n_i T \kappa_T, \quad (2)$$

является весьма актуальной задачей, особенно при исследовании критических явлений в расширенных жидких металлах [12]. В (2) κ_T – изотермическая сжимаемость, T – температура жидкого металла в энергетических единицах. Тем самым для описания функции $S_{ii}(q)$ при малых q необходимо использование аналитических методов. Возможности такого исследования на основе эффективного потенциала $U_{ii}^{eff}(r)$ практически ограничены единственным подходом (см. выше), основанным на использовании аналитического выражения для структурного фактора $S_{ii}(q)$ системы твердых сфер диаметра σ [13, 14]. Такой вариант описания широко распространен при исследовании структуры простых жидкостей [7, 15, 16], в частности, в области малых волновых векторов [17, 18]. В приложении к жидким металлам на эту тему имеется ряд работ [19 - 21]. Однако анализ поведения структурного фактора $S_{ii}(q)$ при малых q , выполненный в [22] в рамках этого подхода для нескольких жидких металлов, выявил довольно существенные недостатки в количественном описании экспериментальных результатов, что, на наш взгляд, обусловлено следующими обстоятельствами. Во-первых, эффективный потенциал $U_{ii}^{eff}(r)$ зависит от термодинамических параметров жидкого металла и, прежде всего, от электронной плотности n_e (см. выше) [3, 4]. В силу этого справедливость соотношения (2) при использовании $U_{ii}^{eff}(r)$ не может быть доказана, так как изотермическая сжимаемость жидкого металла определяется не только ионной, но и электронной подсистемой. Во-вторых, использование в качестве исходного приближения системы твердых сфер не может быть эффективным при описании расширенных жидких металлов, так как система твердых сфер не имеет критической точки [23].

С другой стороны, имеющиеся в настоящее время данные о структуре ионной однокомпонентной кулоновской жидкости (one-component plasma – ОСП), включая результаты молекулярно-динамических расчетов [24], свидетельствует о том, что в плотных классических системах их структура качественно подобна, независимо от потенциала межчастичного взаимодействия. Безусловно, имеются и определенные отличия, например, в области малых волновых векторов, что требует последовательной реализации двухкомпонентного подхода, чему и посвящена предлагаемая работа. В последние годы использование модели ОСП в качестве исходного приближения

находит все большее применение при исследовании термодинамических свойств [25 - 27] и структуры [28 - 30] жидких металлов. В частности, в работе [31] была исследована функция $S_{ii}(q)$ при малых волновых векторах для жидких лития, натрия и калия на основе модели ОСП. Но аналитическая аппроксимация для структурного фактора $S_{ii}^{ОСП}(q)$ ионной классической ОСП [32] оказалась не вполне удовлетворительной при исследуемых термодинамических параметрах, что потребовало введения зависящего от плотности псевдопотенциала электрон-ионного взаимодействия. Аналогичная причина послужила основой для введения в работе [33] эффективного заряда ионов при описании структуры жидких металлов в рамках модели ОСП.

В данной работе проведен анализ результатов исследования структурного фактора $S_{ii}(q)$ при малых волновых векторах q на основе традиционного подхода с использованием эффективного потенциала $U_{ii}^{eff}(r)$ и подхода, использующего в качестве исходного приближения модель ОСП. Проблема описания структурного фактора $S_{ii}^{ОСП}(q)$ решена с привлечением результатов работы [34], где получена аналитическая формула для функции $S_{ii}^{ОСП}(q)$, дающая хорошее совпадение с данными молекулярно-динамических расчетов для классической ОСП. Показано, что использование модели ОСП дает не только простое, но и согласованное с термодинамическим выводом выражение для изотермической сжимаемости жидкого металла. Исследовано влияние на величину $S_{ii}(q)$ различных способов учета обменно-корреляционных эффектов в электронной жидкости и различных типов псевдопотенциала электрон-ионного взаимодействия. Имеется хорошее согласие с экспериментальными результатами.

2. Основой для теоретического исследования различных свойств жидких металлов является положение об интегральной малости электрон-ионного взаимодействия, которое реализуется в концепции псевдопотенциала U_{ei} электрон-ионного взаимодействия и возможности применения теории возмущений по псевдопотенциалу U_{ei} [3, 4]. Для вычисления структурного фактора $S_{ii}(q)$ жидкого металла использовалось равенство [11]

$$n_i S_{ii}(q) = -T \sum_{\Omega_n} L_{ii}(q, i\Omega_n), \quad (3)$$

где $L_{ii}(q, i\Omega_n)$ – ионная температурная функция Грина “плотность–плотность”, $i\Omega_n = i2\pi nT$, $n = 0, \pm 1, \dots$ В рамках диаграммной техники теории

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР том 32 № 3 1994

возмущений [35] функция Грина $L_{ii}(q, i\Omega_n)$ равна (см., например, [11])

$$L_{ii} = 1/\varepsilon[\Pi_{ii} - U_{ee}(\Pi_{ii}\Pi_{ee} - \Pi_{ei}\Pi_{ie})], \quad (4)$$

$$\varepsilon = 1 - \sum_{ab} U_{ab}\Pi_{ab} - (U_{ei}^2 - U_{ee}U_{ii})(\Pi_{ii}\Pi_{ee} - \Pi_{ei}\Pi_{ie}). \quad (5)$$

Здесь $\Pi_{ab}(q, i\Omega_n)$ – точный поляризационный оператор для частиц сортов a и b

$$U_{aa}(q) = \frac{4\pi z_a^2 e^2}{q^2},$$

$z_a e$ – заряд частиц сорта a массы m_a . В силу интегральной малости электронного взаимодействия вкладом поляризационных операторов Π_{ei} и Π_{ie} в (4) и (5) можно пренебречь (см., например, [36, 37]). Тогда

$$L_{ii}(q, i\Omega_n) = \Pi_{ii}(q, i\Omega_n) \times (1 - U_{ii}^{eff}(q, i\Omega_n)\Pi_{ii}(q, i\Omega_n))^{-1}, \quad (6)$$

$$U_{ii}^{eff}(q, i\Omega_n) = U_{ii}(q) + |U_{ei}(q)|^2 \frac{\Pi_{ee}(q, i\Omega_n)}{\varepsilon_{ee}(q, i\Omega_n)}, \quad (7)$$

$$\varepsilon_{ee}(q, i\Omega_n) = 1 - U_{ee}(q)\Pi_{ee}(q, i\Omega_n). \quad (8)$$

