

УДК 538.9

**ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ И ТЕРМОДИНАМИКИ  
ЖИДКИХ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ С МОДЕЛЬЮ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ЯМЫ  
В КАЧЕСТВЕ СИСТЕМЫ СРАВНЕНИЯ****Н.Э. Дубинин<sup>1,2</sup>, А.А. Юрьев<sup>1,2</sup>, Н.А. Ватолин<sup>1</sup>**<sup>1</sup>Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, e-mail: yurev\_anatolii@mail.ru<sup>2</sup>Уральский федеральный университет, Екатеринбург

Статья поступила 19 мая 2011 г.

С доработки — 29 июля 2011 г.

Исследуется применимость вариационного метода с новой системой сравнения, моделью прямоугольной ямы, для описания структуры и термодинамики жидких металлов. Приведен вывод выражения энтропии данной системы для однокомпонентной жидкости. Три параметра модели: диаметр твердой сферы, ширина и глубина прямоугольной ямы определяются вариационным методом с использованием приближения локального псевдопотенциала. Подход применяется для жидких Na и K, и результаты расчета сравниваются с экспериментом. Показана реалистичность используемого подхода для описания свойств жидких металлов.

**Ключевые слова:** жидкий металл, система сравнения, псевдопотенциал, парное межатомное взаимодействие, вариационный метод, структурный фактор, термодинамические свойства.

**ВВЕДЕНИЕ**

Количественное описание свойств структурно-неупорядоченных, в том числе жидких, металлов является одной из важных проблем теории конденсированного состояния. Для ее успешного решения необходимо, во-первых, корректно учитывать электронную структуру жидкого металла и, во-вторых, проводить усреднение по всем возможным атомным конфигурациям. Чтобы провести такое усреднение нужно уметь достаточно точно рассчитывать корреляционные функции, описывающие структуру жидкости. Мы выбрали в качестве объекта исследования щелочные металлы (Na и K), так как для них метод псевдопотенциала во втором порядке теории возмущений в локальном приближении обеспечивает очень точное описание всех взаимодействий: электрон-электронного, электрон-ионного и эффективного межионного. В результате для щелочных металлов можно провести численные расчеты практически исчерпывающего числа свойств. Поэтому именно щелочные металлы удобны для изучения точности различных моделей жидкости.

Для расчета термодинамических и структурных свойств жидких металлов широко используется вариационный метод [1], основанный на неравенстве Гиббса—Боголюбова. При этом в качестве системы сравнения преимущественно используется модель твердых сфер (HS) [2—7]. Однако имеются попытки использования других базисных систем, таких как модели однокомпонентной плазмы (ОСП) [8], заряженных твердых сфер (CHS) [9—11] и твердых сфер Юкавы (HSY) [12, 13].

В данной работе в рамках вариационного метода используется предложенная нами в работе [14] новая система сравнения — модель прямоугольной ямы (SW).

Потенциал SW реалистичней потенциала HS, поскольку имеет в отличие от последнего притягивательную часть, делающую отличной от нуля потенциальную энергию такой модельной системы. В то же время математически данная система достаточно проста и удобна для использования в рамках различных приближений теории жидкости. Поэтому для SW модели имеется ряд аналитических и полуаналитических выражений, полученных как в различных вариантах термодинамической теории возмущений [15—18], так и путем использования новых математических методов решения уравнения Орнштейна—Цернике (OZ) в среднесферическом приближении (MSA [19]) [20—22] и в приближении Перкуса—Йефика (PY [23]) [24, 25]. Кроме того, отметим здесь разработанный в [26—28] полуаналитический SW—MSA подход, не использующий OZ уравнение в прямом пространстве, и работу [29], в которой подход Вертхейма [30] применен к SW потенциалу, в результате чего получено аналитическое PY решение для SW модели.

