

ІНСТИТУТ  
ФІЗИКИ  
КОНДЕНСОВАНИХ  
СИСТЕМ

ICMP-00-09U

М.Ваврух\*, В.Паславський, Н.Тишко\*

Розрахунок температурної залежності ефективного  
двочастинкового потенціалу взаємодії в іонній моделі металу

\*Львівський державний університет, 79005, Львів,  
Кирила і Мефодія, 8

УДК: 537.31;311.31.001

PACS: 05.30.Fk

**Розрахунок температурної залежності ефективного двочастинкового потенціалу взаємодії в іонній моделі металу**

Ваврух М., Паславський В., Тишко Н.

**Анотація.** В рамках базисного підходу досліджено температурну залежність ефективних двоіонних потенціалів взаємодії в іонній моделі металу в наближенні локального поля для випадків металічної фази водню та ряду простих металів (*Li, Na, K, Rb, Mg*) із врахуванням дво- та тричастинкових електронних кореляцій.

**Investigation of the temperature dependence of the effective two-particle potential of the interaction for the ion model of a metal**

Vavruk M., Paslavs'kii V., Tyshko N.

**Abstract.** Investigation of the temperature dependence of the effective two-particle potential of the interaction in the frame of the electron-ion model of a metal has been done. Considering the two- and three-particle correlations, we have calculated the effective two-particle potential of the interaction for the metallic phase of *H*, a set of the simple metals: *Li, Na, K, Rb, Mg*. All calculations have been done in the local-field approximation.

Подається в Журнал фізичних досліджень  
Submitted to Journal of Physical Studies

## Вступ

Одним із важливих застосувань  $n$ -частинкових кореляційних функцій моделі електронної рідини є розрахунок потенціалів багато-частинкових ефективних взаємодій в іонній моделі металу в рамках багатоелектронної теорії. Ще в роботі [1] показано, що відомі "багатохвостки" Бровмана-Каґана [2,32] є статичною границею  $n$ -частинкових кореляційних функцій моделі електронної рідини. Дослідженню потенціалів міжіонних взаємодій в іонній моделі металу присвячено багато робіт [5–27]. Це складна задача, вирішення якої вимагає як коректного опису електронів внутрішніх оболонок іонів, так і врахування міжелектронних кореляцій підсистеми колективізованих електронів. Зусилля більшості авторів були традиційно направлені на дослідження потенціалів міжіонних взаємодій при абсолютному нулі температури. Температурній залежності ефективних міжіонних взаємодій присвячено невелике число робіт (див. [28]), та й то лише для деяких металічних систем, причому ця залежність враховувалась лише через температурну залежність  $k_F$ . В той же час ця задача актуальна не тільки з точки зору фізики рідких металів, але також металічної фази водню та багатьох легких металів. В даній роботі досліджено температурну залежність ефективних міжіонних взаємодій в простих металах в рамках базисного підходу при врахуванні температурної залежності  $n$ -частинкових кореляційних функцій (а також поправки на локальне поле) моделі електронної рідини, яка відіграє роль базисної системи у цій задачі.

### 1. Температурна залежність потенціалів ефективних міжіонних взаємодій

В рамках базисного підходу перехід від точної електрон-ядерної моделі металу до наближеної електрон-іонної приводить до появи багаточастинкових нелокальних взаємодій [7,9,11–14,16,19–21,23–27]. Нелокальні двочастинкові взаємодії електронів з іонами металу фігурують також і в підході модельних потенціалів. Маючи на увазі дослідження температурної залежності потенціалів міжчастинкових взаємодій іонної моделі, ми використаємо традиційні локальні потенціали електрон-іонних двочастинкових взаємодій. Це значно спрощує розрахункову частину роботи і робить результати більш достовірними. Як первісне зображення для гамільтоніана електрон-іонної моделі використаємо представлення вторинного квантування

на базисі плоских хвиль:

$$\hat{H}_{ei} = \hat{H}_i(R) + \hat{H}_e + \hat{V}_{ei}, \quad (1)$$

де  $\hat{H}_e$  – гамільтоніан моделі електронної рідини,  $\hat{H}_i(R)$  – гамільтоніан іонної підсистеми в координатному зображенні,

$$\hat{V}_{ei} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}; s} V'_{ei}(\mathbf{q}) S_{-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s}^+ a_{\mathbf{k}, s} - \quad (2)$$

оператор електрон-іонної взаємодії, в якому  $S_{-\mathbf{q}} = \sum_{j=1}^N \exp\{i(\mathbf{q}\mathbf{R}_j)\}$  – структурний фактор іонної підсистеми,  $N_i$  – число іонів. Згідно з умовою електронейтральності у  $V'_{ei}(\mathbf{q})$  відсутня кулонівська складова при  $\mathbf{q} = 0$ , тобто

$$V'_{ei}(\mathbf{q}) = \begin{cases} V_{ei}(\mathbf{q}) + \frac{4\pi Ze^2}{q^2} & \text{при } \mathbf{q} = 0; \\ V_{ei}(\mathbf{q}) & \text{при } \mathbf{q} \neq 0, \end{cases} \quad (3)$$

де  $V_{ei}(\mathbf{q})$  – Фур'є-зображення локального модельного потенціалу.