При дальнейших преобразованиях традиционный подход сводится к следующему [4]. В силу интегральной малости электрон-ионного взаимодействия полагается, что

$$\Pi_{ee}(q, i\Omega_n) \approx \Pi_{ee}^{OCP}(q, i\Omega_n), \quad (9)$$

а соотношение (3) с учетом возможности классического описания ионной подсистемы записывается в виде

$$n_i S_{ii}(q) = -TL_{ii}^{(0)}(q, 0) = -T \frac{\Pi_{ii}(q, 0)}{1 - U_{ii}^{eff}(q)\Pi_{ii}(q, 0)}. \quad (10)$$

В (10) учтено, что, согласно (7),

$$U_{ii}^{eff}(q, i\Omega_n = 0) = U_{ii}^{eff}(q) = U_{ii}(q) + |U_{ei}(q)|^2 \frac{\Pi_{ee}(q, 0)}{\varepsilon_{ee}(q, 0)}. \quad (11)$$

Соотношение (10) формально отвечает однокомпонентной ионной жидкости, характеризующейся эффективным потенциалом $U_{ii}^{eff}(q)$ (11), что и служит “обоснованием” традиционного подхода. Очевидно, такое “обоснование” не является последовательным с теоретической точки зрения. В силу этого для анализа рассматриваемой модели проведем сравнение с экспериментальными результатами.

Согласно (11), эффективный парный потенциал межиионного взаимодействия определяется следующим выражением:

$$U_{ii}^{eff}(r) = \frac{1}{2\pi r^2} \int_0^\infty dq \sin(qr) U_{ii}^{eff}(q). \quad (12)$$

Как следует из (11) и (12), потенциал $U_{ii}^{eff}(r)$ существенно зависит от способа учета обменно-корреляционных эффектов в вырожденной электронной жидкости при вычислении поляризационного оператора $\Pi_{ee}^{OCP}(q, 0)$ и выбора модели для псевдопотенциала во всей области волновых векторов q [4]. В теории жидких металлов в настоящее время отсутствует последовательная процедура определения этих величин, поэтому в данной работе были использованы наиболее распространенные модели для функций $\Pi_{ee}^{OCP}(q, 0)$ и $U_{ei}(q)$.

В частности, поляризационный оператор $\Pi_{ee}^{OCP}(q, 0)$ определялся соотношением (см. обзоры [38, 39])

$$\Pi_{ee}^{OCP}(q, 0) = \frac{\Pi_{ee}^{RPA}(q, 0)}{1 + U_{ee}(q)G_{ee}(q)\Pi_{ee}^{RPA}(q, 0)}, \quad (13)$$

где $\Pi_{ee}^{RPA}(q, 0)$ – поляризационный оператор электронной жидкости в приближении хаотических фаз (RPA – random phase approximation) [39]; $G_{ee}(q)$ – поправка на локальное поле, выражение для которой взято из работы [40]. В свою очередь, для псевдопотенциала электрон-ионного взаимодействия $U_{ei}(q)$ использовалась модель Ашкрофта

$$U_{ei}(q) = \frac{4\pi z_i e^2}{q^2} \cos(qR_A), \quad (14)$$

где параметр R_A характеризует радиус иона соответствующего металла и является подгоночным параметром. Типичные значения величины R_A для различных металлов можно найти в [41]. В данной работе мы ограничились рассмотрением двух жидких металлов – натрия и магния. Соответствующие параметры этих металлов представлены в табл. 1 ($a_0 = \hbar^2/m_e e^2$ – боровский радиус), а результаты расчета эффективных потенциалов $U_{ii}^{eff}(r)$ – на рис. 1 (см. также [22]).

Основой для дальнейшего рассмотрения является принятое в теории простых жидкостей утверждение о том, что доминирующую роль в формировании структуры жидкости играют силы отталкивания [7]. Именно это обстоятельство позволяет использовать в качестве исходной системы жидкость твердых сфер при исследовании $S_{ii}(q)$ в рамках принятого подхода. В этом случае необходимо учитывать два фактора, отличающих

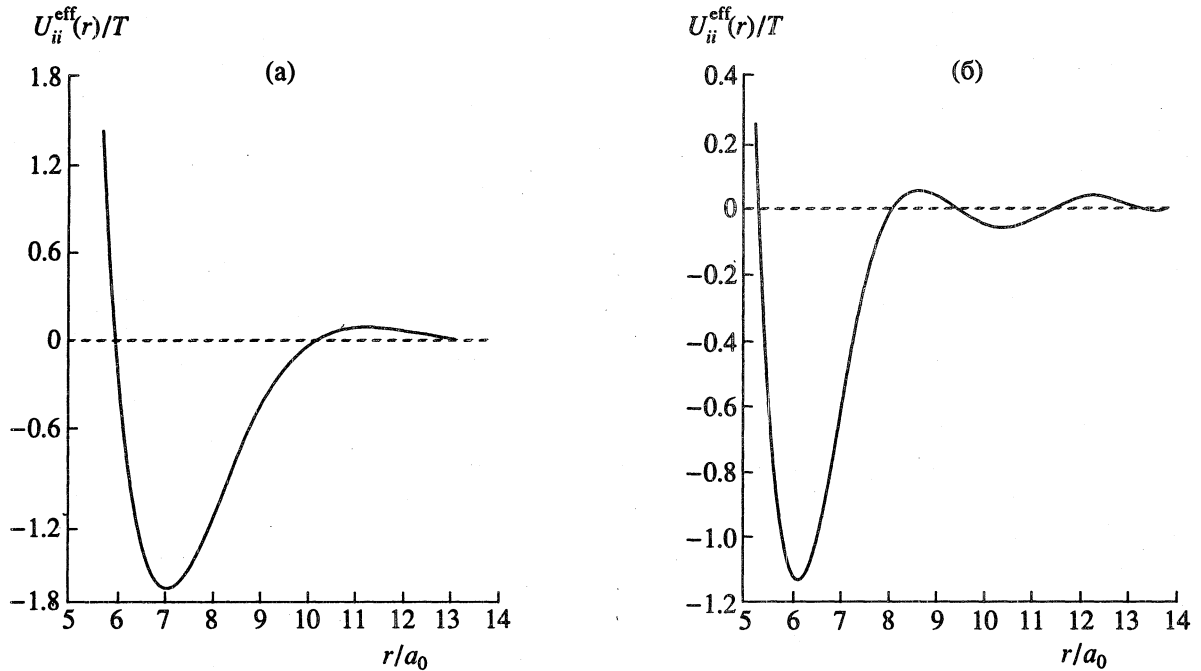


Рис. 1. Эффективный потенциал межоионного взаимодействия $U_{ii}^{\text{eff}}(r)$: для натрия (а) ($R_A = 1.71$ а. е.) и магния (б) ($R_A = 1.35$ а. е.).