Наиболее простое и удобное для дальнейшего использования аналитическое выражение структурного фактора SW жидкости [15] существует в приближении случайных фаз (RPA) [31, 32], чем и обусловлен выбор нами данного приближения для описания SW системы сравнения. Необходимое SW—RPA выражение для энтропии было получено в [14].

В отличие от модели твердых сфер, в которой имеется один свободный параметр (диаметр HS), в SW модели имеются три вариационных параметра: диаметр твердого остова межатоминого потенциала, глубина и ширина прямоугольной ямы. Исследовано поведение свободной энергии для разных значений параметров модели и найдены те области параметров, в которых имеются решения. Выбраны те значения ширины, при которых получаются наиболее разумные результаты. Мы нашли, что эти решения находятся на самой границе области допустимых значений ширины ямы. Два других параметра определяли путем минимизации энергии, и при этом оказалось, что прямоугольная яма получается достаточно широкой, а ее глубина очень незначительной. Такая ситуация наблюдается для обоих исследованных жидких металлов. Полученные для структуры и термодинамических свойств результаты находятся в хорошем согласии с экспериментом, что позволяет говорить о перспективности использования предложенного подхода. Кроме того, модель допускает дальнейшее развитие и распространение на многокомпонентные системы.

#### ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

В общем случае парный потенциал с твердым остовом (НС),  $\varphi_{\text{НС}}(r)$ , может быть записан в виде

$$\varphi_{\text{НС}}(r) = \begin{cases} \infty, & r < \sigma \\ \phi(r), & r \geq \sigma \end{cases}, \quad (1)$$

где  $\sigma$  — диаметр НС.

Приближение случайных фаз в теории простых жидкостей [15] предполагает совмещение среднесферического приближения (MSA) (предложенного в [19] для систем с потенциалом, заданным выражением (1)) с представлением прямой корреляционной функции  $c(r)$  внутри НС в виде  $c_{\text{НС}}(r)$ :

$$c_{\text{RPA}}(r) = \begin{cases} c_{\text{НС}}(r), & r < \sigma \\ -\beta\phi(r), & r \geq \sigma \end{cases}, \quad (2)$$

где  $c_{\text{НС}}(r)$  — прямая корреляционная функция жидкости твердых сфер (здесь мы используем аналитическую форму  $c_{\text{НС}}(r)$ , полученную в [30, 33] в приближении PY).

Тогда структурный фактор  $a(q)$  запишется как

$$a_{\text{RPA}}(q) = \frac{1}{1 - \rho c_{\text{НС}}(q) + \beta \rho \phi(q)}, \quad (3)$$

где  $c_{\text{НС}}(q)$  и  $\phi(q)$  — Фурье-образы  $c_{\text{НС}}(r)$  и  $\phi(r)$  соответственно;  $\rho$  — средняя атомная плотность;  $\beta = (k_{\text{B}}T)^{-1}$ ;  $k_{\text{B}}$  — постоянная Больцмана;  $T$  — абсолютная температура.

В модели прямоугольной ямы парный потенциал имеет вид:

$$\varphi_{\text{SW}}(r) = \begin{cases} \infty, & r < \sigma \\ \varepsilon, & \sigma \leq r < \lambda\sigma, \\ 0, & r \geq \lambda\sigma \end{cases} \quad (4)$$

где  $\varepsilon$  и  $\sigma(\lambda - 1)$  — глубина и ширина ямы соответственно. Тогда

$$\phi_{\text{SW}}(r) = \begin{cases} 0, & r < \sigma \\ \varepsilon, & \sigma \leq r < \lambda\sigma. \\ 0, & r \geq \lambda\sigma \end{cases} \quad (5)$$

Фурье-образ  $\phi_{\text{SW}}(r)$  есть

$$\phi_{\text{SW}}(q) = 4\pi\varepsilon [\sin(\lambda x) - \sin(x) - \lambda x \cos(\lambda x) + x \cos(x)] / q^3, \quad (6)$$

где  $x = q\sigma$ .