Розрахуємо статистичну суму моделі (1.1) за електронними змінними у великому канонічному ансамблі в адіабатичному наближенні

$$Z_{ei}(\mu) = \text{Sp}_e \left\{ \exp[-\beta(\hat{H}_{ei} - \mu \hat{N}_e)] \right\}. \quad (4)$$

Використовуючи зображення взаємодії і частотне зображення, одержуємо такий вираз для статистичної суми [31]  $Z[\mu]$ :

$$\begin{aligned} Z_{ei}[\mu] &= Z_0(\mu) \langle \tilde{T} \{ \hat{S}_{ee} \hat{S}_{ei} \} \rangle_{\hat{H}_0}, \\ \hat{S}_{ee} &= \exp \left\{ \frac{-1}{2\beta V} \sum_{\mathbf{q}, \nu} V_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}, \nu} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}, -\nu} \right\}, \\ \hat{S}_{ei} &= \exp \left\{ \frac{-1}{V} \sum_{\mathbf{q}} V'_{ei}(\mathbf{q}) S_{-\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}, 0} \right\}. \end{aligned} \quad (5)$$

Тут  $\hat{\rho}_{\mathbf{q}, 0} \equiv \hat{\rho}_{\mathbf{q}, \nu}|_{\nu=0}$  – статична границя спектрального зображення оператора електронної густини.

Як звичайно в багатоелектронній теорії, використаємо модель електронної рідини як базисну систему при розрахунку  $Z_{ei}[\mu]$ . Оператор  $\hat{S}_{ei}$  будемо враховувати методом моментів. Ця схема розрахунку приводить до такого розкладу термодинамічного потенціалу

моделі (1.5) за степенями потенціалу електрон-іонної взаємодії [16]:

$$\Omega_{ei}(\mu) = \frac{-1}{\beta} \ln Z_{ei}(\mu) = \Omega_e(\mu) + \hat{H}_i(R) + \Delta\Omega(\mu); \quad (6)$$

$$\Delta\Omega(\mu) = \frac{N_i V'_{ei}(0)}{V} \sum_{\mathbf{k};s} n_{\mathbf{k};s}(\mu) + \sum_{n \geq 2} \frac{1}{n! V^n} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} V_{ei}(\mathbf{q}_1) \dots V_{ei}(\mathbf{q}_n) \times \\ \times S_{-\mathbf{q}_1} \dots S_{-\mathbf{q}_n} \tilde{\mu}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n; 0, \dots, 0) \delta_{\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n, 0}.$$

Тут  $\Omega_e(\mu)$  - термодинамічний потенціал базисної системи (моделі електронної рідини),  $n_{\mathbf{k};s}(\mu) = \langle a_{\mathbf{k},s}^+ a_{\mathbf{k},s} \rangle_e$  - середнє значення оператора числа електронів у стані  $(\mathbf{k}, s)$  для цієї моделі (у великому канонічному ансамблі),  $\tilde{\mu}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n; 0, \dots, 0)$  - статична границя  $n$ -частинкових динамічних кумулянтних кореляційних функцій моделі електронної рідини

$$\tilde{\mu}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n; 0, \dots, 0) = \frac{1}{\beta} \langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}_1, 0} \hat{\rho}_{\mathbf{q}_2, 0} \dots \hat{\rho}_{\mathbf{q}_n, 0} \rangle_{\hat{H}_e}^{\text{зв}} = \\ = \frac{1}{\beta Z(\mu)} \langle \tilde{T} \hat{S}_{ee} \{ \hat{\rho}_{\mathbf{q}_1, 0} \hat{\rho}_{\mathbf{q}_2, 0} \dots \hat{\rho}_{\mathbf{q}_n, 0} \} \rangle_{\hat{H}_0}^{\text{зв}}, \quad (7)$$