потенциал $U_{ii}^{\text{eff}}(r)$ от потенциала твердых сфер $U_{\sigma}(r)$: мягкость отталкивательной ветви потенциала $U_{ii}^{\text{eff}}(r)$ и наличие притяжения. При этом применимость соответствующей теории главным образом связана с удачным разбиением потенциала $U_{ii}^{\text{eff}}(r)$. Наиболее эффективный способ такого разбиения предложен в [15]:

$$U_{ii}^{\text{eff}}(r) = U_0(r) + U_1(r), \quad (15)$$

где $U_0(r)$ – отталкивательная ветвь,

$$U_0(r) = \begin{cases} U_{ii}^{\text{eff}}(r) - U_{ii}^{\text{eff}}(r_0), & r < r_0 \\ 0, & r > r_0; \end{cases} \quad (16)$$

$U_1(r)$ – притягивательная ветвь потенциала $U_{ii}^{\text{eff}}(r)$

$$U_1(r) = \begin{cases} U_{ii}^{\text{eff}}(r_0), & r < r_0 \\ U_{ii}^{\text{eff}}(r), & r > r_0. \end{cases} \quad (17)$$

Здесь r_0 – точка минимума потенциала $U_{ii}^{\text{eff}}(r)$ (см. рис. 1). Очевидно, такое разбиение потенциала $U_{ii}^{\text{eff}}(r)$ полностью учитывает отталкивательную ветвь вне рамок теории возмущений. Тогда в рамках теории возмущений по мягкости отталкивательной ветви (отличие $U_0(r)$ от $U_{\sigma}(r)$) структурный фактор $S_0(q)$, отвечающий потенциалу $U_0(r)$, имеет вид [16]

$$S_0(q) = (S_{\sigma}^{-1}(q) - n_i B(q))^{-1}, \quad (18)$$

где $B(q)$ – фурье-компонента функции $B(r)$

$$B(r) = y_{\sigma}(r) \left(\exp\left(-\frac{U_0(r)}{T}\right) - \exp\left(-\frac{U_{\sigma}(r)}{T}\right) \right), \quad (19)$$

$$y_{\sigma}(r) = g_{\sigma}(r) \exp\left(-\frac{U_{\sigma}(r)}{T}\right),$$

$g_{\sigma}(r)$ – парная корреляционная функция системы твердых сфер. При этом диаметр σ определяется из условия

$$B(0) \equiv 4\pi \int_0^{\infty} dr r^2 B(r) = 0 \quad (20)$$

(см. табл. 1). В свою очередь, притягивательная часть $U_1(r)$ потенциала $U_{ii}^{\text{eff}}(r)$ учитывается непосредственно по теории возмущений, что приводит к следующему выражению для структурного фактора [17]:

$$S_{\text{MDA}}(q) = \left(S_0^{-1}(q) + \frac{n_i U_1(q)}{T} + \frac{n_i}{T} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} U_1(k) \left(\frac{\partial}{\partial n_i} + \frac{1}{2} n_i \frac{\partial^2}{\partial n_i^2} \right) S_0(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \right)^{-1} \quad (21)$$

Соотношение (21) получено в рамках приближения средней плотности (mean density approxima-

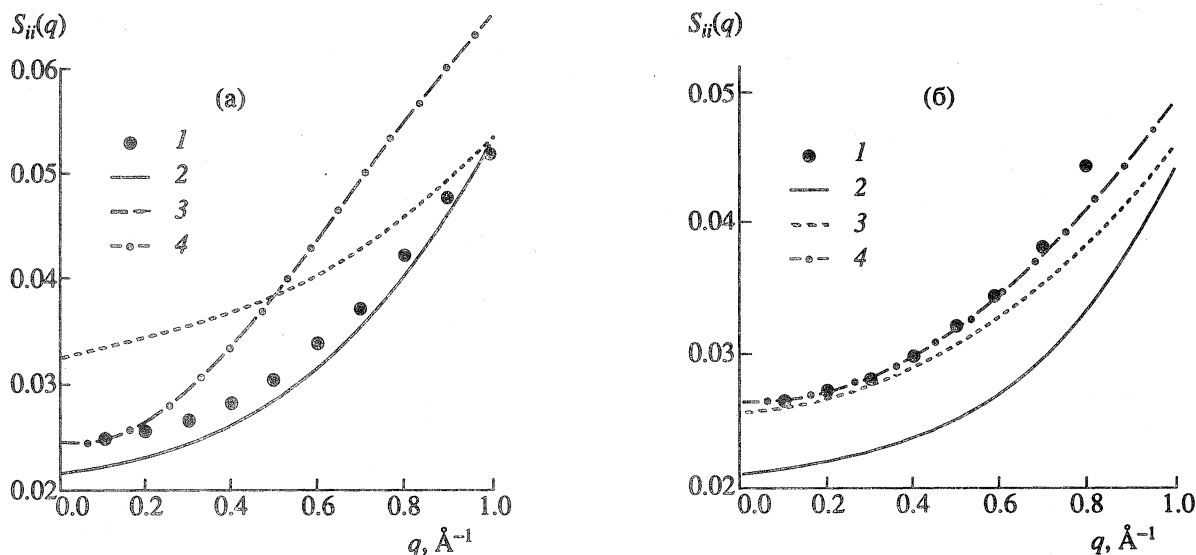


Рис. 2. Статический структурный фактор $S_{ii}(q)$ в рамках традиционного подхода для натрия (а) ($R_A = 1.71$ а. е.) и магния (б) ($R_A = 1.35$ а. е.): 1 – экспериментальные данные [2], 2 – расчет $S_0(q)$ (12), 3 – расчет $S_{RPA}(q)$ (15), 4 – расчет $S_{MDA}(q)$ (14) [22].

tion – MDA). Если в (21) пренебречь интегральным слагаемым, то соответствующий результат

$$S_{RPA}(q) = \left(S_0^{-1}(q) + \frac{n_i U_1(q)}{T} \right)^{-1} \quad (22)$$

отвечает приближению RPA для структурного фактора.