Потенциальная энергия SW жидкости на атом  $U_{\text{SW}}$  определяется следующим образом:

$$U_{\text{SW}} = 2\pi\rho \int_0^{\infty} \varphi_{\text{SW}}(r) g_{\text{SW}}(r) r^2 dr = 2\pi\rho \int_{\sigma}^{\lambda\sigma} \phi_{\text{SW}}(r) g_{\text{SW}}(r) r^2 dr, \quad (7)$$

где  $g(r)$  — парная корреляционная функция.

Используя известное соотношение между  $g(r)$  и  $a(q)$ , уравнение (7) можно преобразовать к виду

$$U_{\text{SW}} = \frac{1}{2}\rho\phi_{\text{SW}}(q=0) + \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{\infty} [a_{\text{SW}}(q) - 1] \phi_{\text{SW}}(q) q^2 dq, \quad (8)$$

где

$$\phi_{\text{SW}}(q=0) = \frac{4}{3}\pi\sigma^3\varepsilon(\lambda^3 - 1). \quad (9)$$

Энтропия SW жидкости на атом  $S_{\text{SW}}$  состоит из трех вкладов:

$$S_{\text{SW}} = S_{\text{HS}} + \Delta S_{\text{SW}} = S_{\text{IG}} + \Delta S_{\text{HS}} + \Delta S_{\text{SW}}, \quad (10)$$

где  $S_{\text{HS}}$  — энтропия HS жидкости;  $S_{\text{IG}}$  — энтропия идеального газа, которая в атомных единицах (а.е.) равна

$$S_{\text{IG}} = k_{\text{B}} \left[ \frac{5}{2} + \ln \left( \frac{1}{\rho} \left[ \frac{k_{\text{B}} T m}{2\pi} \right]^{\frac{3}{2}} \right) \right]; \quad (11)$$

$\Delta S_{\text{HS}}$  и  $\Delta S_{\text{SW}}$  — вклады, обусловленные HS отталкиванием и SW притяжением;  $m$  — масса атома.  $\Delta S_{\text{HS}}$ , полученное из уравнения для сжимаемости, взято из [2]:

$$\Delta S_{\text{HS}} = k_{\text{B}} \left[ \ln(1 - \eta) + \frac{3}{2} \left( 1 - \frac{1}{(1 - \eta)^2} \right) \right], \quad (12)$$

где  $\eta = (\pi\rho\sigma^3/6)$  — плотность упаковки.

Для вывода вклада  $\Delta S_{\text{SW}}$  мы используем хорошо известное термодинамическое соотношение

$$\left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{\rho} = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_{\rho}, \quad (13)$$

где  $E$  — внутренняя энергия.

Для SW жидкости уравнение (13) приводит к

$$\left( \frac{\partial(\Delta S_{\text{SW}})}{\partial T} \right)_{\rho} = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial U_{\text{SW}}}{\partial T} \right)_{\rho}. \quad (14)$$

Используя выражение (3) для SW потенциала и выражение (8), получаем

$$\left(\frac{\partial U_{\text{SW}}}{\partial T}\right)_{\rho}^{\text{RPA}} = \frac{\rho k_{\text{B}}}{4\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{\phi_{\text{SW}}^2(q) q^2 dq}{[k_{\text{B}}T(1 - \rho c_{\text{HS}}(q)) + \rho \phi_{\text{SW}}(q)]^2}. \quad (15)$$

При выводе (15) дифференцирование и интегрирование поменяли местами и учли, что подынтегральное выражение зависит от температуры лишь через параметр  $\beta$ .