де  $Z[\mu]$  - статистична сума моделі електронної рідини, а символ "зв" відноситься до добутку операторів  $\hat{\rho}_{\mathbf{q}_i, 0}$ . Двочастинкова функція  $\tilde{\mu}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; 0, 0)$  визначається статичною границею поправки на локальне поле (див. [31]). Наближення для поляризаційних операторів вищого порядку

$$\mathcal{M}_n(x_1, \dots, x_n) = \tilde{\mu}_n(x_1, \dots, x_n) \prod_{j=1}^n \frac{1}{1 - \frac{V_{\mathbf{q}_j}}{V} \mathcal{M}_2(x_j)} \quad (8)$$

приводить (див. [30]), до такого зображення  $n$ -частинкових кореляційних функцій ( $n \geq 3$ ):

$$\tilde{\mu}_n(x_1, \dots, x_n) \approx \tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n) \prod_{j=1}^n \frac{\tilde{\mu}_2(x_j, -x_j)}{\tilde{\mu}_2^0(x_j, -x_j)} \quad (9)$$

Таким чином, (1.6) є одночасно розкладом за степенями модельного потенціалу і  $n$ -частинковими кореляційними функціями моделі електронної рідини.

Завершення схеми розрахунку вимагає переходу до змінних канонічного ансамблю і вільної енергії електронної підсистеми в полі іонів. З умови  $-\frac{d}{d\mu} \Omega(\mu) = N$  знаходимо хімічний потенціал електронної підсистеми. Зобразимо корінь цього рівняння у вигляді  $\mu_0 = \mu_e + \delta\mu$ ,

де  $\mu_e$  - хімічний потенціал базисної системи. Розкладаючи функції  $\Omega(\mu)$  та  $\Delta\Omega(\mu)$  за степенями  $\delta\mu$ , знаходимо алгебраїчне рівняння для невідомої функції  $\delta\mu$ . Вільна енергія  $F_{ei} = \Omega(\mu_0) + \mu_0 N$  з точністю до квадрата відхилення  $\delta\mu$  має таке зображення:

$$F_{ei} = H_i(R) + F_e + \Delta\Omega(\mu_e) - \frac{1}{2} \left\{ \frac{d^2 \Omega_e(\mu_e)}{d\mu_e^2} \right\}^{-1} \left\{ \frac{d\Delta\Omega_e(\mu_e)}{d\mu_e} \right\}^2 + \dots, \quad (10)$$

де  $F_e = \Omega_e(\mu_e) + \mu_e N$  є вільна енергія базисної системи.

Складова  $F_e$  не залежить від координат іонів, на відміну від двох інших складових (1.10). Виділяючи у добутку структурних факторів  $S_{\mathbf{q}_1} S_{\mathbf{q}_2} \dots S_{\mathbf{q}_n}$  одно-, дво-, тричастинковий і т.д. члени, представимо  $F_{ei}$  у вигляді суми безструктурної складової та багаточастинкових ефективних взаємодій іонів, які не зводяться до взаємодій нижчого порядку [29]:

$$F_{ei} = F_0 + \hat{H}_i(R) + \sum_{n \geq 2} \frac{1}{n!} \sum_{i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_n \neq 1}^{N_i} \Phi_n(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_n). \quad (11)$$

Тут  $F_0$  є сумою вільної енергії моделі однорідної електронної рідини і енергії окремих точкових іонів у середовищі електронної рідини:

$$F_0 = F_e + N_i f_1, \\ f_1 = \frac{N}{V} V_{ei}(0) - \frac{1}{2V^2} \sum_{\mathbf{q}} (V_{ei}(\mathbf{q}))^2 \tilde{\mu}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; 0, 0) + \\ + \frac{1}{3!V^3} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} V_{ei}(\mathbf{q}_1) V_{ei}(\mathbf{q}_2) V_{ei}(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \tilde{\mu}_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2; 0, 0, 0). \quad (12)$$

Функції  $\Phi_n(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_n)$  є непрямыми складовими потенціалів ефективних міжіонних взаємодій:

$$\Phi_2(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \equiv \Phi_2(|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \Phi_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \exp\{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)\}; \\ \Phi_3(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3) = \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \Phi_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \times \\ \times \exp\{i[(\mathbf{q}_1 \mathbf{R}_1) + (\mathbf{q}_2 \mathbf{R}_2) - (\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, \mathbf{R}_3)]\}; \\ \dots \dots \dots \quad (13) \\ \Phi_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) = - \frac{[V_{ei}(\mathbf{q})]^2}{V} \tilde{\mu}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; 0, 0) +$$

$$+ \frac{V_{ei}(\mathbf{q})}{V^2} \sum_{\mathbf{q}_1} V_{ei}(\mathbf{q}_1) V_{ei}(\mathbf{q}+\mathbf{q}_1) \tilde{\mu}_3(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, -\mathbf{q}-\mathbf{q}_1; 0, 0, 0) + \dots;$$

$$\Phi_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) = \frac{V_{ei}(\mathbf{q}_1) V_{ei}(\mathbf{q}_2) V_{ei}(\mathbf{q}_3)}{V} \tilde{\mu}_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3; 0, 0, 0) + \dots;$$