Как видно из (18) - (22), несмотря на использование аналитического приближения для $S_\sigma(q)$ [13, 14], исследование структуры жидкого металла в рамках традиционного подхода остается достаточно сложной вычислительной задачей. Это обстоятельство усугубляется отмеченной выше неоднозначностью в выборе моделей для функций $\Pi_{ee}^{OCP}(q, 0)$ и $U_{ei}(q)$. В связи с этим обычно при расчете предпочтение отдается тому значению параметра R_A псевдопотенциала Ашкрофта (14), при котором наиболее точно выполняется предельное соотношение (2) с использованием экспериментальных значений сжимаемости [42, 43]

и экстраполированных значений величины $S_{ii}(q \rightarrow 0)$ [2] (табл. 2) (см. также [22]).

Экспериментальные данные [2] и результаты расчетов структурных факторов жидких натрия и магния на основе (11) - (22) в области малых волновых векторов представлены на рис. 2 (см. также [22]). Имеется не только существенное отличие расчетных результатов от экспериментальных данных, но и довольно большое количественное отличие между результатами для структурных факторов $S_\sigma(q)$ (18) и $S_{MDA}(q)$ (21).

3. Перейдем к исследованию возможности вычисления структурного фактора $S_{ii}(q)$ жидкого металла на основе модели ОСР.

При последовательном рассмотрении формул (6) - (8) для функции Грина $L_{ii}^{(0)}(q, i\Omega_n)$ с точки зрения уже использованной интегральной малости электрон-ионного взаимодействия при вычислении поляризационного оператора $\Pi_{ii}(q, i\Omega_n)$

Таблица 1

Металл	T, K	$n_i a_0^3 \times 10^3$	z_i	R_A/a_0	σ/a_0	$\eta = \frac{\pi n_i \sigma^3}{6}$
Na	378	3.60	1	1.67	6.17	0.469
				1.71	6.27	0.491
Mg	953	5.67	2	1.35	5.41	0.444
				1.39	5.49	0.465

Таблица 2

Металл	R_A/a_0	$S_0(q \rightarrow 0)$	$S_{RPA}(q \rightarrow 0)$	$S_{MDA}(q \rightarrow 0)$	$S_{ii}^{Эксп}(q \rightarrow 0)$
Na	1.67	0.0269	0.0465	0.0342	0.025 [2]
	1.71	0.0217	0.0331	0.0246	(0.023 [42])
Mg	1.35	0.0209	0.0258	0.0268	0.027 [2]
	1.39	0.0169	0.0206	0.0223	(0.025 [43])

должно быть использовано приближение, аналогичное (9), т.е.

$$\Pi_{ii}(q, i\Omega_n) = \Pi_{ii}^{\text{OCP}}(q, i\Omega_n). \quad (23)$$

Тогда, учитывая (6) - (9), (23), а также результаты работ [11, 44], структурный фактор $S_{ii}(q)$ (3) жидкого металла с точностью до q^2 равен

$$n_i S_{ii}(q) = -T \frac{\Pi_{ii}^{\text{OCP}}(q, 0)}{1 - U_{ii}^{\text{eff}}(q) \Pi_{ii}^{\text{OCP}}(q, 0)} + \frac{\hbar^2 q^2 n_i}{12 m_i T}. \quad (24)$$

Учитывая далее классичность ионной подсистемы, имеем [24]

$$\begin{aligned} \Pi_{ii}^{\text{OCP}}(q, 0) &= L_{ii}^{\text{OCP}}(q, 0) (1 + U_{ii}(q) L_{ii}^{\text{OCP}}(q, 0))^{-1} = \\ &= -\frac{n_i}{T} S_{ii}^{\text{OCP}}(q) \left(1 - \frac{k_D^2}{q^2} S_{ii}^{\text{OCP}}(q, 0) \right)^{-1}, \end{aligned} \quad (25)$$

где $k_D = (4\pi n_i z_i^2 e^2 / T)^{1/2}$ - волновой вектор Дебая для ионов. Следовательно,

$$S_{ii}(q) = \left(S_{ii}^{\text{OCP}^{-1}}(q) + \frac{k_D^2}{q^2} \left(\frac{U_{ii}^{\text{eff}}}{U_{ii}} - 1 \right) \right)^{-1} + \frac{\hbar^2 q^2}{12 m_i T}. \quad (26)$$

Тем самым, при прочих равных условиях структурный фактор $S_{ii}(q)$ жидкого металла при малых волновых векторах полностью определяется величиной $S_{ii}^{\text{OCP}}(q)$.

Для оценки эффективности соотношений (24) - (26) остановимся подробнее на рассмотрении предельного соотношения (2). Тогда, учитывая, что (см., например, [11])

$$\lim_{q \rightarrow 0} \Pi_{aa}^{\text{OCP}}(q, 0) = -n_a^2 \kappa_a, \quad (27)$$

где κ_a - изотермическая сжимаемость ОСР частиц сорта a в компенсирующем фоне, получаем для изотермической сжимаемости жидкого металла

$$\kappa_T = \frac{\kappa_e \kappa_i}{\kappa_e + \kappa_i + 4\pi e^2 n_e^2 R_A^2 \kappa_e \kappa_i}. \quad (28)$$

При использовании интерполяционных формул для сжимаемости классической ионной ОСР [45]

$$\frac{\kappa_i^0}{\kappa_i} = f_i(\Gamma) = 1 + \frac{4}{9} a \Gamma + \frac{13}{36} b \Gamma^{1/4} + \frac{11}{36} c \Gamma^{-1/4} + \frac{d}{3}, \quad (29)$$

$$\kappa_i^0 = (n_i T)^{-1}, \quad \Gamma = \frac{z_i^2 e^2}{T} \left(\frac{4\pi n_i}{3} \right)^{-1/3},$$