Интегрирование приводит к следующему выражению для  $\Delta S_{\text{SW}}$  в рамках RPA:

$$\begin{aligned} \Delta S_{\text{SW-RPA}} &= \int \frac{dT}{T} \left(\frac{\partial U_{\text{SW}}}{\partial T}\right)_{\rho}^{\text{RPA}} = \\ &= \frac{k_{\text{B}}\rho}{4\pi^2} \int_0^{\infty} \left[ -\frac{1}{\rho^2 \phi_{\text{SW}}^2(q)} \left( \ln \left| \frac{k_{\text{B}}}{a_{\text{SW-RPA}}(q)} \right| + (1 - \rho c_{\text{HS}}(q)) a_{\text{SW-RPA}}(q) \right) + C \right] \phi_{\text{SW}}^2(q) q^2 dq. \end{aligned} \quad (16)$$

Константу интегрирования  $C$  мы определили из условия  $\Delta S_{\text{SW-RPA}} = 0$  при  $\varepsilon = 0$  или  $\lambda = 1$ , чтобы получить правильный предельный переход к модели твердых сфер:

$$C = \frac{\ln |k_{\text{B}}(1 - \rho c_{\text{HS}}(q))| + 1}{\rho^2 \phi_{\text{SW}}^2(q)}. \quad (17)$$

Окончательно получаем

$$\Delta S_{\text{SW-RPA}} = \frac{k_{\text{B}}}{4\pi^2 \rho} \int_0^{\infty} q^2 (\ln |(1 - \rho c_{\text{HS}}(q)) a_{\text{SW-RPA}}(q)| - (1 - \rho c_{\text{HS}}(q)) a_{\text{SW-RPA}}(q) + 1) dq. \quad (18)$$

Вариационный метод с SW системой сравнения заключается в минимизации следующего выражения для свободной энергии (на один атом):

$$F_{\text{var}} = \frac{3}{2} k_{\text{B}} T + E_0 + E_1 + E_2 + E_3 - T(S_{\text{SW-RPA}} + S_e), \quad (19)$$

где  $E_0$  — энергия взаимодействующего электронного газа;  $E_1$  — вклад первого порядка по псевдопотенциалу;  $E_2$  — энергия зонной структуры, которая представляет собой вклад второго порядка по псевдопотенциалу;  $E_3$  — энергия Маделунга;  $S_e = zT \left( \frac{\pi k_{\text{B}}}{k_{\text{F}}} \right)^2$  — вклад в энтропию от

электронного газа, который является достаточно малым.

Энергия электронного газа (в а.е.) дается выражением:

$$E_0 = \frac{3}{10} z k_{\text{F}}^2 + \frac{1}{2} S_e T - \frac{3}{4\pi} k_{\text{F}} + E_{\text{corr}}, \quad (20)$$

где  $z$  — валентность;  $k_{\text{F}} = (3z\rho\pi^2)^{1/3}$  — вектор Ферми. Третье слагаемое в (20) представляет собой обменную, а четвертое — корреляционную энергию электронного газа. Величина  $E_{\text{corr}}$  была взята в аппроксимации Нозьера—Пайнса [34] (в а.е.):

$$E_{\text{corr}} = z(-0,0575 + 0,0155 \ln r_{\text{S}}), \quad (21)$$

где  $r_{\text{S}} = (9\pi/4)^{1/3} k_{\text{F}}^{-1}$  — электронный радиус.

Следует отметить, что используемые для численных расчетов выражения (20) и (21) для различных вкладов в энергию электронного газа являются достаточно точными для щелочных металлов.

Вклады, зависящие от псевдопотенциала электрон-ионного взаимодействия, определяются следующим образом:

$$E_1 = z \lim_{q \rightarrow 0} \left( \omega(q) + \frac{4\pi\rho z}{q^2} \right), \quad (22)$$

$$E_2 = \frac{1}{2\pi^2 \rho} \int_0^{\infty} a_{\text{SW-RPA}}(q) F(q) q^2 dq, \quad (23)$$

где  $\omega(q) = \rho \int \omega(r) e^{-iqr} d^3r$  есть формфактор неэкранированного электрон-ионного псевдопотенциала  $\omega(r)$ ;  $F(q)$  — характеристическая функция:

$$F(q) = -\frac{q^2}{8\pi\rho} \omega^2(q) [(\varepsilon_H(q) - 1)^{-1} + (1 - f(q))]^{-1}. \quad (24)$$