Різниця  $F_{ei} - F_0$  відіграє роль ефективного гамільтоніяна для іонної підсистеми, або гамільтоніяна іонної моделі металу з багаточастинковими взаємодіями:

$$\hat{H}_i(R) = -\frac{\hbar}{2M} \sum_{j=1}^{N_i} \nabla_j^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \{ \Phi_2(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j) + \Xi_2(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j) \} + \quad (14)$$

$$\sum_{n \geq 3} \frac{1}{n!} \sum_{i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_n \neq 1} \Phi_n(\mathbf{R}_{i_1}, \dots, \mathbf{R}_{i_n})$$

При цьому  $\Xi_2(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)$  представляє первісний потенціал ефективною двоіонною взаємодією, який фігурує у складовій  $\hat{H}_i(\mathbf{R})$  гамільтоніяна електрон-іонної моделі (1.1).  $\Xi_2(\mathbf{R})$  має асимптотику кулонівського потенціалу відштовхування двох точкових іонів із зарядом  $Ze$ . В подальших розрахунках для нього використаємо наближення потенціалу Кулона.

Нами досліджено найбільш важливі двоіонні потенціали  $\tilde{\Phi}_2(\mathbf{R}) \equiv \Xi_2(\mathbf{R}) + \Phi_2(\mathbf{R})$  для металічного водню, лужних металів ( $Li$ ,  $Na$ ,  $K$ ,  $Rb$ ), а також  $Mg$  при скінченних температурах. Для простих металів первісний потенціал  $V_{ei}(\mathbf{q})$  вибрано у формі потенціала Ашкрофта  $V_{ei}(\mathbf{q}) = \frac{-4Z\pi e^2}{q^2} \cos(qR_0)$  головним чином з тієї причини, що значення єдиного параметра цього потенціалу  $R_0$  добре відомі [15,17,18,21].

Розрахунок потенціалів  $\tilde{\Phi}_2(\mathbf{R})$  виконано у наближенні дво- та тричастинкових кореляцій базисної системи ( $\tilde{\Phi}_2(\mathbf{R}) = \Phi_2^{(2)}(\mathbf{R}) + \Phi_2^{(3)}(\mathbf{R})$ ). При цьому для статичної кореляційної функції ідеальної системи  $\tilde{\mu}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; 0, 0)$  використано зображення (2.15) у формі однократного інтегралу, а для  $\tilde{\mu}_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2; 0, 0, 0)$  - зображення (2.28) у формі двократного інтегралу.

На мал. 1 зображений потенціал  $\Phi_2^{(2)}(\mathbf{R})$  для металічної фази водню при значенні параметра неідеальності  $r_s = 1.7$  при різних температурах (крива 1 -  $T^* = 0.0$ , крива 2 -  $T^* = 0.1$ , крива 3 -  $T^* = 0.2$ ), розрахований при використанні парної кореляційної функції в наближенні локального поля. Для порівняння на мал. 1 зображено криві функції  $\Phi_2^{(2)}(\mathbf{R})$  при тих самих значеннях параметрів в наближенні хаотичних фаз. Як бачимо з малюнка, зростання температури приводить до значної зміни форми потенціалів, зокрема зменшення

глибини його мінімумів. Температурні зміни в наближенні хаотичних фаз набагато менші ніж в наближенні локального поля. Це свідчить про те, що температурна залежність потенціалів формується як функцією  $\tilde{\mu}_2^0(q, -q; 0, 0)$ , так і поправкою на локальне поле.

На мал. 2 наведено криві складової  $\Phi_2^{(3)}(\mathbf{R})$ , зумовленої тричастинковими електронними кореляціями, для металічної фази водню. На малих відстанях ( $|\mathbf{R}| \leq 4a_0$ ) потенціал  $\Phi_2^{(3)}(\mathbf{R})$  зменшується із зростанням температури. В області  $|\mathbf{R}| > 4a_0$  зростання температури приводить до зменшення амплітуди осциляцій кривої. Загалом спостерігається сильна температурна залежність, значно сильніша, ніж у  $\Phi_2^{(2)}(\mathbf{R})$ , що пояснюється сильнішою температурною залежністю  $\tilde{\mu}_3^0(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2; 0, 0, 0)$  у порівнянні з  $\tilde{\mu}_2^0(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; 0, 0)$ .