$a = -0.897744$, $b = -0.95043$, $c = 0.18956$, $d = -0.81487$ и сжимаемости вырожденной электронной жидкости [46]

$$\begin{aligned} \frac{\kappa_e^{(0)}}{\kappa_e} &= f_e(r_S), \quad \kappa_e^0 = \frac{3}{2n_e \epsilon_F}, \quad \epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e}, \\ k_F &= (3\pi^2 n_e)^{1/3}, \quad f_e(r_S) = 1 - \frac{\alpha r_S}{\pi} - \\ &\quad - \frac{\alpha^2 r_S^2 b_0}{12(1 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3)} \times \end{aligned} \quad (30)$$

$$\times \left\{ 6 + 5b_1 x + \frac{x(1 + b_1 x)(b_1 + 2b_2 x + 3b_3 x^2)}{1 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3} \right\},$$

$x = r_S^{1/2}$, $r_S = (4\pi n_e / 3)^{-1/3} a_0^{-1}$, $\alpha = (4/9\pi)^{1/3}$, $b_0 = 0.0621814$, $b_1 = 9.81379$, $b_2 = 2.82224$, $b_3 = 0.736411$, полученных на основе обработки результатов молекулярно-динамических расчетов и расчетов по методу Монте-Карло, соотношение (28) дает прекрасное количественное описание экспериментальных данных по сжимаемости в широком диапазоне термодинамических параметров жидких металлов при заданном значении параметра R_A псевдопотенциала Ашкрофта [47]. При этом следует иметь в виду, что основным критерием справедливости теории при описании структурного фактора в области малых волновых векторов является согласованность выражения для изотермической сжимаемости κ_T , полученного из предельного соотношения (2), и ее термодинамического определения

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T, \quad (31)$$

где V - объем; P - давление в рассматриваемой системе. В рамках традиционного подхода с использованием эффективного потенциала $U_{ii}^{\text{eff}}(r)$, как было отмечено выше, такое согласование невозможно при строгом рассмотрении [4]. В связи с этим используем модель ОСР в качестве исходной системы для определения величины κ_T для жидкого металла на основе (31).

В этом случае свободная энергия

$$F = -T \ln \text{Sp} \exp(-\hat{H}/T) \quad (32)$$

жидкого металла должна вычисляться в низшем приближении теории возмущений по электрон-ионному взаимодействию (индекс (0)). Представим точный гамильтониан \hat{H} жидкометаллической плазмы в виде

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \delta \hat{U}_{ei}, \quad (33)$$

$$\hat{H}^{(0)} = \hat{H}_{ee}^{\text{OCP}} + \hat{H}_{ii}^{\text{OCP}} + V^{-1} 2\pi z_i e^2 R_A^2 \hat{N}_e \hat{N}_i, \quad (34)$$

$$\delta \hat{U}_{ei} = V^{-1} \sum_k U_{ei}(k) \delta \hat{n}_k^e \delta \hat{n}_{-k}^i, \quad (35)$$

где $\hat{H}_{aa}^{\text{OCP}}$ – точный гамильтониан ОСР частиц сорта a в компенсирующем фоне; \hat{N}_a – оператор полного числа частиц сорта a , который в каноническом ансамбле является C -числом:

$$\hat{N}_a = N_a = n_a V. \quad (36)$$

δn_a^a – фурье-компонента оператора плотности числа частиц сорта a . Таким образом, свободная энергия $F^{(0)}$, отвечающая низшему приближению теории возмущений по гамильтониану $\delta \hat{U}_{ei}$ (интегральная малость электрон-ионного взаимодействия: (6) - (9), (23)), равна

$$F^{(0)} = F_e^{\text{OCP}} + F_i^{\text{OCP}} + \frac{1}{V} 2\pi N_e N_i z_i e^2 R_A^2, \quad (37)$$

где F_{aa}^{OCP} – точная свободная энергия ОСР частиц сорта a в компенсирующем фоне. Тогда давление жидкого металла в соответствующем приближении определяется соотношением

$$P^{(0)} = - \left(\frac{\partial F^{(0)}}{\partial V} \right)_T = P_e^{\text{OCP}} + P_i^{\text{OCP}} + 2\pi e^2 R_A^2 n_e^2, \quad (38)$$

а изотермическая сжимаемость κ_T – соотношением (28). В (38)

$$P_a^{\text{OCP}} = - \left(\frac{\partial F_a^{\text{OCP}}}{\partial V} \right)_T$$

и учтено условие электронейтральности.

4. Таким образом, в отличие от традиционного подхода использование в качестве исходной системы модели ОСР приводит к согласованному выражению для изотермической сжимаемости жидкого металла. Тем самым соотношение (28) для κ_T может быть использовано для определения характерной величины $\phi(0)$ псевдопотенциала электрон-ионного взаимодействия

$$\phi(0) = \lim_{q \rightarrow 0} \phi(q), \quad \phi(q) = 4\pi z_i e^2 / q^2 + U_{ei}(q). \quad (39)$$

Для псевдопотенциала Ашкрофта

$$\phi(0) = 2\pi e^2 R_A^2. \quad (40)$$

В частности, при использовании формул (29), (30) получаем для натрия: $R_A = 1.67$ а. е., для магния: $R_A = 1.16$ а. е. (см. табл. 1 и 2).

Для вычисления структурного фактора жидкого металла $S_{ii}(q)$ на основе (26) при малых, но ненулевых волновых векторах необходимо, согласно (11), (14), (26), (39), определить поведение при соответствующих волновых векторах поправки на локальное поле для электронной жидкости $G_{ee}(q)$, статического структурного фактора

классической ионной жидкости $S_{ii}^{\text{OCP}}(q)$ и, вообще говоря, локальной модельной части $\phi(q)$ псевдопотенциала электрон-ионного взаимодействия.

Наиболее благополучно обстоит дело с функцией $S_{ii}^{\text{OCP}}(q)$, которая подробно и тщательно исследована методами Монте-Карло и молекулярной динамики (см. обзоры [24, 39]). Более того, в [34] получена интерполяционная формула, хорошо описывающая результаты численных расчетов для $S_{ii}^{\text{OCP}}(q)$ в широкой области волновых векторов и термодинамических параметров классической ОСР и удовлетворяющая известному предельному соотношению [24] (см. (25), (27))

$$S_{ii}^{\text{OCP}}(q \rightarrow 0) = \left(f_i(\Gamma) + \frac{k_D^2}{q^2} \right)^{-1}, \quad (41)$$

где величина $f_i(\Gamma)$ определяется формулой (29).