Здесь  $\varepsilon_H(q)$  — диэлектрическая функция Хартри:

$$\varepsilon_H(q) = 1 + \frac{1}{2\pi k_F x^2} \left( 1 + \frac{1-x^2}{2x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right), \quad (25)$$

где  $x = q/2k_F$  и  $f(q)$  — обменно-корреляционная функция, взятая нами в приближении Вашишта—Сингви [35] в простой аналитической форме:

$$f(q) = A[1 - \exp(-Bq^2/k_F^2)], \quad (26)$$

где  $A$  и  $B$  — параметры, которые зависят от электронного радиуса  $r_s$  и определяются интерполяцией из таблицы, приведенной в [35].

Для проведения псевдопотенциального расчета необходимо выбрать конкретный вид псевдопотенциала. В настоящей работе использовали модельный потенциал Анималу—Хейне [36] в локальном приближении [37]  $\omega_{\text{ЛАН}}(r)$ , формфактор которого равен:

$$\omega_{\text{ЛАН}}(q) = -\frac{4\pi\rho}{q^2} \left[ (z - A_M R_M) \cos(qR_M) + \frac{A_M R_M \sin(qR_M)}{qR_M} \right] \exp \left[ -0,03 \left( \frac{q}{2k_F} \right)^4 \right], \quad (27)$$

где  $A_M$  и  $R_M$  — параметры псевдопотенциала. Выбор данного потенциала обусловлен тем, что он приводит к достаточно точному описанию свойств щелочных металлов как в твердом, так и в жидком состояниях [3, 37].

Энергия Маделунга зависит только от структуры ионной подсистемы (полностью определяется структурным фактором) и задается выражением

$$E_3 = \frac{z^2}{\pi} \int_0^\infty (a_{\text{SW—RPA}}(q) - 1) dq. \quad (28)$$

В общем случае свободную энергию Гельмгольца можно минимизировать по трем параметрам: диаметру твердого остова, глубине и ширине прямоугольной ямы.

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Мы применили изложенный выше формализм для расчета структурных факторов и термодинамических свойств жидких Na и K вблизи температуры плавления при  $T = 373$  К. Исходные данные приведены в табл. 1. Параметры псевдопотенциала взяты из [37], экспериментальные данные о средней атомной плотности — из [38].

Решение в приближении SW—RPA приводит к нефизическому поведению структурного фактора при некоторых наборах параметров прямоугольной ямы, что не позволяет провести минимизацию свободной энергии по всем трем параметрам в широкой области их значений. Поэтому мы проводили минимизацию по двум параметрам:  $\sigma$  и  $\varepsilon$  при фиксированном значении  $\lambda$ . Нами были обнаружены две области разумных значений параметра  $\lambda$ , одна в интервале 1,4—1,5 и другая в интервале 1,8—1,95. При этих значениях структурный фактор имел положительные значения. По другим свойствам оказалось, что в первой области термодинамические свой-

Т а б л и ц а 1

Исходные данные и рассчитанные значения SW параметров (а.е.)

Металл	$R_M$	$A_M$	$\rho$	$\lambda$	$\sigma$	$\varepsilon$
Na	2,174	-0,2136	0,003602	1,926	6,2149	-0,000365
K	3,082	-0,1949	0,001885	1,933	7,6939	-0,000333

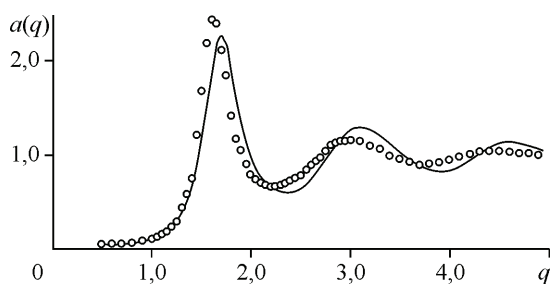


Рис. 1. Структурный фактор жидкого К вблизи температуры плавления, полученный с системой сравнения SW—RPA (сплошная линия) в сравнении с экспериментальными данными (кружочки)