На мал. 3 зображено сім'ю кривих функції  $\Phi_2(\mathbf{R})$  для моделі металічного водню при різних значеннях температури. Спостерігаємо відносно слабу температурну залежність в області головного мінімуму (порядку 16% при  $T^* = 0.2$ ), проте значну залежність в області першого максимуму (порядку 50% при тій самій температурі), як і наступних екстремумів, що проявляється у зміні форми кривої.

На мал. 4 наведено криві функції  $\Phi_2^{(2)}(\mathbf{R})$  для випадку лужних металів, розраховані в наближенні локального поля. З малюнка спостерігаємо слабу температурну залежність потенціалів, що проявляється, в основному, в зменшенні глибини головного мінімуму: відносна зміна глибини мінімуму для випадку  $Na$  складає 6% при  $T^* = 0.2$  і 15% при  $T^* = 0.3$ . Як видно з малюнка, існує монотонне поглиблення головного мінімуму в послідовності  $Li - Na - K$ , що спричинене зростанням параметра неідеальності  $r_s$ .

На мал. 5 наведено криві складової  $\Phi_2^{(2)}(\mathbf{R})$  для випадку  $Mg$  в наближенні локального поля при температурах  $T^* = 0$ ;  $T^* = 0.1$ ;  $T^* = 0.2$ , а також для порівняння  $T^* = 0$  в наближенні хаотичних фаз. Температурна залежність нагадує аналогічну залежність в лужних металах, але проявляється значно сильніше: відносна зміна глибини основного мінімуму має порядок 25% при  $T^* = 0.2$ .

На мал. 6 наведено криві складової  $\Phi_2^{(3)}(\mathbf{R})$  для випадку  $Na$ , а на мал. 7 -  $Mg$  в області низьких температур. Як бачимо з малюнків, ці функції зі зростанням температури збільшуються за модулем у тій області, де вони набувають від'ємних значень. Як і для випадку металічної фази водню, цей факт пояснюється особливостями температурної залежності  $\tilde{\mu}_3^0(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2; 0, 0, 0)$ .

На мал. 8 зображено складову  $\Phi_2^{(2)}(\mathbf{R})$  та повний двочастинковий потенціал  $\Phi_2(\mathbf{R})$  для випадку  $Na$ . Звертає на себе увагу різна тем-

пературна залежність цих функцій на малих і середніх відстанях. В області головного мінімуму  $\Phi_2^{(2)}(\mathbf{R})$  зростає із збільшенням температури, а  $\Phi_2(\mathbf{R})$  – зменшується. Відбувається часткова компенсація температурних залежностей функцій  $\Phi_2^{(2)}(\mathbf{R})$  та  $\Phi_2^{(3)}(\mathbf{R})$ .

На мал. 9 зображено аналогічні функції для випадку *Mg*. Спостерігається майже повна відсутність температурної залежності на кривій  $\tilde{\Phi}_2(\mathbf{R})$ , що зумовлено компенсацією температурних внесків функцій  $\Phi_2^{(2)}(\mathbf{R})$  та  $\Phi_2^{(3)}(\mathbf{R})$ .

З результатів приведених розрахунків випливає, що температурна залежність потенціалів двочастинкових ефективних взаємодій в іонній моделі металу визначається як характером первісного потенціалу електрон-іонної взаємодії, так і значенням параметра неідеальності підсистеми електронів провідності. Очевидно, що температурна залежність даних потенціалів не має універсального характеру.

## 2. Висновки

Шляхом статистичної редукції електрон-іонної моделі металу одержано ефективні потенціали взаємодії іонної моделі металу із врахуванням внесків дво- та тричастинкових електронних кореляцій. Досліджено температурну залежність ефективних потенціалів в області низьких температур в рамках наближення локального поля для металічної фази водню, лужних металів, магнію. Показано, що температурна залежність досліджуваних потенціалів є суттєвою. Внесок двочастинкових кореляцій у двочастинковий потенціал взаємодії послаблюється із зростанням температури. Навпаки, внесок тричастинкових кореляцій приводить до посилення потенціалу при збільшенні температури. Однак температурна залежність результуючого потенціалу не є універсальною функцією, спостерігається часткова компенсація внесків дво- та тричастинкових кореляцій.

## Література

1. Ваврух М.В. *n*-частичные корреляционные функции взаимодействующего электронного газа // ТМФ. - 1982. - 50, 3. - С. 438 - 449.
2. Е.Г.Бровман, Ю.М.Каган. Об особенностях многоквостных кольцевых диаграмм для ферми-систем //ЖЭТФ. - 1972. - 63, вып. 5. - С. 1937 - 1949.