Несмотря на огромное количество работ, посвященных исследованию обменно-корреляционных эффектов в вырожденной электронной жидкости (см. обзоры [38, 39]), в настоящее время, к сожалению, отсутствует достоверная информация о виде функции $G_{ee}(q)$ в широкой области волновых векторов q . Исключение составляет область предельно малых значений q , где функция $G_{ee}(q)$ с учетом (27) может быть представлена в виде

$$G_{ee}(q \rightarrow 0) = \gamma_0(r_s) \left(\frac{q}{k_F} \right)^2, \quad (42)$$

функция $\gamma_0(r_s)$ определяется равенством

$$\frac{\kappa_e^{(0)}}{\kappa_e} = f_e(r_s) = 1 - \frac{4\alpha r_s}{\pi} \gamma_0(r_s), \quad (43)$$

а величина $f_e(r_s)$ – формулой (30). В данной работе использовались два аналитических выражения для функции $G_{ee}(q)$, удовлетворяющих предельному соотношению (42) и полученных различными методами. Первое из них представлено в [48] и имеет вид

$$G_{ee}^{\text{Kl}}(q) = \frac{x^2}{4x^2 + \xi(r_s)} + \frac{x^2}{\xi(r_s)}, \quad (44)$$

$$x = q/2k_F, \quad \xi = 1/(2\gamma_0(r_s)). \quad (45)$$

Вместе с тем в [49, 50] было показано, что функция $G_{ee}^{\text{Kl}}(q)$ (44) имеет неправильное поведение в области больших волновых векторов q . Поэтому в расчетах было рассмотрено также

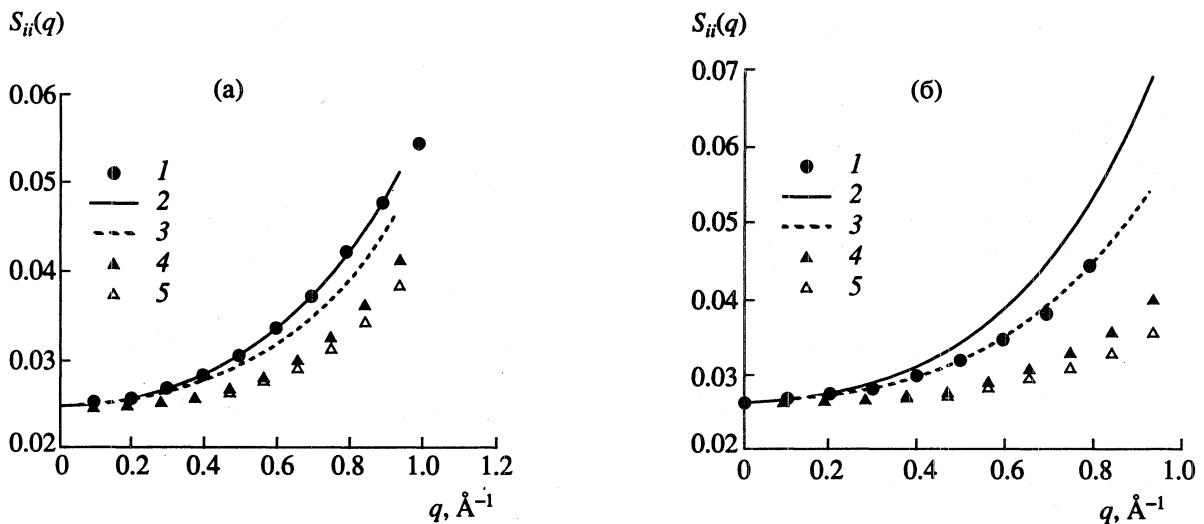


Рис. 3. Статический структурный фактор $S_{ii}(q)$ на основе модели ОСП и псевдопотенциала Ашкрофта для натрия (а) ($R_A = 1.67$ а. е.) и магния (б) ($R_A = 1.16$ а. е.): 1 – экспериментальные данные [2], 2 – расчет по формулам (47) – (49), 3 – расчет по формулам (42), (48), (49), 4 – расчет по формулам (44), (48), (49), 5 – расчет по формулам (46), (48), (49).

разложение функции $G_{ee}^{KI}(q)$ в области малых волновых векторов

$$G_{ee}^{KI}(q, 0) = \gamma_0(r_s) \left(\frac{q}{k_F} \right)^2 - \gamma_0^2(r_s) \left(\frac{q}{k_F} \right)^4. \quad (46)$$

Кроме того, в предлагаемой работе был использован результат, полученный в [51] на основе обширных самосогласованных расчетов диэлектрической проницаемости электронной жидкости и имеющий вид

$$G^{UI}(q) = A \left(\frac{q}{k_F} \right)^4 + B \left(\frac{q}{k_F} \right)^2 + C + \left\{ A \left(\frac{q}{k_F} \right)^4 + \left(B + \frac{3}{8}A \right) \left(\frac{q}{k_F} \right)^2 - C \right\} \times \frac{4k_F^2 - q^2}{4k_F q} \ln \left| \frac{2k_F + q}{2k_F - q} \right|, \quad (47)$$

где $A = 0.029$ ($0 \leq r_s \leq 15$),

$$B = \frac{9}{16} \gamma_0(r_s) - \frac{3}{64} (1 - g(0)) - \frac{16}{15} A,$$

$$C = -\frac{3}{4} \gamma_0(r_s) + \frac{9}{16} (1 - g(0)) - \frac{16}{5} A,$$

$$g(0) = \frac{1}{8} \left(\frac{z}{I_1(z)} \right)^2, \quad z = 4 \left(\frac{\alpha r_s}{\pi} \right)^{1/2}.$$

$I_1(z)$ – модифицированная функция Бесселя первого рода и первого порядка. И хотя использованный в [51] подход к вычислению поправки на локальное поле не лишен недостатков, результат (47)

в настоящее время получил наибольшее распространение.