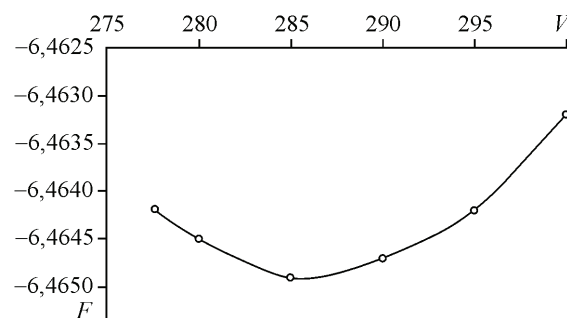


Рис. 2. Зависимость свободной энергии  $F$  (эВ) от атомного объема  $V$  (а.е.) для жидкого Na вблизи температуры плавления

ства (энергия, энтропия) имеют совершенно неразумные значения, которые существенно улучшаются во второй области, причем наилучшие результаты получены для наибольшего в интервале значения  $\lambda$ . При этом граница, когда решения теряются, является очень резкой. Поэтому для параметра  $\lambda$  брали наибольшее возможное значение для каждого из металлов, которые приведены в табл. 1. Интересно отметить, что значения  $\lambda$  для обоих металлов близки по величине. По остальным двум параметрам проводили минимизацию в широкой области значений и полученные данные также приведены в табл. 1. Отметим, что для диаметра твердого остова получены значения, близкие к тем, которые получали в вариационном методе с системой сравнения твердых сфер, а также тот факт, что глубина прямоугольной ямы, полученная нами, оказалась очень небольшой по величине и отрицательной по знаку. Ее численное значение по порядку величины совпадает с минимумом парного потенциала, рассчитанного с использованным в данной работе псевдопотенциалом, что говорит о ее разумном значении. Ширина прямоугольной ямы больше, чем ширина первого минимума парного потенциала.

Структурный фактор Na был рассчитан нами в [14], а на рис. 1 приводятся полученные результаты для структурного фактора жидкого К в сравнении с экспериментальными данными из [39]. Видно, что в области первых пиков теоретические и опытные данные находятся в хорошем согласии друг с другом.

Оказалось, что предложенная процедура дает более глубокий минимум свободной энергии, чем модель твердых сфер [14]. На рис. 2 показана рассчитанная зависимость свободной энергии жидкого Na при  $T = 373$  К от объема, приходящегося на один атом  $V = 1/\rho$ . Минимальное значение соответствует плотности, которая отличается от экспериментальной примерно на 2%. Это также подтверждает хорошую точность предложенной модели. В табл. 2 приводятся отдельные вклады в полную энергию жидкого металла в соответствии с уравнением (19). Видно, что основной вклад в энергию дает энергия Маделунга. Вклады нулевого и первого порядка по псевдопотенциалу в значительной степени компенсируют друг друга, а вклад второго порядка является малым. Наконец, в табл. 3 приводятся некоторые рассчитанные значения термодинамических величин, а именно: полной внутренней энергии  $E = 3k_B T/2 + E_0 + E_1 + E_2 + E_3$  и полной энтропии  $S = S_{\text{SW-RPA}} + S_e$  в сравнении с экспериментальными данными [40] и данными, полученными с системой твердых сфер в качестве системы сравнения. Согласие с опытными данными является вполне разумным.

Т а б л и ц а 2

Отдельные вклады (эВ) во внутреннюю энергию жидких металлов при  $T = 373$  К

Металл	$E_0$	$E_1$	$E_2$	$E_3$	$3/2k_B T$
Na	-2,21943	2,00965	-0,20543	-5,86522	0,04821
К	-2,17465	1,83565	-0,17297	-4,70499	0,04821



Значения внутренней энергии  $E$  (эВ) и энтропии  $S$  (ед.  $k_B$ ) жидких металлов

Металл	$E$			$S/k_B$		
	SW—RPA	HS	Экспе- римент	SW—RPA	HS	Экспе- римент
Na	-6,232	-6,397	-6,149	7,22	7,49	7,79
K	-5,169	-5,119	-5,170	8,77	9,15	9,45

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные исследования показали принципиальную возможность использования модели прямоугольной ямы в качестве системы сравнения в вариационном методе термодинамической теории возмущений.

Улучшение результатов возможно, если для описания HS модели использовать не полученные в РУ приближения, а более точные, параметризованные на основе компьютерного эксперимента, выражения (например, [41—45]). Однако наиболее существенный прогресс в развитии вариационного метода с SW системой сравнения может быть достигнут путем отказа от приближения RPA и использования с этой целью более совершенных подходов, в частности, предложенных в работах [16—18, 20—22, 24—29].

Работа поддержана грантами УрО РАН № РЦП-12-П5, Российского фонда фундаментальных исследований № 11-03-01029 и НШ № 1278.2012.3.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mansoori G.A., Canfield F.B. // J. Chem. Phys. – 1969. – **51**. – P. 4958 – 4967.
2. Umar I.H., Meyer A., Watabe M., Young W.H. // J. Phys. F: Metal Phys. – 1974. – **4**. – P. 1691 – 1706.
3. Bratkovsky A.M., Vaks V.S., Trefilov A.V. // J. Phys. F: Met. Phys. – 1983. – **13**. – P. 2517 – 2542.
4. Ватоллин Н.А., Юрьев А.А., Дубинин Н.Э. // Докл. АН. – 1992. – **323**, № 5. – С. 880 – 884.
5. Grosdidier B., Al-Busaidi M.S., Osman S.M. // J. Non-Cryst. Solids. – 2007. – **353**. – P. 3484 – 3487.
6. Dubinin N.E., Son L.D., Vatolin N.A. // J. Phys.: Condens. Matter. – 2008. – **20**. – P. 114111.
7. Dubinin N.E., Yuryev A.A., Vatolin N.A. // High Temp. Mater. Process. – 1995. – **14**, N 4. – P. 285 – 290.
8. Mon K.K., Gann R., Stroud D. // Phys. Rev. A. – 1981. – **24**. – P. 2145 – 2150.
9. Lai S.K. // Phys. Rev. A. – 1985. – **31**. – P. 3886 – 3892.
10. Bretonnet J.L., Bhuiyan G.M., Silbert M. // J. Phys.: Condens. Matter. – 1992. – **4**. – P. 5359 – 5370.
11. Badirkhan Z., Akinlade O., Pastore G., Tosi M.P. // J. Phys.: Condens. Matter. – 1992. – **4**. – P. 6173 – 6188.
12. Hausleitner C., Hafner J. // J. Phys. F: Metal Phys. – 1988. – **18**. – P. 1013 – 1023.
13. Hausleitner C., Hafner J. // J. Phys. F: Metal Phys. – 1988. – **18**. – P. 1025 – 1035.
14. Dubinin N.E., Yuryev A.A., Vatolin N.A. // J. Non-Equilib. Thermodyn. – 2010. – **35**. – P. 289 – 300.
15. Gopala Rao R.V., Murthy A.K.K. // Phys. Stat. Sol. B. – 1974. – **66**. – P. 703 – 707.
16. Kahl G., Hafner J. // Phys. Chem. Liq. – 1982. – **12**. – P. 109 – 134.
17. del Rio F., Lira L. // J. Chem. Phys. – 1987. – **87**. – P. 7179 – 7183.
18. Chang J., Sandler S.I. // Mol. Phys. – 1994. – **81**. – P. 745 – 765.
19. Lebowitz J.L., Percus J.K. // Phys. Rev. – 1966. – **144**. – P. 251 – 258.
20. Tang Y., Lu B.C.-Y. // J. Chem. Phys. – 1994. – **100**. – P. 3079 – 3084.
21. Tang Y., Lu B.C.-Y. // J. Chem. Phys. – 1994. – **100**. – P. 6665 – 6671.
22. Tang Y. // J. Chem. Phys. – 2007. – **127**. – P. 164504.
23. Percus J.K., Yevick G.Y. // Phys. Rev. – 1958. – **110**. – P. 1 – 13.
24. Yuste S.B., Santos A. // J. Chem. Phys. – 1994. – **101**. – P. 2355 – 2364.
25. Yuste S.B., Santos A., de Haro M.L. // Mol. Phys. – 2011. – **109**. – P. 987 – 995.
26. Dubinin N.E., Filippov V.V., Vatolin N.A. // J. Non-Cryst. Solids. – 2007. – **353**. – P. 1798 – 1801.
27. Дубинин Н.Э., Филиппов В.В., Ватоллин Н.А. // Докл. АН. – 2009. – **427**, № 5. – С. 620 – 623.
28. Dubinin N.E., Filippov V.V., Malkhanova O.G., Vatolin N.A. // Central European J. Phys. – 2009. – **7**. – P. 584 – 590.
29. Klebanov I., Ginchitskii N., Gritsay P. // Modern Phys. Lett. B. – 2008. – **22**. – P. 3153 – 3157.

30. *Wertheim M.S.* // *Phys. Rev. Lett.* – 1963. – **10**. – P. 321 – 323.
31. *Woodhead-Galloway J., Gaskell T., March N.H.* // *J. Phys. C.* – 1968. – **1**. – P. 271 – 285.
32. *Марч Н., Точу М.* Движение атомов жидкости. – М.: Металлургия, 1980.
33. *Thiele E.J.* // *J. Chem. Phys.* – 1963. – **39**. – P. 474 – 479.
34. *Pines D., Nozieres P.* *The Theory of Quantum Liquids.* – N. Y.: Benjamin, 1966.
35. *Vashishta P., Singwi K.* // *Phys. Rev. B.* – 1972. – **6**. – P. 875 – 887.
36. *Animalu A.O.E., Heine V.* // *Phil. Mag.* – 1965. – **12**. – P. 1249 – 1270.
37. *Вакс В.Г., Трефилов А.В.* // *Физика тверд. тела.* – 1977. – **19**, № 1. – С. 244 – 258.
38. *Huijben M.J., Van Hasselt J.P., Van der Weg K., Van der Lugt W.* // *Scr. Met.* – 1976. – **10**. – P. 571 – 574.
39. *Waseda Y.* *The Structure of Non-Cryst. Materials.* – N. Y.: McGraw-Hill, 1980.
40. *Hultgren R.R., Orr R.L., Anderson P.D., Kelley K.K.* *Selected Values of Thermodynamic Properties of Metals and Alloys.* – N. Y.: Wiley, 1973.
41. *Verlet L., Weis J.-J.* // *Phys. Rev. A.* – 1972. – **5**. – P. 939 – 952.
42. *Henderson D., Grundke E.W.* // *J. Chem. Phys.* – 1975. – **63**. – P. 601 – 607.
43. *Yuste S.B., de Haro M.L., Santos A.* // *Phys. Rev. E.* – 1996. – **53**. – P. 4820 – 4826.
44. *Павлюхин Ю.Т.* // *Журн. структур. химии.* – 2000. – **41**, № 5. – С. 988 – 1004.
45. *Sun J.-X., Cai L.-C., Wu Q., Jing F.-Q.* // *Commun. Theor. Phys.* – 2004. – **41**. – P. 400 – 404.