3. Исихара В. Статистическая физика. М: Мир, 1973. - 471 С.
4. Кобилянський В.Б. Статистична фізика. Київ: Вища школа, 1972. - 244 с.
5. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Атомные свойства металлов // Барьяхтар В.Г., Зароченцев Е.В., Троицкая Е.П.; Отв. ред. В.В. Немошкаленко; АН УССР. Ин-т металлофизики. - Киев: Наукова думка, 1990. - 376 с.
6. Бровман Е.Г., Каган Ю.М. Фононы в непереходных металлах // УФН. - 1974. -112, 3. - С. 369 - 426.
7. Коваленко Н.П., Красный Ю.П., Тригер С.А. Статистическая теория жидких металлов. - М.: Наука, 1990. - 208 с.
8. Коваленко Н.П., Кузьмина Л.М., Майер Г. К вопросу о меж-ионном взаимодействии в металлическом водороде // Письма в ЖЭТФ. - 1978. - 28, 4. - С. 239 - 242.
9. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. Пер. с англ. - М.: Мир, 1968. - 368 с.
10. Hasegawa M/ Third-order perturbation theory and structures of liquid metals: sodium and potassium // J. Phys. F: Metal Phys. - 1976. - 6, 5. - P. 649 - 675.
11. Василю Е.В. Роль многочастичных эффектов в формировании структуры и свойств неоднородных металлических систем: Дис. канд. физ. - мат. наук: 01.04.02 Одесса, 1999. - 152 с.
12. Каим С.Д. Микроскопічна теорія неоднорідних металічних систем: Дис. докт. фіз. - мат. наук: 01.04.14 Одеса, 1999. - 358 с.
13. Васіліу Є.В., Каїм С.Д., Коваленко М.П. Розрахунок потенціалу трьохіонних взаємодій у металічному водні // УФЖ. - 1995. - 40, 1,2. - С. 67 - 71.
14. Kaim S.D., Kovalenko N.P., Vasiliu E.V. Manyparticle interactions and local structure of the metallic hydrogen at zero pressure // ЖФД. - 1998. - 1, 4. - С. 589 - 595.
15. Stevenson D.J., Ashcroft N.W. Conduction in fully ionized liquid metals // Phys. Rev. A. - 1974. - 9, 2. - P. 782 - 789.
16. Ваврух М.В., Мулява Я.М. Базисний підхід в мікроскопічній теорії рідких металів. Ієрархія моделей. - Львів, 1993. - 24 с. - (Препринт Препринт / НАН України. ІФКС; ІФКС-93-2У).
17. Ashcroft N.W. and Lerner J. Structure and resistivity of liquid metals // Phys. Rev. - 1966. - 145. - P. 83 - 90.
18. Stroud D. and Ashcroft N.W. Theory of the melting of simple metals // Phys. Rev. B. - 1972. - 5. - P. 371 - 382.
19. Ваврух М.В., Крохмальський Т.Е. Эффективные потенциалы взаимодействия подсистемы коллективизированных электро-

- нов простых металлов. - Киев, 1983. - 27 с. - (Препринт / АН УССР. ИТФ; ИТФ-83-176Р).
20. Ваврух М.В., Крохмальський Т.Е. Многочастичные нелокальные взаимодействия электронов с ионами в металлах // ФММ. - 1985. - 59, 5. - С. 864 - 873.
  21. Ashcroft N.W. Electron-ion pseudopotentials in metals // Phys. Rev. Lett. - 1966. - 23, 1. - Р. 48 - 50.
  22. Гурский З.А., Краско Г.Л. Модельный псевдопотенциал и некоторые свойства щелочных и щелочноземельных металлов // ДАН СССР. - 1971. - 197, 4. - С. 810 - 813.
  23. Бровман Е.Г., Каган Ю.М. Анализ статических и динамических свойств металла на примере магния (роль многоионных взаимодействий) // ЖЭТФ. - 1971. - 61, 2(8). - С. 737 - 752.
  24. Вакс В.Г., Кравчук С.П., Трефилов А.В. Зависимость точности описания атомных свойств щелочных металлов от вида используемого псевдопотенциала // ФММ. - 1977. - 44, 6. - С. 1151 - 1162.
  25. Gurskii Z., Krawczyk J. On problem to determine the  $n$ -particle interatomic potentials from *ab initio* band-structure calculations // Металлофизика и новейшие технологии. - 1996. - 18, 12. - С. 3 - 12.
  26. Ravech H.J., Mountain R.D. Triplet correlations // Progress in liquid Physics / Ed. by Croxton C.A. - Chichester ets.: John Wiley and Sons, 1978. - Р. 469 - 501.
  27. Ваврух М., Мулява Я. Врахування локалізованих станів у мікроскопічній теорії металів // ЖФД. - 1997. - 1, 2. - С. 257-266.
  28. Харьков Е.Н., Лысов В.Н., Федоров В.Е. Физика жидких металлов. - Киев: Вища школа, 1979. - 248 с.
  29. Ваврух М.В., Мулява Я.М. Базисний підхід в мікроскопічній теорії рідких металів. Статистична сума і структурний фактор. - Львів, 1993. - 20 с. - (Препринт Препринт / НАН України. ІФКС; ІФКС-93-24У).
  30. Ваврух М.В. Теория многочастичных электронных корреляций в металлах: Дис. докт. физ. - мат. наук: 01.04.02 Киев, 1987. - 415 с.
  31. Ваврух М.В., Крохмальський Т.Е. Эффективные многочастичные потенциалы взаимодействия ионов в металлах // ТМФ. - 1982. - 51, 1. - С. 130 - 141.
  32. Е.Г.Бровман, А.Холас. Общий метод интегрирования многохвостных кольцевых диаграмм для ферми-систем // ЖЭТФ. - 1974. - 66. - С. 1877 - 1894.