Численные результаты расчетов по формуле (26) с использованием псевдопотенциала Ашкрофта (14) для натрия и магния представлены на рис. 3. Прежде всего отметим, что в рассматриваемой области волновых векторов для статического структурного фактора $S_{ii}^{OSP}(q)$ с очень хорошей точностью может быть использовано предельное соотношение (41). Тогда величина $S_{ii}(q)$ для жидкого металла при малых волновых векторах имеет вид

$$S_{ii}(q) = \left[f_i(\Gamma) + \frac{k_D^2}{q^2} \left(1 - \frac{U_{ei}^2(q)}{U_{ii}(q)U_{ee}(q)} \times \frac{\Phi_{ee}(q)}{1 - (1 - G_{ee}(q)) \Phi_{ee}(q)} \right) \right]^{-1} + \frac{\hbar^2 q^2}{12m_i T}, \quad (48)$$

$$\Phi_{ee}(q) = -\frac{k_{TF}^2}{q^2} \left(\frac{1}{2} + \frac{k_F}{2q} \left(1 - \frac{q^2}{4k_F^2} \right) \ln \left| \frac{2k_F + q}{2k_F - q} \right| \right), \quad (49)$$

где $k_{TF}^2 = 3\omega_e^2/V_F^2$ – волновой вектор Томаса–Ферми; $V_F = \hbar k_F/m_e$ – скорость Ферми; $\omega_e = (4\pi n_e e^2/m_e)^{1/2}$ – электронная плазменная частота.

Из рис. 3а, 3б видно, что использование поправки на локальное поле $G_{ee}^{KI}(q)$ (44), (45) и $G_{ee}^{KI}(q; 0)$ (46) дает явно заниженные результаты в сравнении с экспериментальными данными. Это позволяет сделать вывод об ошибочности приближений (44) – (46) для функции $G_{ee}(q)$ и в области малых волновых векторов. Использование же функции

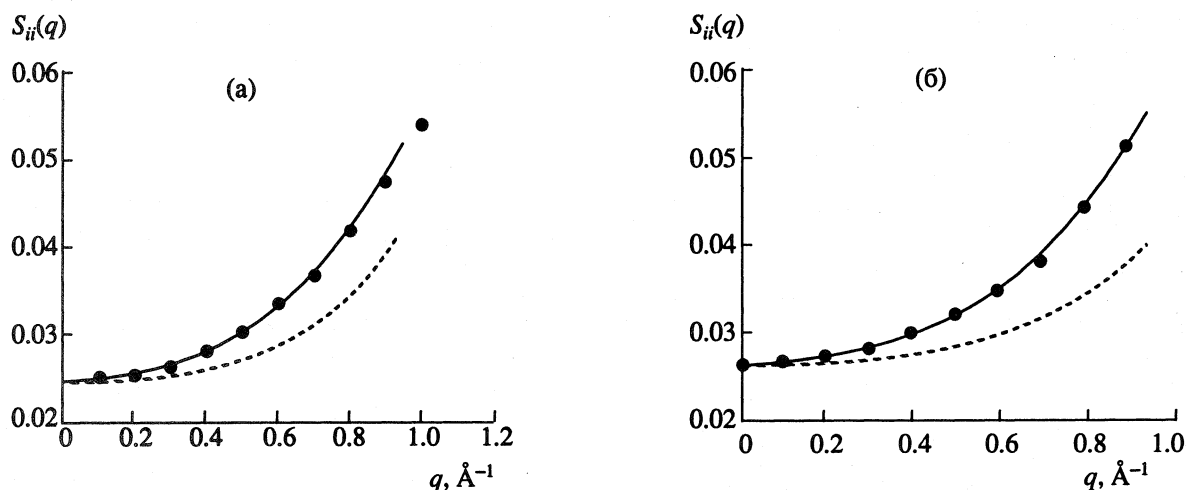


Рис. 4. Статический структурный фактор $S_{ii}(q)$ на основе модели ОСР и псевдопотенциала Краско–Гурского для натрия (а) ($R_c = 0.38$ а. е., $a = 4.4$) и магния (б) ($R_c = 0.25$ а. е., $a = 5$). Обозначения, как на рис. 3.

$G^{UI}(q)$ (47) в качестве поправки на локальное поле приводит к прекрасному согласию с экспериментальными данными для натрия (рис. 3а). В то же время для магния (рис. 3б) к аналогичному результату приводит использование предельного соотношения (42) для функции $G_{ee}(q)$. Такое положение вещей представляется весьма странным, так как соотношение (42) не может быть справедливым во всей рассматриваемой области волновых векторов q . Выход из создавшейся ситуации связан с анализом используемого псевдопотенциала электрон-ионного взаимодействия $U_{ei}(q)$. Дело в том, что, согласно современным представлениям теории металлов [4], вид модельной части $\phi(q)$ (39) псевдопотенциала $U_{ei}(q)$ является практически полностью неопределенной функцией и строится из физических соображений. Используемый выше псевдопотенциал Ашкрофта является простейшим из известных псевдопотенциалов, благодаря чему он получил наибольшее распространение. Тем не менее, как показано в [52], этот псевдопотенциал, как, впрочем, и многие другие, обладает существенным недостатком, связанным с разрывностью его в r -пространстве, что приводит к нефизическим особенностям при вычислении термодинамических функций [53]. В связи с этим Краско и Гурский [52] предложили псевдопотенциал, который не обладает указанным недостатком и имеет следующий вид:

$$U_{ei}^{KГ}(q) = -\frac{4\pi z_i e_i^2}{q^2} \frac{1 - (2a - 1)(qR_c)^2}{[1 + (qR_c)^2]^2}. \quad (50)$$

Параметры a и R_c являются, как обычно, свободными параметрами и определяются с помощью соотношения (28) для изотермической

сжимаемости K_T жидкого металла с учетом равенства (см. (40))

$$R_A^2 = 2R_c^2(2a + 1). \quad (51)$$

Как и следовало ожидать, использование поправки на локальное поле $G^{UI}(q)$ (47) и псевдопотенциала $U_{ei}^{KГ}(q)$ (50) приводит к хорошему согласию с экспериментальными данными (рис. 4а – натрий: $R_c = 0.38$ а. е., $a = 4.4$; рис. 4б – магний: $R_c = 0.25$ а. е., $a = 5.0$).