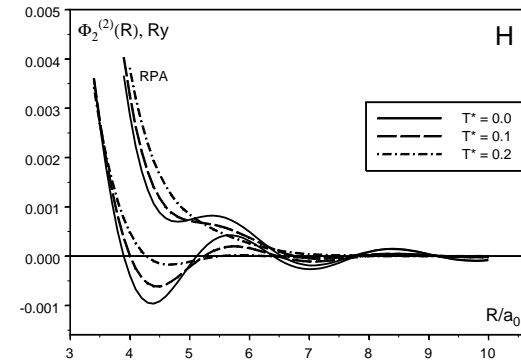


Рис. 1. Залежність потенціалу  $\Phi_2^{(2)}(\mathbf{R})$  для випадку металічної фази водню при відмінних від нуля температурах розрахована в наближенні хаотичних фаз та наближенні локального поля

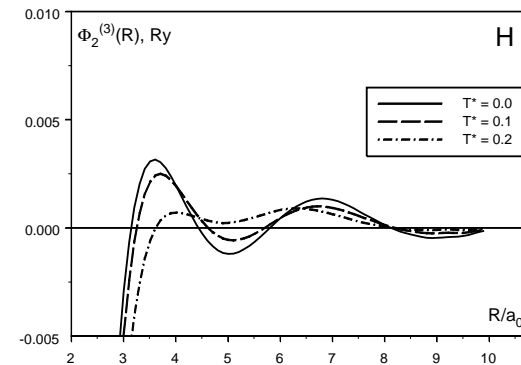


Рис. 2. Температурна залежність функції  $\Phi_2^{(3)}(\mathbf{R})$  для металічної фази водню.

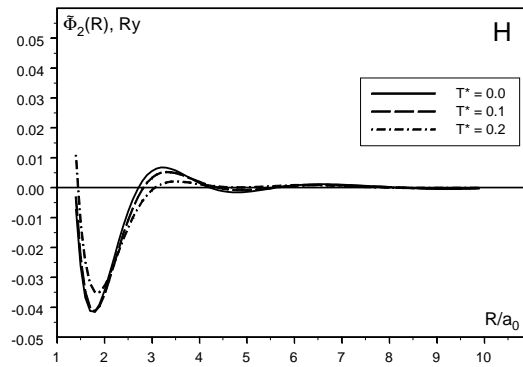


Рис. 3. Сім'я кривих функції  $\tilde{\Phi}_2(\mathbf{R})$  для моделі металічного водню при різних значеннях температури

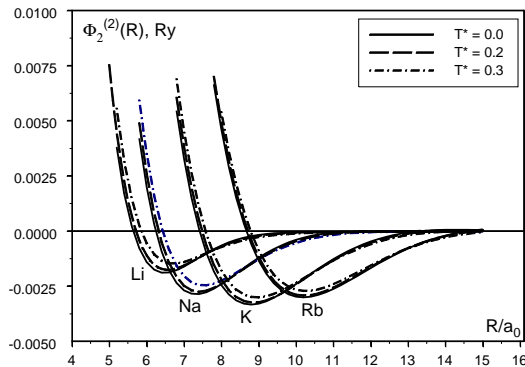


Рис. 4. Результати розрахунку функції  $\Phi_2^{(2)}(\mathbf{R})$  для випадку лужних металів в наближенні локального поля.