Представленные выше результаты показывают несомненные преимущества подхода, связанного с использованием модели ОСР для описания структуры жидких металлов, по крайней мере, в области малых волновых векторов. Проведенный анализ еще раз подтвердил существование проблем современной теории жидких металлов, обусловленных неопределенностью в выборе функций $G_{ee}(q)$ и $U_{ei}(q)$. Эти же проблемы возникают и при исследовании других свойств жидких металлов [4]. Вместе с тем простая аналитическая формула (26) (см. также (48)) для структурного фактора $S_{ii}(q)$ жидких металлов может служить основой для формулировки обратной задачи: определение поправки на локальное поле $G_{ee}(q)$ и псевдопотенциала $U_{ei}(q)$ по экспериментальным значениям структурного фактора жидкого металла. Однако реализация этой задачи выходит за рамки данной работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ashcroft N.W., Lekner J. // Phys. Rev. 1966. V. 145. P. 83.
2. Waseda Y. The Structure of Non-crystalline Materials. N. Y.: Mc Graw-Hill, 1980.
3. Ashcroft N.W., Stroud D. // Solid State Phys. 1978. V. 33. P. 1.

4. Коваленко Н.П., Красный Ю.П., Тригер С.А. Статистическая теория жидких металлов. М.: Наука, 1990.
5. Mountain R.D. // J. Phys. 1978. V. F8. P. 1637.
6. Tanaka M. // J. Phys. 1980. V. F10. P. 2581.
7. Физика простых жидкостей // Под ред. Темперли Г., Раулинсона Дж., Рашбрука Дж. М.: Мир, 1971.
8. Gonzalez D.J., Ng D.A., Silbert M. // J. Non-Cryst. Solids. 1990. V. 117&118. P. 469.
9. Hoshino K., Matsuda N., Watabe M. // J. Phys. Soc. Japan. 1990. V. 59. P. 2027.
10. Rosenfeld Y., Ashcroft N.W. // Phys. Rev. 1979. V. A20. P. 1208.
11. Бобров В.Б., Ключников Н.И., Тригер С.А. // ТМФ. 1991. Т. 89. С. 263.
12. Winter R., Hensel F. // Phys. Chem. Liq. 1989. V. 20. P. 1.
13. Wertheim M.S. // Phys. Rev. Lett. 1963. V. 10. P. 321.
14. Thiele E. // J. Chem. Phys. 1963. V. 39. P. 474.
15. Weeks J.D., Chandler D., Andersen H.C. // J. Chem. Phys. 1971. V. 54. P. 5237.
16. Jacobs R.E., Andersen H.C. // Chem. Phys. 1975. V. 10. P. 73.
17. Henderson R.L., Ashcroft N.W. // Phys. Rev. 1976. V. A13. P. 859.
18. Evans R., Schirmacher W. // J. Phys. 1978. V. C11. P. 2437.
19. Bratkovsky A.M., Vaks V.G., Kravchuk S.P., Trefilov A.V. // J. Phys. 1982. V. F12. P. 1293.
20. Mc Laughlin I.L., Young W.H. // J. Phys. 1984. V. F14. P. 1.
21. Kahl G., Hafner J. // Phys. Rev. 1984. V. A29. P. 3310.
22. Mc Laughlin I.L., Young W.H. // J. Phys. 1982. V. F12. P. 245.
23. Балеcky P. Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 1. М.: Мир, 1978.
24. Baus M., Hansen J.P. // Phys. Rep. 1980. V. 59. P. 1.
25. Ross M., De Witt H.E., Hubbard W.B. // Phys. Rev. 1981. V. A24. P. 1016.
26. Bratkovsky A.M., Vaks B.G., Trefilov A.V. // J. Phys. 1983. V. F13. P. 2517.
27. Montella N., Senatore G., Tosi M.P. // Physica. 1984. V. B+C124. P. 22.
28. Chaturvedi D.K., Senatore G., Tosi M.P. // Nuovo Cimento. 1981. V. B62. P. 375.
29. Singh H.B., Holz A. // Phys. Rev. 1983. V. A28. P. 1108.
30. Trigger S.A. // J. Phys. 1984. V. F14. P. L93.
31. Khanna K.N., Bretonnet J.L. // Phys. Chem. Liq. 1986. V. 16. P. 55.
32. Baus M., Hansen J.P. // J. Phys. 1979. V. C12. P. L55.
33. Iwamatsu M. // Physica. 1993. V. B183. P. 419.
34. Bratkovsky A.M. // J. Phys.: Cond. Matt. 1989. V. 1. P. 3453.
35. Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Наука, 1962.
36. Trigger S.A. // Phys. Lett. 1976. V. 56A. P. 325.
37. Postogna F., Tosi M.P. // Nuovo Cimento. 1980. V. B55. P. 349.
38. Горобченко В.Д., Максимов Е.Г. // УФН. 1980. Т. 130. С. 165.
39. Ichimaru S. // Rev. Mod. Phys. 1982. V. 54. P. 1017.
40. Vashishta P., Singwi K.S. // Phys. Rev. 1972. V. B6. P. 875. Ibid. V. B6. P. 4883.
41. Cohen M.L., Heine V. // Solid State Phys. 1970. V. 24. P. 37.
42. Webber G.M.B., Stephens R.W.B. // Phys. Acoustics. 1968. V. 4B. P. 53.
43. Mc Alister S.P., Crozier E.D., Cochran J.F. // Can. J. Phys. 1974. V. 52. P. 1847.
44. Аллахяров Э.А., Бобров В.Б., Тригер С.А. // ТВТ. 1993. Т. 31. № 1. С. 33.
45. Slattery W.L., Doolen G.D., De Witt H.E. // Phys. Rev. 1982. V. A26. P. 2255.
46. Vosko S.H., Wilk L., Nusair M. // Can. J. Phys. 1980. V. 58. P. 1200.
47. Бобров В.Б., Власов Ю.П., Тригер С.А. // ТВТ. 1992. Т. 30. № 4. С. 641.
48. Kleinman L. // Phys. Rev. 1967. V. 160. P. 585., Ibid. 1968. V. 172. P. 383.
49. Singwi K.S., Sjolander A., Tosi M.P., Land R.H. // Phys. Rev. 1970. V. B1. P. 1044.
50. Tosi M.P. // Nuovo Cimento. 1969. V. 1. P. 160.
51. Utsimi K., Ichimaru S. // Phys. Rev. 1981. V. B23. P. 3291.; Ibid. V. B24. P. 3220.
52. Краско Г.А., Гурский З.А. // Письма в ЖЭТФ. 1969. Т. 9. С. 596.
53. Animalu A.O.E. // Phil. Mag. 1966. V. 13. P. 53.