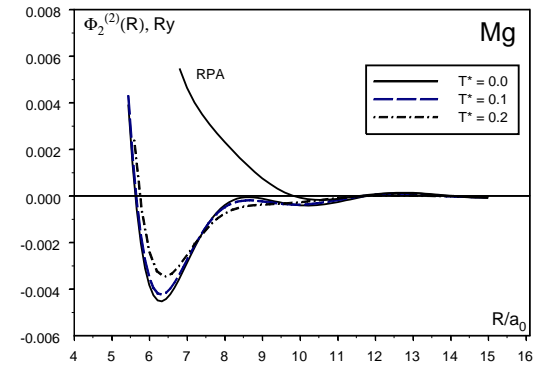


Рис. 5. Результати розрахунку функції  $\Phi_2^{(2)}(\mathbf{R})$  для випадку  $Mg$  в наближенні локального поля та в наближенні хаотичних фаз при температурах:  $T^* = 0, 0.1, 0.2$

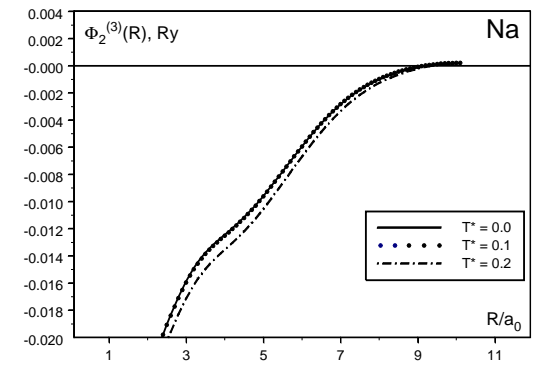


Рис. 6. Функція  $\Phi_2^{(3)}(\mathbf{R})$  для випадку  $Na$  в області низьких температур.

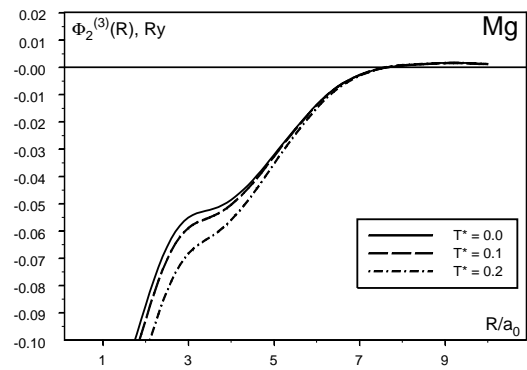


Рис. 7.  $\Phi_2^{(3)}(\mathbf{R})$  для випадку  $Mg$  в області низьких температур.

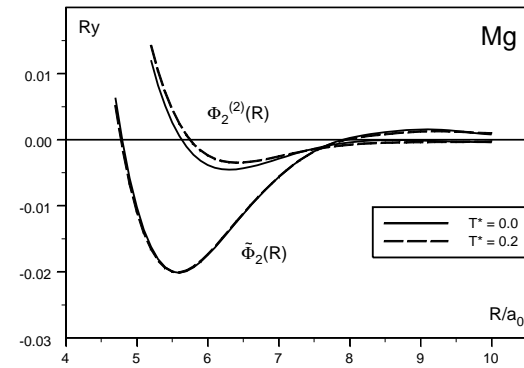


Рис. 9. Складова  $\Phi_2^{(2)}(\mathbf{R})$  та повний двочастинковий потенціал  $\tilde{\Phi}_2(\mathbf{R})$  для випадку  $Mg$ .

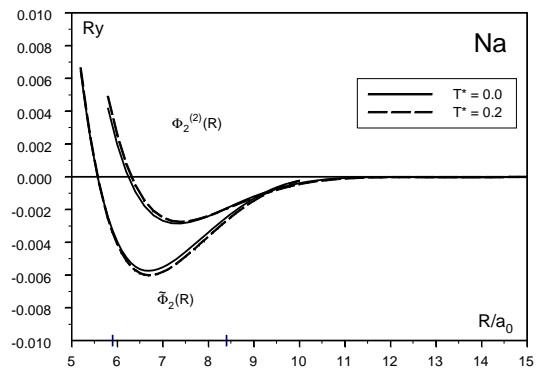


Рис. 8. Складова  $\Phi_2^{(2)}(\mathbf{R})$  та повний двочастинковий потенціал  $\tilde{\Phi}_2(\mathbf{R})$  для випадку  $Na$ .



Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Маркіян Васильович Ваврух  
Володимир Несторович Паславський  
Нестор Любомирович Тишко

РОЗРАХУНОК ТЕМПЕРАТУРНОЇ ЗАЛЕЖНОСТІ ЕФЕКТИВНОГО  
ДВОЧАСТИНКОВОГО ПОТЕНЦІАЛУ ВЗАЄМОДІЇ В ІОННІЙ МОДЕЛІ  
МЕТАЛУ

Роботу отримано 16 жовтня 2000 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії модельних  
спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені