

Львівський державний університет ім. Івана Франка  
Київський університет ім. Тараса Шевченка  
Інститут фізики конденсованих систем АН України  
Інститут металофізики АН України

**СТРУКТУРА І ФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ  
НЕВПОРЯДКОВАНИХ СИСТЕМ**  
*(Тези доповідей I Української конференції)*

ЧАСТИНА I

*Розділ 1*

*Розділ 2*

*Присвячується 60-річчю доктора фізико-  
математичних наук, лауреата державної премії  
України, професора Я.Дутчака*

ЛЬВІВ-1993

# Р О З Д І Л   І

## Теорія неупорядкованих систем і їх чисельне моделювання

ТЕРМОДИНАМІЧНІ І КІНЕТИЧНІ УМОВИ ПЕРЕХОДУ РОЗПЛАВ-  
МЕТАЛІЧНЕ СКЛО

Харьков Є.І., Лисов В. ., Руденко А.Г.

Київський університет, фізичний факультет,  
проспект Глушкова 6, 252127, Київ, Україна

В межах теорії гомогенної кристалізації для багатоконпонентних систем, в якій урахується робота, що обумовлюється флуктуацією концентрації - мікроскопічного зародку нової фази [1], розглянуто термодинамічні і кінетичні умови переходу розплаву в металічне скло. Використані способи наближеного опису концентраційної залежності вільної енергії Гіббса в рідині і твердій фазах для систем з діаграмами стану типу евтектики, при наявності хімічних сполук і сигари, включаючи гадану поведінку вільної енергії в залежності від концентрації в області метастабільних розчинів. Стримана система рівнянь дозволяє розраховувати швидкість зародкоутворення і долю кристалічної фази в аморфній матриці в залежності від швидкості загартування, типу діаграми стану системи і концентрації розплаву у вихідному стані. Показано, що процес найбільш інтенсивного зародкоутворення кристалічної фази і інтенсивної швидкості росту кристаліків відбувається при температурі  $T = 0,7 T_0$  /де  $T_0$  - температура плавлення/. Встановлено, що швидкість зародкоутворення суттєво залежить від концентраційної залежності вільної енергії Гіббса в розплавах. Для сплавів з діаграмою стану евтектичного типу концентраційна залежність вільної енергії Гіббса має такий вигляд, що процес гомогенного зародкоутворення утруднений і через це легше отримати розплав в аморфному стані. Для систем з діаграмою стану типу "сигара" показано, що при швидкостях загартування  $T \leq 10^6$  К/с процес аморфізації не здійснюється при деяких концентраціях компонентів в розплаві. Виконані розрахунки для реальних і модельних систем узгоджуються з експериментальними даними.

Література

1. Харьков Е.И., Царьградская Т.Л. Теоретический анализ процесса кристаллизации сплавов системы Fe-B. //Металлофизика, 1982, 14, 8, с.42-51.

БАГАТОЧАСТИНКОВІ ДИНАМІЧНІ СТРУКТУРНІ ФАКТОРИ ЕЛЕКТРОННОЇ  
ТА ІОННОЇ ПІДСИСТЕМ ТА ЕЛЕКТРОННІ ФІЗИКА ПЕРЕНОСУ У  
НЕВПОРЯДКОВАНИХ МЕТАЛАХ

ШВЕЦЬ В. Т.

Одеський інститут низькотемпературної техніки та енергетики  
270100 Одеса, вул. Петра Великого, 1/3

Розвинута автором багаточастинкова теорія електронних явищ переносу в металах містить в якості головних структурних блоків багаточастинкові динамічні структурні фактори електронної та іонної підсистем а також змішані структурні фактори. На теперішній час ці об'єкти, за деякими виключеннями, мало дослідженні.

В роботі пропонується діаграмна техніка для обчислення багаточастинкових динамічних структурних факторів взаємодіючого електронного газу та вперше у явному вигляді обчислено трьохчастинковий динамічний структурний фактор взаємодіючого електронного газу.

Вперше на основі техніки багаточасових загоряних функцій Гріна викладено метод обчислення багаточастинкових динамічних структурних факторів взаємодіючого електронного газу і в загальному наближенні випадкових фаз отримано конкретні результати для багаточастинкових динамічних структурних факторів (починаючи з трьохчастинкових).

Вперше у другому порядку теорії збурень за псевдопотенціалом електрон-іонної взаємодії та потенціалом обмінної взаємодії електронів провідності з магнітними електронами отримано двочастинковий динамічний структурний фактор електронів провідності в реальному металі.

Вперше отримано і змішаний динамічний електрон-іонний структурний фактор металу. Встановлено його зв'язок з динамічними електронними багатополісициками та багаточастинковими динамічними структурними факторами іонної підсистеми.

Запропонована проста модель для двочастинкового динамічного структурного фактору іонної підсистеми невпорядкованих металів.

## БОЗЕ-КОНДЕНСАЦІЯ І $\lambda$ -ПЕРЕХІД У РІДКОМУ $^4\text{He}$

Вакарчук І.О.

Львівський державний університет ім. Івана Франка  
Драгоманова 12, Львів, 290005, Україна

Вивчення явища бозе-ейнштейнівської конденсації у надплинному  $^4\text{He}$ , чудового прикладу прояву квантово-механічної totoжності частинок у макроскопічних масштабах, дозволяє перевірити справедливості фундаментальних принципів хвильової механіки та квантової статистики. Тому, незважаючи на велику кількість теоретичних і експериментальних досліджень, інтерес до цієї проблеми не послаблює зовсім. Це значною мірою зумовлено незадоволеністю тією ступенню узгодженості між експериментальними вимірюваннями і теоретичними розрахунками, а також між різними експериментальними оцінками, що існують.

В нашій роботі зроблено огляд деяких результатів досліджень явища бозе-ейнштейнівської конденсації у надплинному  $^4\text{He}$ , виконаних на основі побудованої автором теорії, особливістю якої є те, що остаточні вирази пов'язують між собою лише спостережувані величини і не містять будь-яких вільних параметрів. Розраховано: пошуку матрицю густини рідкого гелію, одночастинкову матрицю густини, відносну кількість атомів бозе-конденсату як для основного стану, так і для відмінних від нуля температур, залежність від густини температури бозе-конденсації, середню кінетичну та потенціальну енергії, рівняння стану. Теорія пояснює існуючі експериментальні вимірювання і передбачає деякі нові закономірності.

### Література:

- Вакарчук І.О. УФЖ, 1984, 29, 111.;  
ТМФ, 1935, 65, 285;  
ТМФ, 1989, 80, 439;  
ТМФ, 1990, 82, 438;  
УФЖ, 1990, 35, 1261;  
Вісник Львівського університету. Серія фізична,  
1982, 25, 50.

САМОУЗГОДЖЕНА ТЕОРІЯ ЕЛЕКТРОННОЇ ТА ІОННОЇ  
СТРУКТУР ВІЛЬНОЇ ПОВЕРХНІ РІДКИХ МЕТАЛІВ

Васіліу С.В., Каїм С.Д., Коваленко М.П.

Одеський політехнічний університет, проспект Шевченко, 1  
270044, Одеса, Україна

Одеський державний університет, вул.П.Великого, 2  
270100, Одеса, Україна

У рамках багаточастинкової теорії неоднорідних металічних систем одержано самоузгоджену систему рівнянь, яка описує електронну та іонну структуру вільної поверхні рідкого металу. Система рівнянь складається з рівняння Дайсона з нелокальним обмінно-кореляційним потенціалом для хвильової функції квазічастинкового збудження в сильно неоднорідному електронному газі, ланцюга рівнянь Боголюбова-Борна-Гріна-Кірквуда-Івона для функцій розподілу іонів та умови самоузгодження. В приповерхневій області розраховано координатну залежність різних по природі вкладів в одноіонний потенціал, який діє на іони, для різних моделей електронного профіля густини, парних кореляційних функцій, способів розчеплення ланцюга рівнянь ББГКІ, наближень для функції діелектричної проникності. Приведено результати розрахунку профіля густини іонів для різних використаних наближень та напівузгоджених розрахунків густини електронів провідності для різних моделей профіля іонної густини.

7

**СТРУКТУРА ТА МЕХАНІЗМИ ФОРМУВАННЯ НЕВПОРЯДКОВАНИХ  
МАГНІТНИХ СТАНІВ ТИПУ СПІНОВОГО СКЛА У РОЗБАВЛЕНИХ  
ФЕРИМАГНІТНИХ ОКСИДАХ**

Ефімова Н. М., Попков Д. А.

Харківський університет, пл. Свободи, 4  
310077, Харків, Україна

У доповіді представлені узагальнені результати комплексного дослідження магнітних та теплових властивостей декількох спеціально підібраних як модельні систем розбавлених феримагнітних оксидів. Основну увагу зосереджено на таких актуальних для фізики неупорядкованих магнетиків питаннях, як природа стану типу спінового скла (СС) у гайзенберговських системах з короткодіючим обміном, їх структура та характер збудження.

Внутрішніми параметрами, що змінюються, є ступінь збурювання обмінної взаємодії, що визначається концентрацією та катіонним розподілом у ґратці немагнітних йонів, а також характер та величина анізотропії, управління механізмами якої здійснюється за рахунок цілеспрямованої зміни катіонного складу зв'язань з певною кристалічною структурою. У ролі зовнішніх впливів виступають постійне та низькочастотне магнітне поле і температура ( $4,2 \leq T \leq 1300\text{K}$ ). На основі експериментальних даних запропоновано типу Х-Н-Т діаграму, відмінною ознакою якої є існування неупорядкованих станів двох типів: кластерного СС та феримагнітного СС, де при  $T \leq T_f$  поряд з скінсглоєм існує феримагнітний порядок.

Визначено ролі обмінної взаємодії та анізотропії у формуванні різноманітних типів неупорядкованих станів та їх структури. Зокрема, запропонований механізм впливу випадкової анізотропії, що забезпечує перехід у стан типу СС при порівняльно слабкому збудженні обміну, у рамках якого можна пояснити високу стійкість таких станів до зовнішніх впливів.

## МОДЕЛИ РАСЧЕТА РАВНОВЕСНЫХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ СИСТЕМ.

Шунаев К. Ю., Батолин Н. А.

Институт сталлургии УрО РАН, 620219, Екатеринбург, Россия

Имеется множество работ, посвященных вопросам расчета термодинамики смешения и плавления многокомпонентных растворов. Однако, как правило, существующие модели позволяют рассчитывать, либо только термодинамические характеристики плавления, либо только смешения. Нами предложена простая модель жидкости, позволяющая с единых позиций подойти к описанию процессов плавления и смешения [1-5]. Предполагается, что жидкость представляет собой набор не взаимодействующих комплексов разного размера и формы. Несмотря на множество ограничений, характерное для модели идеального ассоциированного раствора точное приближение для конфигурационной энтропии, ограничение только конфигурационными вкладами в энтропию и парным приближением ближайших соседей при расчете энергии и т.д., модель показала свою применимость, как для качественного анализа, так и для количественных расчетов термодинамических свойств растворов, имеющих в твердой фазе устойчивое соединение [1-3,5].

Проведенный в [4] анализ показал, что учет самоассоциации в рамках развитой модели позволяет качественно правильно описать особенности поведения термодинамических свойств, в том числе положения линии ликвидус, эвтектических систем: положительная погрешность, положительные отклонения активностей от закона Рауля, рост теплоты смешения с температурой и т.п. В настоящей работе представлены результаты количественных расчетов положения линии ликвидус и термодинамики смешения бинарных эвтектических сплавов. Параметры модели оценивались из температуры плавления компонентов.

1. K. Yu. Shunyaev and A. N. Men. - Phys. Chem. Liquids, 1987, v.15, №4, p. 291-298. 2. К.Ю.Шунаев, А.Н.Мень, Н.А.Батолин. - Расплавы, 1988, т.2, №1, с.8-11. 3. К.Ю.Шунаев, В.И.Кашин, А.Н.Мень. - Расплавы, 1985, т.2, №5, с.11-20. 4. К.Ю.Шунаев, Н.А.Батолин, А.Н.Мень, Н.А.Батолин. - Докл. АН СССР, 1988, т.272, №7, с.183-187. 5. К.Ю.Шунаев, К.А.Бунин, А.М.Кришальский, А.А.Кашин, А.А.Мин, В.И.Кашин. - МХ, 1983, т.63, с.1872-1874.



ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ МОНТЕ-КАРЛО ПРИ ДОСЛІДЖЕННІ  
ОДНОМІРНО РОЗУПОРЯДКОВАНИХ КРИСТАЛІЧНИХ СТРУКТУР

Николин В. І. і Бабкевич О. Е.

Інститут металофізики АН України, пр. Вернадського, 36,  
252680, Київ, Україна

Значна частина кристалів має не досконалу структуру, а містить велику кількість хаотично розташованих дефектів упаковки (ХДУ). Для їх оцінки користуються розробленими ще в 50-і роки теоріями, які встановлюють залежність між дифракційними ефектами (ширина та зміщення центру дифракційних максимумів  $\delta$ ) та концентрацією ХДУ. Але ці залежності можна застосовувати тільки до порівняно простих структур, які містять в елементарних ґратках небагато ( $N = 2, 3$  чи  $4$ ) щільноупакованих шарів. Для структур, в яких  $N > 5$ , розрахунки настільки трудомісткі, що їх практично неможливо виконати. Щоб уникнути цих труднощів пропонується застосувати метод, в якому обчислюється розподіл інтенсивності дифракції від довільних щільноупакованих структур, в яких розташування ХДУ задається методом Монте Карло з допомогою комп'ютерних програм.

В результаті проведених розрахунків встановлено:

1. Розподіл інтенсивності для 2H, 3C і 9R ґраток розупорядкованими ХДУ співпадає з результатами, одержаними з допомогою теорій Вільсона, Патерсона Христіана.
2. Деформаційні ХДУ не можуть перевести одну багатозарову структуру в іншу.
3. В багатозарових структурах, від яких на рентгенограмах фіксуються рефлекси слабкої і середньої інтенсивності, концентрація ХДУ не перевищує 0,10 - 0,15.
4. На величину ширини дифракційних максимумів впливає природа ХДУ.

ЛІТЕРАТУРА

1. Николин В. И. Многослойные структуры и политипизы в металлических сплавах. Наукова думка, Киев, 1984.
2. Nikolin V. I. and Babkevich A. Yu. (1989). Acta Cryst. A45, 797-801

МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ НЕВПОРЯДКОВАНИХ СИСТЕМ  
ПО ДИФРАКЦІЙНИХ ДАНИХ.

Шлак А.П., Мельник О.В.  
Інститут металознавства АН України  
252142, Київ, вул.Вернадського 3С.

Запропоновано методику, у котрій за допомогою модельного підходу робиться спроба визначення структури непорядкованої системи на основі дифракційних даних. Розглядалась система із  $N$  атомів, які знаходяться в кубічній комірці з густиною рівною експериментальній. На систему накладалися періодичні граничні умови. Виходячи з того, що значення експериментальної парної функції розподілу атомів відомі, будувалась модель в якій вважалося, що експериментальний матеріал містить похибки, котрі мають випадковий некорельований характер. Задача вирішувалась у наближенні метода максимальної правдоподібності. Одержання максимально правдоподібних оцінок зводилося до мінімізації відповідної функції оптимальної обробки по параметрам - координатам атомів. Мінімізація здійснювалась шляхом використання ітеративної процедури Ньютона-Лейбна. Конфігураційні характеристики структурного стану досліджуваної системи одержувалися за допомогою статистики багатогранників Вороного та куткових кореляційних функцій. Методику реалізовано, як для однокомпонентних так і для багатоконпонентних об'єктів. У випадку останніх при побудові моделі використовуються експериментальні парціальні функції парного розподілу атомів.

Підхід було апробовано на прикладі гідкого алюмінію, де виявлено існування областей (кластерів) з упорядкуванням близьким до ГЦК. Показано, що з нагріванням доля цих областей та їх розміри зменшуються. В рамках розвинутої методики проводилися дослідження багатоконпонентних аморфних сплавів, зокрема  $Ni_{81}B_{19}$ . В цьому сплаві знайдено лутове упорядкування атомів Ni навколо атомів В. Атоми В знаходяться всередині тригональних призм з напівоктаедрами на гранях, котрі утворені атомами Ni. Тригональні призми сполучені між собою так, як це відбувається у кристалічній сполуці  $Ni_3B$  (P6mm). На ряду з призматичною упаковкою для сплаву  $Ni_{81}B_{19}$  характерна ікосаедрична координація атомів Ni.

ЕФЕКТИВНІ КРИТИЧНІ ІНДЕКСИ В ОПТИЧНОМУ І НЕЙТРОННОМУ  
ЕКСПЕРИМЕНТАХ

О. В. Чалий, Л. М. Черненко

Український державний медичний університет, Київ  
Інститут хімії поверхні АН України, Київ

Однією з важливих задач експериментів по розсіяння світла і холодних нейтронів в критичній області є визначення точних (теоретичних) значень критичних індексів теорії масштабної інваріантності. Реальні експерименти дають ефективні індекси, значення яких можуть досить істотно відрізнятися від тих величин, що передбачаються теорією. Причиною цього є ряд факторів, що спотворюють ідеалізовану критичну поведінку систем поблизу точок фазових перетворень 2-го роду та критичних точок.

Встановлені співвідношення між точними (теоретичними) та ефективними (експериментальними) критичними індексами  $\chi$ -дин при врахуванні таких факторів: а) просторової неоднорідності і анізотропії термодинамічних та кореляційних властивостей, що висліджаються зростаючим впливом слабких зовнішніх полів з наближенням до точок фазових перетворень, б) с можливістю середовища в од.ому чи двох вимірах (наприклад, при вивченні критичних явищ в арках з геометрією пл. ского шара чи циліндра).

Важливим результатом проведених розрахунків є можливість досягнення ефективними критичними індексами значень, що характеризують термодинамічну теорію самоузгодженого поля Ландау і теорію вільного поля флуктуація Орнштейна-Зерніке, а саме:

$$\chi_{\text{эф.}} = 1, \quad \delta_{\text{эф.}} = 3, \quad \eta_{\text{эф.}} = 0.$$

ЕФЕКТ ВИПАДКОВОГО ПОЛЯ У ТЕОРІЇ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ТА  
КІНЕТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ РІДКИХ МЕТАЛІВ

Гурський З.О., Кушаба В.І.

Інститут фізики конденсованих систем АН України,  
вул. Свенціцького 1, 290011, Львів, Україна

У традиційній теорії рідких металів і сплавів вважається, що єдиним наслідком відсутності у рідині трансляційної інваріантності є скінченні значення структурного фактора  $S(\vec{q})$  у всій області значень хвильового вектора, в той час як у ідеальному твердому тілі  $S(\vec{q})$  відмінний від нуля тільки для  $\vec{q}$ , рівних векторам оберненої ґратки. У даній роботі звертається увага ще на один ефект, зумовлений топологічною неупорядкованістю рідин. Внесок цього ефекту у властивості рідких металів досліджується у рамках теорії псевдопотенціалів (ПП).

У [1] було проаналізовано структуру електрон-іонного ПП неупорядкованого металу і показано, що у його матричних елементах, на відміну від випадку ідеального кристалу, присутній член, який не факторизується на множники, що характеризують окремо структуру системи та розсіюючі властивості індивідуального іона. Як наслідок, квадрат матричного елемента ПП рідкого металу, усереднений за конфігураціями, має доданок, який генетично пов'язаний з кореляційною функцією випадкового поля. У [2] запропонований спосіб обчислення цього доданку методом модельних псевдопотенціалів (МП).

У даній роботі результати теорії ілюструються конкретними чисельними розрахунками. Для Al, Cu, Mg та Zn визначено параметр, який характеризує спектральну функцію МП металу. Обчислення виконані для кількох відомих у літературі МП. Досліджується вплив температури на спектральну функцію флуктуацій МП. Аналізується внесок ефектів, зумовлених випадковим полем, у кінетичні та термодинамічні властивості рідких металів.

1. Юнговский И.Р., Гурский З.А. Квантово-статистическая теория неупорядоченных систем. - Киев: Наук. думка, 1991.
2. Gurskii Z. On Certain Way to Determine the Correlation Function of a Liquid Metal Random Field. - Lv'v, 1992 (Preprint IPOM-92-2E).

РАСЧЕТ СВОЙСТВ ПРОСТЫХ МЕТАЛЛОВ В МЕТОДЕ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА  
ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

В. А. Крашанинин

Институт металлургии Уральского отделения РАН  
Россия, 620219, Екатеринбург, Амундсенов, 101

В работе [1] показано, что учет микроскопических эффектов в методе псевдопотенциала из первых принципов приводит к хорошему согласию вычисленных свойств простых металлов с экспериментальными данными. Однако расчеты для лития хуже согласуются с ними, чем в случае натрия и калия.

В настоящей работе предлагается вариант метода псевдопотенциала, предложенного еще У. Харрисоном в [2], хотя соответствующих расчетов проведено не было. Кроме того расчеты проводятся с использованием истинных, а не псевдоволновых функций электронов проводимости. Учитывается также ненормированность ортогонализированных плоских волн. При этом не возникает понятий эффективной валентности и ортогонализационной дырки, вычисление распределения плотности заряда которой вызывает известные затруднения. Использование истинных волновых функций позволяет также определить сдвиги энергий основных электронов за счет взаимодействия с электронами проводимости.

В работе проведен расчет энергий связи  $-E_{\text{св}}$ , равновесных атомных объемов  $-V_0$ , модулей всестороннего сжатия  $-V_T$  и стабильности структур простых металлов. Проведенные расчеты дают правильную наблюдаемую кристаллическую структуру.

Металл	$E(\text{Ry})$ Теор.	$E(\text{Ry})$ Эксп.	$V_T \cdot 10^{-9} \frac{\text{H}}{\text{M}}$ Теор.	$V_T \cdot 10^{-9} \frac{\text{H}}{\text{M}^2}$ Эксп.	$\Omega_0$ з (а. е.) теор.	$\Omega_0$ з (а. е.) эксп.
Li	0.517	0.517	13.6	13.7	146	145
Na	0.461	0.461	8.2	8.2	267	265
K	0.393	0.392	4.1	4.1	510	491
Rb	0.380	0.372	3.8	3.1	676	588
Mg	1.772	1.778	-	-	163	156
Al	4.056	4.158	-	-	114	111
Ca	1.455	1.456	-	-	294	284

1. В. А. Смирнов, С. И. Подкорытов, В. В. Козлов, Э. В. Киселев. ДММ. 1979. Т. 47, вып. 2. С. 261-270.
2. У. Харрисон. Теория твердого тела. М.: Мир. 1973. 557 с.

ПРОЗОРИСТЬ НЕВПОРЯДКОВАНОЇ СУПЕРГРАТКИ,  
СКЛАДЕНОЇ ІЗ ПОТЕНЦІАЛЬНИХ БАР'ЄРІВ ТА КВАНТОВИХ ЯМ  
З РОЗСІЮЮЧИМИ ЦЕНТРАМИ ВСЕРЕДИНИ БАР'ЄРІВ

Король А.М.

Київський технологічний інститут харчово-промисло-  
вості, вул.Володимирська, 68, 252017, Київ, Україна

Розглядається неупорядкована супергратка, складена із скінченної послідовності по черезно змінних квантових ям та примокутих потенціальних бар'єрів, всередині яких містяться розсіюючі центри із сильно локалізованим потенціалом. Ширини квантових ям різні і розподілені довільно вздовж ланцюга супергратки. За допомогою методу трансферних матриць обчислюється спектр прозорості -- тобто залежність коефіцієнту проходження електрона через супергратку від його енергії -- розглядає юї системи. Показано, що спектр прозорості такої системи в загальному випадку дуже відрізняється як від спектру прозорості розупорядкованої супергратки без розсіювачів, так і від спектру сукупності безладно розташованих  $\delta$ -потенціалів. Аналізуються залежність спектру прозорості від товщини потенціального бар'єру, потужності розсіювача, його розташування всередині бар'єру, кількості періодів супергратки. Основними рисами спектрів, що аналізуються, є: 1) при внесенні розсіювачів в бар'єри значне -- на порядки разів -- збільшення усередненої по висоті бар'єру та максимальної прозорості (коефіцієнту трансмісії електрона) супергратки, 2) створення областей високої прозорості, 3) сильна залежність форми спектру та значень коефіцієнту трансмісії від параметрів задачі. Змінюючи ці параметри, можна здійснювати потрібне регулювання енергетичних спектрів розглядуваної системи.

МОДЕЛЬ ГОМОГЕННОГО ТЕЧЕНИЯ СВЕЖЕЗАКАЛЕННЫХ  
МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ

А.Т.Косилов, В.А.Хоник

Воронежский госпединститут, Россия

Предложена новая теоретическая модель гомогенного течения свежезакаленных металлических стекол (МС). Модель количественно объясняет основные экспериментально установленные закономерности гомогенного течения МС: логарифмическую кинетику ползучести; ньютоновский характер течения при низких напряжениях и неньютоновский при высоких; температурно-временные зависимости вязкости; влияние предварительной термообработки, а также некоторые особенности течения.

Гомогенное течение в рамках модели представляется как совокупность локальных пространственно изолированных не взаимодействующих необратимых элементарных сдвиговых перестроек с распределенными энергиями активации. Каждая элементарная перестройка осуществляется в две стадии: стадия I - термоактивируемый элементарный сдвиг с активационным объемом порядка объема первой координационной сферы, который немедленно митигирует стадию II - вязкую деформацию окружающей области в соответствии с ориентацией приложенного напряжения. Модель дает следующий закон ползучести:

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{G} V N k T \ln \left( 1 + 2 \frac{t}{\tau} \operatorname{ch} \left( \frac{\gamma \sigma V}{k T} \right) + \left( \frac{t}{\tau} \right)^2 \right),$$

где  $\varepsilon$  - сдвиговая деформация,  $\sigma$  - приложенное сдвиговое напряжение,  $G$  - модуль сдвига,  $t$  - время испытания,  $V$  - объем, охватываемый процессом II,  $N$  - объемная плотность атомных конфигураций, определяющих процесс I в единичном интервале энергий активаций,  $\tau$  - время предварительного отжига и  $\gamma$  - сдвиговая деформация, соответствующая этому процессу.

ЕФЕКТИВНЕ ВНУТРІШНЄ ПОЛЕ  
В МОДИФІКОВАНІІ МОДЕЛІ ДЕ ЖІНА З ВАКАНСІЯМИ

І.В. Стасюк, О.В. Величко

Інститут фізики конденсованих систем АН України  
Україна, 290011 Львів, Свенціцької 3 І

Розглядається система, утворена частинками, розташованими на вузлах простої ґратки, що мають два можливих положення рівноваги вдовж певного напрямку. Частина вузлів може бути незайнятою. Така система описується моделлю Ізінґа в поперечному полі (модель де Жена), модифікованою за рахунок впливу вакансій. Відомо, що ця модель описує спінове впорядкування, а також може використовуватись при описі сплавів заміщення та аморфних систем.

Показано, що вакансії приводять до виникнення ефективного внутрішнього поля, діючого та псевдоспіни. Розташування положень рівноваги вдовж однієї осі веде до анізотропії системи, що зумовлює і анізотропію внутрішнього поля.

З метою більш повного врахування внутрішнього поля при конфігураційному усередненні використано псевдоспінові двочасові температурні функції Гріна, спроектовані на стани числа заповнення найближчих сусідів. Для замкнення побудованого на них ланцюжка рівнянь використано наближення хвостових фаз, яке в цьому випадку формально відповідає наближенню "Хаббард-І". Досліджено енергетичний спектр колективних коливань і показано, що дія внутрішнього поля приводить до виникнення додаткової зони в спектрі. Знайдена в наближенні незалежних підзон густина станів домагає, що ширини як цієї зони, так і зони звичайних псевдоспінових збуджень, залежать від концентрації вакансій. Зумовлена внутрішнім полем додаткова зона зникає при зменшенні концентрації вакансій і зникає при їх відсутності.

У використаній схемі конфігураційного усереднення нехтувались кореляції між числами заповнення з однаковими індексами вузла. Врахування таких кореляцій приводить до розщеплення кожної з зон на дві підзони, що перекриваються. Для об'єкта в роботі значення параметрів це яскраво не впливає на загальний вигляд густини станів, залишаючи незмінною її двошлісову структуру.



ФАЗОВИЙ ПЕРЕХІД ГАЗ-РІДИНА  
 ПРИ НАЯВНОСТІ АТОМІВ У ЗБУДЖЕНИХ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНАХ  
 І НУКЛЕАЦІЙНІ ЕКСПЕРИМЕНТИ В УМОВАХ РЕЗОНАНСНОГО ОПРОМІНЕННЯ  
 О.В.Держко

Інститут фізики конденсованих систем АН України, м.Львів

Розглядається газ дворівневих частинок, що містить частинки у збудженому електронному стані. Через значну різницю між часом життя збудженого електронного стану ( $\sim 10^{-9}$ - $10^{-8}$ с) і часом встановлення рівноваги за поступальними ступенями вільності ( $\sim 10^{-11}$ - $10^{-10}$ с) можна вивчати рівноважні властивості газу при заданому (нерівноважному) стані електронної підсистеми. Отримане для частково збудженого газу рівняння стану типу Ван-дер-Ваальса істотно відрізняється від такого рівняння при відсутності збуджених частинок через наявність резонансних ефективних міжчастинкових взаємодій, які виникають у групах різнозбуджених тотальних частинок. Їх знову можна дослідити залежність критичних параметрів і кривої співіснування газ-рідина від коєфіцієнта ірації збуджених частинок [1].

У доповіді обговорюється зв'язок розвинутої теорії з результатами якісного дослідження фото конденсації пари води [2] і кількісними вимірними в нуклеаційних експериментах в умовах резонансного опромінення з паром ртуті і цезію [3-6]. Для оцінки концентраційної залежності ймовірності утворення зародка критичного розміру необхідно оцінити концентраційну залежність коефіцієнта поверхневого натягу, для чого в межах теорії Ван-дер-Ваальса можна скористатися законом відповідних станів [7].

1. Yulchovskii I.R., Levitskii R.R., Dergzko O.V., Novak R.P. - Phys.Lett.A, 1989, 141, 1,2, p.18-24.
2. Безуглий Б.Я., Галачин Е.А., Дудкин Г.Я. - Газы в ЗЭГ, 1975, 2, 2, с.76-79.
3. Martens J.A.E. - Dissertation, Marburg, 1987. 92 s.
4. Martens J., Uohmann H., Hensel F. - J.Phys.Chem., 1987, 91, 10, p.2489-2492.
5. Cha G.-S. - Dissertation, Marburg, 1992. 74 s.
6. Martens J., Uohmann H., Zhukhovitski D., Hensel F. - In: The 18th IUPAP International Conference on Statistical Physics, Berlin, 2-8 August 1992. Programme & Abstracts. P.8-9.
7. Оно С., Кондо С. Молекулярная теория пов'язанного натяжения в жидкостях. М.: Издательство иностранной литературы, 1963. 247 с.

## СПЕЦИФІКА КРИТИЧНИХ ЯВИЩ В МАЛИХ ОБ'ЄМАХ РІДИН

Л. А. Булавін, К. О. Чалий

Київський університет ім. Тараса Шевченка

Аномалії, що спостерігаються при фазових перетвореннях 2-го роду та критичних явищах в просторово необмежених системах, суттєво змінюють свій характер у тих випадках, коли середовище стає обмеженим в одному чи двох вимірах. Для систем, що просторово обмежені в усіх трьох вимірах, слід чекати зникнення критичних аномалій.

На доповнення до проведених раніше розрахунків кореляційних властивостей плоского шару та циліндра знайдена парна кореляційна функція флуктуацій скалярного параметра порядку (для рідин - флуктуацій густини) сфери радіуса  $a$ , яка заповнена рідиною з термодинамічними параметрами (густиною, тиском, температурою), що близькі до критичних значень в об'ємній фазі:

$$G_2(r) = \frac{\mathcal{E}}{2\chi} G_{2\infty}(r) \left[ \frac{a-r}{r(\chi a-1)} + C \frac{2a(\chi r+1)}{\mathcal{E}r(\chi a+1)} \chi a e^{\chi a} \right],$$

де  $G_{2\infty}(r) = \exp(-\chi r) / r$  - кореляційна функція і  $\chi = R_c^{-1}$  - обернений радіус кореляції об'ємної фази,  $C = G_2(a)$  - значення парної кореляційної функції на поверхні сфери.

Розрахований радіус кореляції  $R_c^*$  флуктуацій густини для сферичного зразка і встановлено, що він залишається обмеженим і набуває свого максимального значення, рівного  $a$ , при  $\chi \rightarrow 0$ , тобто в критичній точці об'ємної фази.

## НЕЛОКАЛЬНІ ВЗАЄМОДІЇ ЕЛЕКТРОНІВ З ІОНАМИ ТА РОЗРАХУНОК СТРУКТУРНИХ ХАРАКТЕРИСТИК РІДКИХ МЕТАЛІВ

М.В.Ваврух, Я.М.Мулява

Інститут фізики конденсованих систем АН України,  
Львів, вул. Свенціцького, 1.

Методом статистичного засереднення за станами локалізованих електронів [1] здійснено мікроскопічний перехід від електрон-ядерної до електрон-іонної моделі металу. Досліджено багаточастинкові нелокальні потенціали електрон-іонних взаємодій в простих металах як в імпульсному, так і в координатному представленнях. Знайдені потенціали відрізняються від відомих локальних модельних потенціалів поведінкою всередині та поблизу іона, що зумовлено коректним врахуванням його внутрішньої структури.

На основі базисного підходу при статистичному засередненні за станами підсистеми електронів провідності виконано перехід до іонної моделі металу з ефективними багаточастинковими взаємодіями. Досліджено вплив наближень для поправки на локальне поле [2], а також вплив нелокальності електрон-іонних взаємодій на характер ефективних двоіонних потенціалів.

Методом колективних змінних досліджено бінарну функцію розподілу та структурний фактор простих металів в рідкому стані при базисному врахуванні короткодіючої складової двоіонних взаємодій. Результати співставляються з експериментальними даними та розрахунками на основі модельних потенціалів.

### Література

1. М.В.Ваврух, Т.Е.Крохмальський. Многочастичные нелокальные взаимодействия электронов с ионами в металлах // *ФММ*. - 1985. - 19, № 5. - С. 864-873.
2. М.В.Ваврух, Я.М.Мулява. Базисный подход в микроскопической теории ридких металов. Иерархия моделей. - Львів, 1993. - 24 с. - (Препринт / АН України. ІФКС; ІФКС-93-2У).

ДИСПАТИВНІ СТРУКТУРИ У ФЛУКТУАЦІЙНИХ МОДЕЛЯХ  
САМООРГАНІЗАЦІЇ: ЗАГАЛЬНІ ТЕОРЕМИ, ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ

О. В. Чалий, Я. В. Пехмістер, Д. А. Ужняк  
Український державний медичний університет, Київ  
Київський університет ім. Тараса Шевченка

При вивченні питань, пов'язаних з утворенням дисипативних структур у просторі і часі (відповідно біфуркацій Т'юрінга і Хопфа), звичайно використовують реакційно-дифузійні моделі (бриселлятор, орегонатор, тощ). Ці моделі базуються на кінетичних рівняннях хімічних процесів бі- і тримолекулярного типу. Однак поблизу границі стійкості реакції визначальну роль в кооперативній поведінці систем відіграють сильно розвинені локальні флуктуації характерного параметру порядку (для хімічно реагуючих систем це координата чи ступінь повноти реакції, похідна від якої по відповідному термодинамічно спряженому полю - спорідненості реакції прямує до нескінченності в точці біфуркації). Послідовне врахування цих флуктуацій в рамках реакційно-дифузійних моделей провести досить складно, бо це потребує врахування у відповідних кінетичних рівняннях доданків, що описують зіткнення всіх порядків.

Нами вивчені загальні властивості моделей самоорганізації, що розроблені на основі флуктуаційних гамільтоніанів з двома взаємодіючими параметрами порядку. Доведені теореми про біфуркації Хопфа і Т'юрінга для запропонованих моделей (так, визначені умови появи граничного циклу) при певних співвідношеннях між параметрами характеристичного дисперсійного рівняння. Проведене чисельне моделювання дисипативних структур, що викають внаслідок біфуркацій Хопфа і Т'юрінга у флуктуаційних моделях процесів самоорганізації.

УНІВЕРСАЛЬНІСТЬ АСИМПТОТИЧНИХ КРИТИЧНИХ ІНДЕКСІВ  
КРИВИХ СТВІСНУВАННЯ ПРОСТИХ РІДИН

Шиманський Ю.І., Шиманська О.Т., Олейнікова А.В.

Київський університет ім.Тараса Шевченка  
252127, Київ, пр.Глушкова 6, Україна

Згідно з уявленнями масштабної теорії параметр порядку  $\Delta\rho$  системи з наближенням до критичної точки змінюється в залежності від приведенної температури  $\xi = (T_{кр} - T)/T_{кр}$  за степеневим законом  $\Delta\rho \sim \xi^\beta$ , де  $\beta$  – критичний індекс. Для чистих рідин параметр порядку  $\Delta\rho$  пропорційний різниці густин співіснуючих рідкої та парової фаз. У відповідності з теорією показник  $\beta$  має бути універсальним для систем, що належать до одного класу універсальності. Рідина прийнято відносити до тривимірних систем Ізінговського типу з короткодієюм притяганням. Теоретичні розрахунки дають для  $\beta$  значення  $0,325 \pm 0,327$ .

В даній роботі в результаті статистичного аналізу експериментальних даних по температурній залежності густини співіснуючих рідкої та газової фаз простих рідин /бензолу, дейтероводню, етилену та азоту/ поблизу критичної точки одержані одночленні степеневі рівняння, що адекватно описують дані з точністю  $(0,06 \pm 0,1)\%$ . При аналізі даних використовувались розроблені авторами критерії, які базуються на уявленнях про існування експериментально досяжної асимптотичної критичної області, про наявність символічного сходження масштабних характеристик для рідини та пари при підході до критичної точки і ін. Результати статистичного аналізу показали, що при апроксимації експериментальних даних рівнянням з нефіксованими параметрами не одержується значення  $\beta = 0,325$ , яке прогнозується деякими сучасними теоріями. Для всіх проаналізованих речовин одержані нами значення  $\beta$  дещо більші:  $\beta = 0,355 \pm 0,003$ , що повністю узгоджується з раніше знайденими нами значеннями  $\beta$  для бензолу, пентану, гептану. Показано також, що застосування для апроксимації "розширеного скейлінгу" з використанням теоретичних значень показників степені є досить штучною процедурою; слід приділяти увагу розвитку теорії, що зможе більш просто і адекватно описати експериментальні результати.

## ДО СТАТИСТИЧНОЇ ТЕРМОДИНАМІКИ СИЛЬНО НЕІДЕАЛЬНОЇ ПЛАЗМИ

Л.Ф. Блажівський

Львівський державний університет ім. Івана Франка

Дослідження термодинамічних функцій сильно неідеальної плазми присвячена велика кількість наукових робіт. Незважаючи на ці успіхи теорії (зокрема для високотемпературної області) значно скромніші у порівнянні із випадком слабкої неідеальності. Результати досліджень показують що, не дивлячись на різноманітність підходів, поправка на взаємодію до середньої енергії системи у класичному випадку може бути записана у вигляді

$$\Delta \epsilon = -N \frac{\theta}{2} \left\{ a (\lambda d)^{2/3} - b \right\}, \quad \lambda d \gg 1. \quad (1)$$

Тут  $N$  - число частинок,  $\theta$  - статистична температура,  $\lambda^{-1} = (4\pi e^2 \cdot n / \theta)^{-1}$  - радіус Дебая,  $n$  - концентрація,  $d = e^2 / \theta$  - радіус В'єрума,  $a, b$  - деякі числа. Параметр  $\lambda d$  характеризує неідеальність системи. Для слабо неідеальної плазми  $\lambda d \ll 1$  і тоді замість (1) має місце формула Дебая

$$\Delta \epsilon = -N (\theta/2) \lambda d.$$

Числові параметри  $a, b$  різні у різних теоріях. Так у піонерській роботі Берліна і Монролла для них отримані значення  $a = 3/4^{1/3}$ ,  $b = 1$ . При моделюванні системи вігнерівським кристалом  $a = 3^{2/3}$ ,  $b = 3$ . В нашій роботі система заряджених частинок лише частково моделюється вігнерівським кристалом. Тоді її гамільтоніан можна подати у вигляді

$$H = \alpha H_b + (1 - \alpha) H_n, \quad (2)$$

де  $H_b$  і  $H_n$  гамільтоніан кристалу і звичайний гамільтоніан частинок,  $\alpha$  - деякий параметр. Статистична сума системи розраховується у наближенні хаотичних фаз. Параметр  $\alpha$  визначається варіаційним методом мінімізацією середньої енергії. Тоді можна показати, що  $a = 2 \cdot 3^{2/3}$ ,  $b = -4/3$ . Такі значення параметрів краще, порівняно з наведеними раніше, узгоджуються з результатами розрахунків методом Монте-Карло. Відзначимо також, що другий доданок в (1) характерний для середньої енергії вільних частинок, тобто сильне відтовхування зарядів моделюється збільшенням числа частинок. Неважко побачити, що об'єднання доданку  $\sqrt{\theta} b/2$  з  $\Delta \epsilon_0 = 3N \theta/2$  приводить до результату  $\Delta \epsilon_{ef.} = 3N^* \theta/2$ ,  $N^* = 2N$ .

## ТЕРМОДИНАМІКА НЕПОРЯДКОВАНИХ ХУ СПІНОВИХ ЛАНЦЮЖКІВ

О.В.Держко, Т.Є.Крохмальський

Інститут фізики конденсованих систем АН України, м.Львів

Вивчається неоднорідна анізотропна 1D  $s=\frac{1}{2}$  ХУ модель у поперечному полі з гамільтоніаном

$$H = \sum_{j=1}^N \Omega_j s_j^z + \sum_{j=1}^N \left[ J_j^{xx} s_j^x s_{j+1}^x + J_j^{yy} s_j^y s_{j+1}^y \right], \quad (1)$$

яка у різних граничних випадках переходить у добре відомі моделі теорії конденсованих середовищ. Після використання перетворення Йордана-Вігнера, задача відшукування власних значень гамільтоніана (1)  $\Lambda_k$  зводиться до розв'язування системи рівнянь  $M \cdot N$ , що формально є рівняннями для амплітуд зміщення атомів з частотами  $\Lambda_k$  в неоднорідному одновимірному ланцюжку атомів у гармонічному наближенні з врахуванням взаємодії найближчих і наступних після найближчих сусідів. Для дослідження щільності розподілу квадратів власних значень (1)  $\mathcal{K}(k^2) = \frac{1}{N} \sum_k \delta(\omega^2 - \Lambda_k^2) = [\rho(\mathbb{E}) + \rho(-\mathbb{E})] / (2|\mathbb{E}|)$ , де  $\rho(\mathbb{E}) = \frac{1}{N} \sum_k \delta(\mathbb{E} - \Lambda_k)$  - спектральна щільність, у випадку, коли параметри  $\Omega_j$ ,  $J_j^{xx}$ ,  $J_j^{yy}$  на вузлах приймають випадкові значення згідно з наперед заданим розподілом, використовується метод Діна [1].

На прикладі ізотропної ХУ моделі у лоренцовому поперечному полі - випадку, у якому відомий точний результат для уявної спектральної щільності [2], продемонстровано придатність розглянутої схеми обчислення щільності станів у класі моделей, що розглядається.

Виконано дослідження термодинамічних властивостей для окремих варіантів моделі (1) які реалізуються у конкретних фізичних системах.

1. Dean P. - Rev.Mod.Phys., 1972, 44, 2, p.127-168.
2. Nishimori H. - Phys.Lett.A, 1984, 100, 5, p.239-243.

## ОСНОВНИЙ СТАН ЕЛЕКТРОНА У ВИПАДКОВОМУ ПОТЕНЦІАЛІ

Ткачук В.М.

Львівський університет, вул. Драгоманова 12,  
290005, Львів, Україна

З допомогою суперсиметричної квантової механіки досліджено основний стан електрона у випадковому потенціалі. Одновимірна суперсиметрична квантова механіка була запропонована Віттенем як лабораторія для дослідження суперсиметричних моделей [1]. Наявність суперсиметрії зв'язана з можливістю факторизації гамільтоніану і пониження порядку диференціального рівняння, яке визначає основний стан системи [2,3]. Це дає можливість знайти точний розв'язок для хвильової функції основного стану.

В роботі побудовано випадковий суперпотенціал, який пов'язаний з неупорядкованим ланцюжком  $N$  атомів. Одержано точний розв'язок для хвильової функції основного стану електрона в полі неупорядкованого ланцюжка атомів. Показано, що хвильова функція локалізується біля лівої чи правої грани ланцюжка атомів чи може бути розповсюджена на весь ланцюжок. Знайдено умови при яких реалізуються ці три випадки. Як приклад розглянуто суперпотенціал, який генерує набір хаотично розміщених  $\delta$ -потенціалів з послідовним чергуванням їхнього знаку і досліджено основний стан частинки в цьому потенціалі.

1. Witten E. - Nucl. Phys. Ser. B, 1981, v. 188, p. 513.

2. Гендештейн Л.З., Криве Н.В. - УФН, 1985, т. 146, вып. 4, стр. 553-590.

3. Гендештейн Л.З. - Письма в ЖЭТФ, 1983, т. 38, вып. 6, стр. 299-302.



МОДИФІКОВАНИЙ ПІДХІД ДО РОЗРАХУНКІВ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК  
РІДКИХ СПЛАВІВ НЕПЕРЕХІДНИХ МЕТАЛІВ В РАМКАХ ТЕОРІЇ ЗБУРЕНЬ

Федоров В.С., Харьков С.І.

Київський університет, фізичний факультет, Київ, 252601,  
УКРАЇНА

Термодинамічна теорія збурень (ТТЗ) є одним з найпотужніших методів розрахунку термодинамічних властивостей рідин. З'єднання ТТЗ з методом псевдопотенціалу дає можливість з досить великою точністю обчислювати термодинамічні характеристики як чистих рідких металів, так і їх сплавів.

Існує декілька версій ТТЗ, з яких найбільш часто використовуються так звана "варіаційна" версія (HSV) та версія, запропонована Баркером і Гендерсоном (BG); остання вважається найбільш досконалою. Відзначимо, що, незважаючи на те, що HSV за об'єднаністю фізичних припущень дійсно поступається BG, точність результатів цих двох версій ТТЗ часто майже однакова (більше того, в деяких випадках HSV гарантує навіть кращу точність, ніж BG).

На нашу думку, така ситуація обумовлена саме наявністю варіаційного параметра розвитку потенціалу іон-іонної взаємодії на "базисну частину" і збурення в HSV і фіксованістю процедури в борю цього параметру за Баркером і Гендерсоном, що робить ТТЗ BG дуже чутливою до помилок в визначенні іон-іонного потенціалу.

Ми пропонуємо модифікацію ТТЗ BG, яка поєднує переваги як HSV, так і BG версій ТТЗ. В запропонованому варіанті ТТЗ реалізовано неперервне і гладке розвиття потенціалу іон-іонної взаємодії  $u_{ij}(r)$  на "базисну частину"  $u_{ij}^0(r)$  і збурення  $\phi_{ij}(r)$

$$\phi_{ij}(r) = \begin{cases} u_{ij}(R_{ij}^0) + (r - R_{ij}^0)(du_{ij}/dr)_{r=R_{ij}^0}, & r \leq R_{ij}^0 \\ u_{ij}(r), & r > R_{ij}^0 \end{cases}$$

$$u_{ij}^0(r) = \begin{cases} u_{ij}(r) - u_{ij}(R_{ij}^0) - (r - R_{ij}^0)(du_{ij}/dr)_{r=R_{ij}^0}, & r \leq R_{ij}^0 \\ 0, & r > R_{ij}^0 \end{cases}$$

де  $R_{ij}^0$  - варіаційний параметр. За попередніми оцінками, точність запропонованого варіанту ТТЗ краща, ніж точність HSV і BG.

## КЛАСТЕРНАЯ ТЕОРИЯ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ АМОРФНЫХ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ

Мицек А.И.

Институт металлофизики АН Украины, Киев, 252142  
пр. Вернадского 36, Украина

Наличие "свободного объема" позволяет рассматривать аморфные ленты и пленки как системы взаимодействующих кластеров. Обменное взаимодействие между малыми (размером  $\sim 1$  нм) кластерами стабилизирует ферромагнитное состояние. Используется одноионный механизм магнитной анизотропии (МА) ГЦК кластеров с центральными  $3d$ - (Co и др.) или  $4f$ - (редкоземельными) ионами. Константа МА отдельного кластера определяется лигандами окружения. В случае одинаковых лигандов (0-кластер) константа МА  $K^{(0)}$  определяется деформацией кластера. Появление  $n$  "чужих" лигандов в окружении центрального иона понижает симметрию кристаллического поля  $n$ -кластера и создает  $K^{(n)} \gg K^{(0)}$ . Интегральная константа  $K_u$  рассчитывается с учетом  $n = 0$  и  $I$  для заданных распределений осей симметрии отдельных кластеров.

Детальный расчет МА систем типа (Co, Fe)-Тв с центральным F3 ионом и  $3d$ -лигандами выполняется для случая плоскости легкого намагничивания МА кластера. Величина  $K_u$  имеет факторизованный вид. Фактор усреднения осей симметрии кластера умножается на фактор, пропорциональный линейным комбинациям констант изотропного кристаллического поля и фактор, зависящий от концентраций ионов разного типа. Второй и третий факторы имеют разный вид для  $n$ -кластеров с разными  $n$ . При концентрации 0-кластеров  $N_0 \sim 10^{21}$  и их деформации  $u_h \sim 0,1$  для параметра кристаллического поля  $\sim 10^{-2}$  эв получаем вклад  $K_u^{(0)} \sim 10^6$  эрг/см<sup>3</sup>. Аналогично получаем  $K_u^{(I)} \gg K_u^{(0)}$ .

Рассчитаны спектры магненов системы  $n$ -кластеров. Энергетические цели ма. лонных ветвей определяются состояниями центрального иона в  $|Jm_T\rangle$ -представлении.

## ФОНОННІ ТА ЕЛЕКТРОННІ ЗБУДЖЕННЯ В НЕВПОРЯДКОВАНИХ СИСТЕМАХ

Вакарчук І.О., Мигаль В.М., Ткачук В.М.

Львівський державний університет ім. Івана Франка  
Драгоманова 12, Львів, 290005, Україна

З допомогою методу функцій Гріна досліджені взаємодіючі та взаємодіючі фонони і електронні збудження в структурно неупорядкованих системах зі структурою рідинного типу.

В самоузгодженому гармонічному наближенні для спектра фононних збуджень в багатокомпонентних аморфних тілах отримано рівняння, яке враховує наявність твердого кошу в потенціалі міжатомної взаємодії багаточастинкової кореляції, а також температурну залежність фононних частот і їх загасання на флуктуаціях структури [1, 2]. В двокомпонентному випадку знайдені явні вирази для частот акустичних і оптичних мод, поздовжньої і поперечної швидкостей звуку в квазікристалічному наближенні. Показано, що довгохвильові фонони є добре визначеними збудженнями. Виконані числові розрахунки залежності "частота-хвильовий вектор" для аморфних металів і двокомпонентного металевого сплаву, які відтворюють характерну поведінку фононних частот.

Отримано рівняння для енергетичного спектра одностинкових електронних збуджень і їх загасання на неоднорідностях структури, де враховує багаточастинкові кореляції іонної підсистеми. І в такому частковому підсумовуванні ряду теорії збуджень одержано інтегральне рівняння для масового оператора. Записано вирази для густини станів і функції розподілу одностинкових електронних збуджень. Досліджено вплив структурної неупорядкованості на функцію розподілу при нульовій температурі.

Розглянуті і взаємодіючі фонони та електронні збудження в однокомпонентних аморфних металах. Розраховано і конфігураційно усереднені функції Гріна фононної та електронної підсистем з врахуванням електрон-фононної взаємодії. Проведено аналіз впливу неупорядкованості на конізькі аномалії в фононному спектрі. Отримано рівняння для щільності в електронному спектрі аморфного металу при переході в надпровідний стан.

1. I.A. Vakarchuk, V.M. Myhal, V.M. Tkachuk // *phys. stat. sol. (b)*, 1991. - 166. - P. 53-67.

2. Вакарчук І.А., Мигаль В.М., Ткачук В.М. // ТМФ. 1988. 75 № 2. - С. 306-315.

## МОДЕЛЮВАННЯ НЕВПОРЯДКОВАНОЇ КОАГУЛЯЦІЙНОЇ СТРУКТУРИ

ЯРЕМКО З.М., ЯСТРЕМСЬКИЙ А.Я.

Л'вівський університет, 290006, м.Львів, вул. Драгоманова, 50, Україна

Властивості матеріалів, у технологічних процесах виготовлен. яких використовуються дисперсні системи, як показали найновіші дослідження, у значній мірі залежать від характеристик останніх. Неоднорідності коагуляційної структури дисперсних систем, її дефекти передаються готовому матеріалу і приводять до низької відтворюваності параметрів матеріалів.

У цьому повідомленні приводяться результати моделювання випадково створеної коагуляційної структури дисперсних систем. Досконалість структури оцінювали її щільністю та нерівномірністю густини дисперсної системи. В основу моделі покладено аналіз балансу поверхневих дальнодіючих сил, зокрема ван-дер-ваальсівського притягання та Іонно-електростатичного відштовхування. Показано, що щільність структури утвореної монодисперсними агрегативно-стійкими частинками залежить від дисперсності та інших параметрів системи тоді, коли проявляється вплив поверхневих сил. Для агрегативно-нестійких систем встановлена залежність між щільністю структури  $\varphi_s$  і кількістю первинних частинок у агрегаті  $n$  та щільністю упаковки частинок у них  $\varphi_0$  :

$$\varphi_s = \varphi_0 n^{-1/3}$$

Із збільшенням дисперсності системи зростає схильність частинок до утворення агрегатів, що приводить до утворення рихлих структур, які пізніше приводять до неоднорідності густини матеріалу.

Обговорюється також питання впливу середовища на характер поверхневих дальнодіючих сил та процес дезагрегації дисперсних частинок. Повна дезагрегація дисперсних частинок та їх стабілізація сприяють утворенню рівномірної коагуляційної структури.

ВЬКОРИСТАННЯ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ  
ПРИ ВИВЧЕННІ СИСТЕМ  $Tl_5Se_2Br$ ,  $Tl_5Se_2I$  І  $Tl_6S_4$ - $Tl_6Se_4$   
І.Е.Барчій, В.Ю.Переш, В.В.Цигика, О.І.Корнійчук  
Ужгородський держуніверситет

Серед складних напівпровідників найменш вивченими являються потрійні двохкатіонні сполуки, і утворюються в системах  $Tl-S(Se)-Br(I)$ . Разом з тим, двохкатіонні проміжкові фази та тверді розчини на їх основі приваблюють науковців тим, що перші поєднують у собі ціллі у практичному відношенні властивості складових бінарних халькогенідів та галогенідів, а вивчення останніх дає змогу одержувати матеріали з передбаченими характеристиками.

Поєднанням класичних методів фізико-хімічного аналізу (ДТА, РФА) і комп'ютерного моделювання досліджений характер хімічної взаємодії у системах на основі потрійних сполук  $Tl_5Se_2Br$ ,  $Tl_5Se_2I$ ,  $Tl_6S_4$ ,  $Tl_6Se_4$ , побудовані відповідні діаграми стану. Показано, що вивчені системи характеризуються наявністю неперервних рядів твердих розчинів без екстремумів. В системі  $Tl_5Se_2Br$ - $Tl_5Se_2I$  в інтервалі 20-80% зафіксовано значну область ооклоутворення. Рентгенівським дослідженням потрійних сполук і проміжкових сплавів встановлено, що сполуки  $Tl_6S_4$  і  $Tl_6Se_4$  кристалізуються в тетрагональній сингонії, пр.гр.  $P4/mic$ ,  $Z=2$  з параметрами ґратки:  $a=9,168 \pm 0,01$ ,  $c=9,594 \pm 0,03 \text{ \AA}$  і  $a=9,18 \pm 0,01$ ,  $c=9,675 \pm 0,02 \text{ \AA}$  відповідно. Сполуки  $Tl_5Se_2Br$  і  $Tl_5Se_2I$  мають тетрагональну сингонію, пр.гр.  $I4/mic$ ,  $Z=4$  з параметрами ґратки:  $a=8,608 \pm 0,009$ ,  $c=12,921 \pm 0,023 \text{ \AA}$  і  $a=8,669 \pm 0,009$ ,  $c=13,38 \pm 0,004 \text{ \AA}$ .

Використовуючи спеціальну програму для ЕОМ через калібр 10 моль% певністі ідентифіковані сплави вказаних систем, розраховані параметри кристалічних ґраток і р. Інших фізико-хімічних величин, що дає змогу вивчити динаміку їх зміни, а також знайти математичні рівняння, які описують ці зміни. На основі одержаних результатів, із врахуванням близькості структурних даних і розмірних факторів окладових компонентів висловлена думка, що в системах утворяться тверді розчини заміщення  $Tl_5Se_2Br_xI_{2-x}$  і  $Tl_6S_xSe_{4-x}I_{4-x}$ .

ДОСЛІДЖЕННЯ ПРУЖНИХ ВЛАСТЕЙ ЛЮСТЕЙ ЗЕРЕН.  
В ДЕКОРМОВАНИХ ПОЛІКРИСТАЛАХ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЇ  
ДИНАМІКИ

О.Р. Гохман, Л.І. Ревник, Р.М. Овруцька, С.Б. Магазиннік  
Одеський державний педагогічний Інститут Ім. К.Д. Ушинського

Знайдено параметри потенціала взаємодії атомів титану в кубічній та гексагональній решітці в аналізі експериментальної анізотропії пружних властивостей.

Методом молекулярної динаміки проведено машинне моделювання руху атомів у кристалах в (НТМ) ансамблі.

Компоненти тензора підатливості знаходились як середнє від флуктуацій тензора деформації. Досліджена залежність пружних властивостей кристалітів титану від тензора напруг в процесі пластичної деформації полікристалів.

Одержані результати виявились близькими значенням, знайденим в наближенні Гоббса з анізотропії модуля Юнга та Інтегральних характеристик текстури (ІХТ). Модуль Юнга визначався динамічним способом, а ІХТ – усередненням комбінацій напрямних косинусів, які задають орієнтацію кристалітів відносно системи координат полікристала.

## ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ ФРАКТАЛЬНИХ КОНФІГУРАЦІЙ ПРИ МОДЕЛЮВАННІ РУЙНУВАННЯ ГЕТЕРОГЕННИХ СИСТЕМ

Лебовка М.І., Манк В.В.

Інститут біологічної хімії Академії наук України, м.Київ

Останнім часом велика увага приділяється вивченню електричних та механічних характеристик неупорядкованих систем. В даній області широке розповсюдження одержали комп'ютерні методи вивчення явищ механічного руйнування пружних систем, пробую діелектричних систем і т.і. Зокрем, виявлено, що розгалужені конфігурації структури руйнування і пробую проявляють фрактальні властивості. В даній роботі в рамках простої детерміністичної моделі вивчено руйнування гетерогенних матеріалів в механічних і електричних полях при різних часових законах зміни зовнішніх навантажень. Неоднорідний матеріал представлений у вигляді двовірної квадратної ґратки  $N \times N$  вузлів, які зв'язані між собою пружними стержнями або при електричному руйнуванні резисторами.

Для випадку механічного руйнування величина фрактальної вимірності практично не залежить від умов руйнування і дорівнює  $D_f = 1.10 \pm 0.04$ . Перколяційні кластери руйнування, що формуються в даному випадку мають сильно анізотропну форму та усереднене значення ширини кластера до його довжини складає  $\delta = 0.18 \pm 0.10$ . Поблизу порога перколяції спостерігається скейлінгове зменшення пружного модуля системи  $G$  з показником  $\tau$  рівним  $\tau = 0.39 \pm 0.17$ .

В процесі електричного пробую геометрична структура кластерів змінюється і їх фрактальна вимірність не проявляє універсального характеру. В активній фазі пробую інтервал фрактальних вимірностей кластерів включає величину фрактальної вимірності характерної для процесів дифузійно-обмеженої агрегації (ДОА) для плоскої квадратної ґратки  $D_f = 5/3 = 1.67$ . В подальші дослідження також особливі процеси пробую при включенні анізотропного механізму руйнування неоднорідних систем. Показано, що це призводить до суттєвої залежності структури, фрактальних властивостей та кінетики пробую від параметру анізотропії напруги пробую  $\alpha$ . При деякому критичному значенні параметра  $\alpha = 2$  структура перколяційних кластерів пробую наближається до ізотропної і в даній точці спостерігається критичний перехід від від'ємної (кластери витягнуті вздовж поля) до додатньої (кластери витягнуті перпендикулярно до поля) анізотропії форми кластерів.

## КОНТИНУАЛЬНА ТЕОРІЯ ФОНОНІВ ТА ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ

### НЕВПОРЯДКОВАНИХ СИСТЕМ

Забашта П. Ф.

Київський університет ім. Тараса Шевченка

Експеримент, в якому досліджуються теплові властивості, завдяки неминучим похибкам має справу із згладженим фононним спектром, що його обрізано з боку високих і низьких частот.

Побудовано теорію, що враховує цю особливість спектра.

Розрахункова модель є континуум із комплексним пружним модулем. Нормальне коливання має форму сферичної хвилі. Обчислено радіус локалізації нормального коливання. Розраховано кратність виродження нормального коливання. Сдержано вираз для згладженого фононного спектра.

Розглянуто процес встановлення рівноважного стану в системі фононів, що протікає завдяки розсіянню фононів на неоднорідностях. Показано, що цей процес має дві стадії: кінетичну, на якій відбувається встановлення локальної рівноваги, і так звану "газодинамічну", що обумовлює теплопровідність. Встановлено, що мікроскопічним механізмом, відповідальним за обидві стадії, є броунівський рух елементарних теплових збуджень в континуумі. Елементарний акт розсіяння розглядається як зтовщення збудження із термостатом, внаслідок чого народжується новий фонон. Обмін енергією між фононами відбувається через термостат, роль якого відіграють довгохвильові коливання.

Сдержано формулу для коефіцієнта теплопровідності.

Проведено співставлення цієї формули із експериментальними даними. Аналіз експериментальних залежностей теплопровідності від температури приводить до висновку, що всі ці залежності мають одну і ту ж низькотемпературну особливість. Вона носить універсальний характер і спостерігається для будь-яких неупорядкованих систем. Континуальна теорія фононів дозволяє пояснити цей експериментальний факт.



В'ЯЗКІСТЬ МОЛЕКУЛЯРНИХ РІДИН ПРИ ТЕМПЕРАТУРІ  
ПЛАВЛЕННЯ ЗА ТЕОРІЄЮ ЕНСКОГО  
Ткаченко О.А.

Київський університет ім. Тараса Шевченка  
пр. акад. Глушкова, 6, фізичний факультет, 252127, Київ, Україна

Застосування теорії Енскога для розрахунків в'язкості і густини рідких металів при температурі плавлення виявилось настільки вдалим, що дало надію на застосування цієї теорії і для складних молекулярних рідин.

Метою роботи було застосувати підхід, розвинутий в [1] для рідин, молекули яких мають форму довгих твердих паралелепіпедів (n-парафіни) - форму тетраєдрів (наприклад, метан). За Енскогом, в'язкість при температурі плавлення можна подати (в системі CG-S) так:

$$\eta_{пл.} = 3,928 \cdot 10^{-5} (TM)^{1/2} V^{-2/3} (0,76Y + 0,8 + 1/Y)$$

де  $T$  і  $V$  - температура плавлення і молярний об'єм рідини при температурі плавлення,  $M$  - молекулярна маса,  $Y$  - функція, яка враховує зростання зіткнень молекул при переході від розрідженого газу до рідини і одночасно враховує потрібне зіткнення, вона може бути виражена через коефіцієнт пакування молекул  $\eta$ . Припускаючи, що залежність  $\eta_{пл.} V^{2/3}$  від  $\sqrt{TM}$  лінійна (подібна атомарним рідинам) ми знайшли величину  $\eta$  з кутового коефіцієнта цієї прямої. Для парафінів він становить 0,61. Це добре узгоджується з результатом 0,62, одержаним методом лінійного пакування паралелепіпедів.

Таким чином, коефіцієнт зсувної в'язкості при температурі плавлення молекулярних рідин як і атомарних рідин обумовлений механізмом зіткнення молекул, які передають імпульс. При цьому величина  $\eta$  для молекулярних рідин вища ніж для атомарних.

[1] Е.И. Тершков, В.И. Лисов, В.Е. Фетров  
Фізика жидких металлов, 1979, с.195 - 210.

ВЗАИМОСВЯЗЬ ЭЛЕКТРОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК И РАСЧЕТНЫХ ВЕЛИЧИН  
ВЯЗКОСТИ ДЛЯ РАСПЛАВОВ ПРОСТЫХ МЕТАЛЛОВ

А.И.Киселев

Институт металлургии Уральского отделения РАН  
Россия, 620219, Екатеринбург, ул.Амундсена,101

Кинетические характеристики - величины коэффициентов вязкости и диффузии - расплавов рассчитывались в предположении, что движении частиц в жидкости происходит по дрейфовому механизму с введенными Боголюбовым временными масштабами: продолжительностью столкновения и временем релаксации, имеющим порядок времени между столкновениями. Первый из них относится к большим изменениям момента движения за счет твердосферных взаимодействий. Второй к меньшим по величине и более многочисленным изменениям момента движения в тритягивательной области межчастичного взаимодействия при квазиброуновском движении частиц.

При расчете потенциалов и частичного взаимодействия использовался псевдопотенциальный формализм и результаты решения уравнения Перкуса-Иевики в приближении твердых сфер для оценки структурных характеристик расплава. В вышеприведенных предположениях вклады в кинетические характеристики расплава падают на твердосферную часть, дальнедействующую и смешанную. Отдельно был выделен электронный вклад отвечающий за перенос импульса в подсистеме свободных электронов.

При записи уравнений для вкладов в вязкость расплавов удалось аналитически разделить их на части от кулоновской части потенциала взаимодействия и остатки обусловленные эффектами ее экранирования, что позволило исходя из микроскопических характеристик электронной подсистемы непосредственно анализировать как изменение абсолютной величины вязкости при заполнении оболочек в подгруппах периодической системы, так и формирование этой величины из соответствующих вкладов.

В настоящей работе произведен расчет кинетических характеристик и прослежена их взаимосвязь с электронными свойствами для расплавов 22-х простых металлов с 1-ой по 5-тую группы периодической системы.

ФЛУКТУАЦІЙНЕ ОБМЕЖЕННЯ МІЖАТОМНОЇ КОРЕЛЯЦІЇ  
В МЕТАЛЕВИХ РОЗПЛАВАХ

Гальчак В.П., Цибух Ю.

Львівський університет, вул. Ломоносова, 8, 290005,  
Львів, Україна

При розрахунках властивостей неупорядкованих систем за допомогою кореляційних функцій питання вибору точки їх обриву з боку великих віддалей вирішується довільно. В той же час можливий критерій обмеження природно випливає із асимптотичного характеру їх затухання. Так, в реальних рідинах малі відхилення від середніх значень виникають також і внаслідок флуктуацій, завдяки яким, зокрема, броунівські частинки є взаємозалежними. Тому можна припустити, що на певній віддалі від центрального атома відхилення кількості частинок за рахунок кореляційного і флуктуаційного механізму будуть співмірними.

Кореляційні відхилення чисел атомів від середніх значень  $\Delta Z$  обчислюються шляхом інтегрування різницевих функцій радіального розподілу у сферичних поясах між точками перетину кривих із осью вою ліній. Обчислення квадратичної флуктуації числа частинок  $\Delta N^2$  проводиться в тих же поясах за різними можливими співвідношеннями загальновідомим термодинамічним для нерухомих підсистем

$$\Delta N^2 = N k T \rho \beta \tau$$

та за формулою І.З. Фішера для координаційних чисел

$$\Delta N^2 = N + \frac{g^2}{V^2} \int_{r_1}^{r_2} \int_{r_1}^{r_2} g(r) g(r') \left\{ \int_{r_1}^{r_2} [g(r'') - 1] + dt \right\} \rho r' dr' dr''$$

Обчислювалася також величина  $\Delta n = \rho \beta \tau \Delta N^2$ , бо, як встановлено в теорії похибок, у всіх випадках флуктуації вкладаються в інтервал  $\pm \Delta n$ .

Обчислення значень  $\Delta Z$ ,  $\Delta N$  та  $\Delta n$  виконувались для далеких сферичних поясів, радіуси яких вибирались в околі наперед відомого радіуса кореляції  $L$ , визначеного за півшириною експериментальних структурних факторів декількох металевих розплавів. Як і слід було чекати, отримані результати показують, що в більшості рідких металів значення  $\Delta Z$ ,  $\Delta N$  і  $\Delta n$  є співмірними на віддалях, більших за  $L$ . Значить на віддалях більших за  $L$  міжатомна кореляція приймається і поняття "ближній порядок" не має фізичного змісту.

## ДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ РІДКИХ СВИНЦЮ ТА ВІСМУТУ.

Чушак Я.

Інститут фізики конденсованих систем АН України  
Львів 290005, вул. Драгоманова 14/16

Останні часом посилюється інтерес до дослідження динамічних властивостей простих рідин. Це зумовлено тим, що експерименти по розсіяння нейтронів та розрахунки методом молекулярної динаміки виявили в динамічному структурному факторі рідких металів, таких як рибідій, цезій, свинець наявність піку при значеннях хвильового вектора до  $0.7 k_0$  (де  $k_0$  відповідає положенню головного максимуму  $S(k)$ ). З іншого боку, в неметалічних рідинах, наприклад в інертних рідинах, такий пік відсутній. Така різниця в динамічних властивостях металічних та неметалічних рідин може бути пов'язана із характером міжатомної взаємодії. В інертних рідинах потенціал парної взаємодії добре описується потенціалом Леннарда-Джонса, тоді як в рідких металах наявність електронів провідності зумовлює далекодіючий характер потенціалу взаємодії і приводить до осциляцій  $V(r)$  на великих відстанях.

В даній роботі методом функцій пам'яті досліджено динамічні властивості рідких свинцю та вісмуту. Свинець є типовим металом, а вісмут в твердому стані проявляє властивості напівметалу. Маса, густина і температура плавлення цих двох елементів є дуже близькими, але є певні відмінності в потенціалах парної взаємодії. Значено, що власна частина проміжної функції розсіяння  $F_B(k, t)$  та кореляційна функція поперечного потоку  $C_t(k, t)$  в рідкому Pb та Bi дуже подібні, т.то не залежать від форми парного потенціалу. З іншого боку, кореляційна функція поздовжнього потоку  $C_L(k, t)$ , проміжна функція розсіяння  $F(k, t)$  та динамічний структурний фактор  $S(k, \omega)$  є чутливими до виду потенціалу взаємодії. В динамічному структурному факторі рідкого Pb спостерігається додатковий пік в області малих значень хвильового вектора  $k$ , який пов'язаний із наявністю колективних збуджень. В рідкому Bi такий пік не виявлено.

РОЗРАХУНОК ВЛАСНИХ ЕНЕРГІЙ І ВЛАСНИХ ФУНКЦІЙ ЕЛЕКТРОНІВ ЛІТІЮ МЕТОДОМ ПОВНІСТЮ ОРТОГОНАЛІЗОВАНИХ ПЛОСКИХ ХВИЛЬ (ПОПХ)

Сироток С.В., Гривнак Н.Я. (а)

Львівський політехнічний інститут,

290013-Львів, вул.С.Бандери, 12. Україна.

(а) Інститут фізики конденсованих систем АН України,

290005-Львів, вул.Трагоманова, 14/16. Україна.

Дана робота присвячена розрахунку псевдопотенціала кристалічного літію з врахуванням станів серцевини. Розглядається рівняння Шредінгера

$$(T + V(\vec{r}))\Psi_{\ell\vec{k}}(\vec{r}) = E_{\ell\vec{k}}\Psi_{\ell\vec{k}}(\vec{r}), \quad (1)$$

в якому  $T$  - оператор кінетичної енергії,  $V$  - самоузгоджений потенціал кристалу,  $E$  - енергетичний спектр,  $\Psi_{\ell\vec{k}}$  - власна функція електрона в зоні  $\ell$  у точці зони Бріллюена  $\vec{k}$ .

Невідомі хвильові функції розкладаємо в ряд у базисі повністю ортогоналізованих плоских хвиль (ПОПХ) [1,2]:

$$\Psi_{\ell\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}_i} a_{\ell}(\vec{k} + \vec{g}_i) |k + \vec{g}_i\rangle + \sum_{\ell' \vec{k}'} a_{\ell\vec{k}}^{(\ell')} \phi_{\ell'\vec{k}'}^{(\ell)}(\vec{r}) \quad (2)$$

підставлення якого в (1) приводить до системи лінійних рівнянь відносно коефіцієнтів розкладу:

$$M\alpha = 0. \quad (3)$$

Матриця  $M$  складається з блоків трьох типів, а

$$\det |M| = 0 \quad (4)$$

є секулярним рівнянням в методі ПОПХ [3], яке можна зв'язувати самоузгоджено. З зв'язання секулярної задачі (4) при врахуванні в базисі станів серцевини літію дасть можливість порівняти результати обчислень з аналогічними, виконаними в межах модельного псевдопотенціалу з використанням наближення компактної внутрішньої оболонки.

Література:

1. Girardeau, M.D. *J. Mat. Phys.* 1971, v.12, p. 165.
2. Гурський В.О., Гурський З.О. Уж. - 1976, т.21, с.1603.
3. Гривнак Н.Я., Сироток С.В. Пошук електронного спектру кристалів у методі ПОПХ. - Київ, 1993. - 11с. (Препринт/АН У.ІФКС, ІФКС-93-10)

ПРО ТРЬОХЧАСТИНКОВІ ВЗАЄМОДІЇ В  
МЕТАЛІЧНОМУ ВОДНІ

Васіліу Б.В., Катм С.Д., Коваленко М.П.

Одеський політехнічний університет, проспект Шевченка, 1  
270044, Одеса, Україна

Одеський державний університет, вул.П.Великого, 2  
270100, Одеса, Україна

На основі багаточастинкового підходу в теорії металів з використанням третього порядку теорії збурень по потенціалу електрон-іонної взаємодії розраховуються потенціали взаємодії пар та трійок протонів в металічній фазі водню при значенні параметра Вігнера-Зейтца  $\gamma_s = 1,65$ , що відповідає тиску  $p = 0$ . Потенціал взаємодії пари протонів в другому порядку теорії збурень по електрон-іонній взаємодії має незначний мінімум. Врахування третього порядку теорії збурень приводить до формування мінімуму на відштовхувальній частині парного потенціалу і ще одного мінімуму на значній відстані. Параховано масив значень нередукованого потенціалу взаємодії трійки іонів  $\Phi_3^{(3)}(R_1, R_2, R_3)$  для цілих значень відстаней  $R_i$  в проміжку  $[0, 6]$ . Для малих відстаней в триплет протонів потенціал  $\Phi_3^{(3)}$  носить притягувальний характер, на великих відстанях - осцилюючий. Значення потенціалу  $\Phi_3^{(3)}(0, 0, 0)$  має величину порядку одного Рідберга. Приводяться графіки залежностей  $\Phi_3^{(3)}(R, R, R)$  для рівносторонніх триплетів;  $\Phi_3^{(3)}(1, R, R)$ ,  $\Phi_3^{(3)}(2, R, R)$ ,  $\Phi_3^{(3)}(3, R, R)$ ,  $\Phi_3^{(3)}(4, R, R)$  для рівнобедрених триплетів протонів (відстань - у радіусах Бора). Приводяться результати розрахунку сумарного потенціалу, діючого на окремий протон в полі двох інших, що знаходяться в фіксованих положеннях. Показана принципово важлива роль нередукованої трьохпротонної взаємодії для формування потенціального рельєфу, що відповідає відстаням між протонами в металічному водні порядку  $\gamma_s$ . Проаналізовано можливі прояви трьохіонних взаємодій в структурі швидко загартованих металічних систем. Обговорюється можливість утворення аморфів та осей симетрії п'ятого порядку в аморфних металічних системах при розгляді кінетичних процесів на фронті аморфізації з урахуванням трьохчастинкових взаємодій.

РОЗРАХУНОК ЕФЕКТИВНИХ МАС ЕЛЕКТРОНІВ В НАПІВПРОВІДНИКОВИХ  
КРИСТАЛАХ ТА МЕТАЛІЗОВАНИХ РОЗПЛАВАХ МЕТОДОМ ПСЕВДОПОТЕНЦІАЛУ  
Буджак Л.С., Сиротюк С.Р., Собчук І.С., Швед М.М.

Львівський політехнічний Інститут, вул. С.Бандери, 12  
290013, Львів, Україна

У даній роботі складені алгоритми і комп'ютерна програма розрахунку електронного енергетичного спектру та ефективних мас носіїв струму в кристалах напівпровідників кремнію і германію та їхніх металізованих розплавах.

Спочатку розв'язуємо систему рівнянь в базисі плоских хвиль:

$$\sum_{\vec{G}} \{ (|\vec{k} + \vec{G}'|^2 - E_{\vec{k}}) \delta_{\vec{G}, \vec{G}'} + W(\vec{G}' - \vec{G}) \} a_{\vec{G}}(\vec{k}) = 0 \quad (1)$$

у якому  $E_{\vec{k}}$  - власні енергії,  $a_{\vec{G}}(\vec{k})$  - власні вектори,  $W$  - матриця псевдопотенціалу на плоских хвилях.

Модельний псевдопотенціал  $W = W_0 + V_C + V_X$ , де  $W_0$  - йонічний III [2],  $V_C, V_X$  - екрануючі кулонівський та обмінний потенціали валентних електронів. Спектр  $E_{\vec{k}}$  знаходимо з секулярного рівняння

$$\det \{ (|\vec{k} + \vec{G}'|^2 - E_{\vec{k}}) \delta_{\vec{G}, \vec{G}'} + W(\vec{G}' - \vec{G}) \} = 0. \quad (2)$$

Далі визначаємо коефіцієнти  $a_{n\vec{G}}(\vec{k})$  для зони номер  $n$ . Тензор ефективної маси [1]

$$\left( \frac{1}{m^*} \right)_{\mu\nu} = \frac{1}{m} \left( \delta_{\mu\nu} + \sum_{\vec{G}} (K_{\mu} + G_{\mu}) \frac{\partial}{\partial K_{\nu}} |a_{\vec{G}}(\vec{k})|^2 \right) \quad (3)$$

може бути розрахований для довільної точки  $\vec{k}$  зони Бріллюєна. В роботі розраховані ефективні маси в точках екстремумів зон.

В металізованих розплавах напівпровідників  $E_{\vec{k}}$  та  $a_{\vec{G}}(\vec{k})$  обчислюються за теорією збурень і підсумовування в (3) замінюються інтегруванням.

І. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел. М., 1961. 2. *Brztoncini R., Meloni F. J. Phys. C: Sol. State Ph., 1984. V.17. P.2705.*

## ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА СПЛАВОВ В СИСТЕМЕ Fe - Si.

Гречнев Г. Е. , Ушакова Н. В.

Физико-технический институт низких температур АН Украины,  
310164 , Харьков-164, пр. Ленин., 47

Низкотемпературная фаза моносилицида железа имеет кристаллическую структуру В20 и представляет собой полупроводник со сравнительно узкой энергетической щелью (  $\sim 0.05$  э.в. ). При частичном замещении железа атомами марганца и кобальта система переходит в металлическое состояние, а начиная с некоторых критических концентраций примесей - в магнитоупорядоченное. Предпринимались попытки объяснения наблюдаемых аномальных температурных зависимостей магнитной восприимчивости FeSi и сплавов на его основе в рамках теории спиновых флуктуаций с использованием интуитивных моделей электронного спектра в окрестности щели. Эти обстоятельства и обусловили необходимость детального изучения электронной энергетической структуры металлических систем на основе Fe - Si.

Расчет плотности состояний  $n(E)$  и других характеристик электронных спектров неупорядоченных систем традиционными зонными методами сопряжен с серьезными трудностями из-за отсутствия трансляционной инвариантности. В настоящей работе вычисления проведены с помощью метода рекурсий [1], который позволяет находить плотность электронных состояний не производя расчета полной зонной структуры. Ввиду наличия щели в электронном спектре потребовалось применить нетрадиционные методы терминирования цепной дроби. При построении гамильтониана из первых принципов, в рамках локального приближения теории функционала электронной плотности, использовалась модификация метода LMTO в предельном случае сильной связи ( TB-LMTO [2]). Необходимо отметить, что предлагаемый формализм применим для вычисления плотности электронных состояний не только рассматриваемых в настоящей работе сплавов замещения, но и аморфных систем.

1. R. Haydock et. al., Solid State Physics, N.Y. Academic, 35 (1980)
2. O.K. Andersen, O. Jepsen, Phys. Rev. Lett., 53, 2571 (1984)



ДОСЛІДЖЕННЯ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ У БІНАРНИХ  
ФЛЮЇДНИХ СИСТЕМАХ. ГАУСОВЕ НАБЛИЖЕННЯ

О. Пацаган

Інститут фізики конденсованих систем АН України,  
290011 Львів, Україна

Метод колективних змінних з виділеною системою вітків [1], узагальнений в [2] на випадок великого канонічного ансамблю для багатоконпонентних систем, застосовується в [3-4] до вивчення фазових переходів у двоконпонентній суміші. Відомо [5-6], що у бінарній флюїдній суміші можуть відбуватися фазові переходи газ-рідина і розшарування в газовій і рідкій фазах. Реалізація і черговість цих явищ залежить як від зовнішніх умов (температура, тиск), так і від мікроскопічних властивостей самих компонент, які утворюють суміш (співвідношення між потенціалами взаємодії сортів  $a-a$ ,  $b-b$  і  $a-b$ ). Дана робота є продовженням досліджень, розпочатих в [3-4] і присвячена вивченню з перших принципів поведінки критичних ліній бінарної неперервної системи нейтральних частинок різних розмірів, які взаємодіють з різними попарними потенціалами  $U_{aa}(r)$ ,  $U_{bb}(r)$ , і  $U_{ab}(r)$ . Нами аналізується хід критичних кривих в площині температура - концентрація ( $T^C, x$ ) в залежності від співвідношення між мікроскопічними параметрами гамільтоніану і гутини і виділяються основні закономірності. Проблема, яка тут виникає, є озрізання на критичних кривих критичних точок газ-рідина, газ-газ і рідина-рідина розшарування. Це пов'язано з тим, що з математичної точки зору нема різниці між цими точками: вони визначаються з одного і того ж рівняння. Шляхом порівняння в площині критична температура-густина ( $T^C, \eta$ ) поведінки критичних кривих "симетричної" бінарної суміші [4] і "несиметричної" бінарної суміші на останніх виділяються області, в яких можна провести ідентифікації.

1. Охновский И.Р., Головкин М.Ф. Статистическая теория классических равновесных систем. Киев: Наукова думка, 1980.
2. Пацаган О.В., Охновский И.Р., ТМФ, 3, 72 (1990).
3. Пацаган О.В., Прінт ІФКС-92-2У, Львів, 1992.
4. Пацаган О.В., УМД, 37, 582 (1992).
5. Rowlinson J.S. Liquid and Liquid Mixtures, Butterworths, London, 1959.
6. Schneider G.M., Adv. Chem. Phys., 17, 1 (1970).

СТРУКТУРА, ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЕ И ЭНТРОПИЯ  
МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ  
Филиппов В.В.

Уральский педагогический институт, пр. Коммунаров 26  
620219, г. Екатеринбург, Россия

При аппроксимации  $m$ -компонентной системы моделью твердых сфер потенциалы межчастичного взаимодействия определяются диаметрами твердых сфер  $\sigma_1, \dots, \sigma_m$ , зависящими от состава ( $m$ -параметрическая модель твердых сфер). В более простом приближении однопараметрической модели твердых сфер (ОМТС) при описании расплавов требуется только один параметр - диаметр твердой сферы,  $\sigma$ , гипотетической однокомпонентной жидкости, также зависящий от состава раствора.

В настоящей работе в приближении ОМТС, по методике предложенной в работе [1], вычислены структурные характеристики, электросопротивление и энтропия смещения двух- и трехкомпонентных расплавов, содержащих Cd, In, Sn, Pb, Bi и другие простые металлы. Расчет электросопротивления проводили по известной формуле Фабера-Займана [2].

Полученные данные по структурным факторам, электросопротивлению и энтропии смещения двухкомпонентных систем хорошо согласуются с экспериментальными и с результатами вычислений в более сложном приближении двухпараметрической модели твердых сфер, что позволяет использовать ОМТ для расчета электрических и термодинамических свойств многокомпонентных расплавов  $s$ - и  $p$ -металлов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Филиппов В.В., Постовалов В.Г., Яценко С.П. Структура и электросопротивление многокомпонентных металлических расплавов. - Тез. докл. VII Всесоюз. конф. "Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов", 1990, т. I, ч. I, с. 104-107.
2. Faber G.E. and Ziman J.M. A theory of the electrical properties of liquid metals. III. The resistivity of binary alloys - Phil. Mag., 1965, v. 11, n. 109, p. 152-173.

ВИЗНАЧЕННЯ ПИТОМОГО ОПОРУ РІДКИХ МЕТАЛІВ В  
МЕТОДІ МОДЕЛЬНОГО ПСЕВДОПОТЕНЦІАЛУ ХЕЙНЕ - АБАРЕНКОВА.

В.І.Кушаба, Б.М.Гапчин  
Інститут фізики конденсованих систем АН УжДІ  
Львівський держуніверситет ім.Ів.Франка  
вул.Ломоносова,8,290005,Львів,Україна

Для модельного потенціалу Хейне-Абаренкова ( $\chi-A$ ) методом варіації параметра  $A$  [1] отримано вираз для флуктуаційної частини, яка відповідає кореляціям між атомами в рідкій фазі металу вище температури плавлення:

$$\delta W_{\chi-A}^0(q) = 4\pi/\Omega_0 q^2 [r R_c \cos(qR_c) - \sin(qR_c)]/q \delta A. \quad (1)$$

Частина атомного псевдопотенціалу, який відповідає усередненому за конфігураціями  $\chi-A$  записується у вигляді:

$$W_{\chi-A}^0(q) = -4\pi z/\Omega_0 q^2 [(1-\langle \lambda \rangle) R_c \cos(qR_c)/2 + \langle \lambda \rangle \sin(qR_c)/qz], \quad (2)$$

де  $\langle \lambda \rangle, R_c$  - параметри модельного псевдопотенціалу.

На основі розрахунку питомого опору чистого металу згідно формули Займана [2] і порівняння його з експериментальними значеннями знайдено параметр  $\lambda$  для температур вищих  $T_{пл}$ .

Крім того розраховано температурну залежність діаметра атома та коефіцієнта спакування системи. Проведено аналіз температурної залежності  $\lambda(T)$  для  $Cu, Mg, Zn, Al$ .

Такі розрахунки дають можливість в методі модельного потенціалу  $\chi-A$  прораховувати кінетичні коефіцієнти металів: в'язкість, термо-е.р.с і на їх основі прогнозувати температурні залежності в порівнянні з відповідними експериментальними значеннями.

#### Література

- 1.З.О.Гурський. Про один спосіб визначення кореляційної функції випадкового поля металу. Препринт ІІФ Київ.-1992 р.
- 2.Е.И.Харьков,В.И.Лысов,В.Е.Федоров.Термодинамика металлов."Выща школа". Киев.-1992 р.

## ПОСТІЙНА МАДЕЛУНГА РІДКИХ МЕТАЛІВ

Федоров В.С., Лисов В.І.

Київський університет, фізичний факультет, Київ, 252801,  
УКРАЇНА

Постійна Маделунга  $\alpha$  використовується для обчислення електростатичної енергії Евальда  $W$  твердих і рідких металів і зв'язана з останньою співвідношенням  $W = -0.5 q^2/r_0$ , де  $q$  - заряд іона,  $r_0 = (3v/4\pi)^{1/3}$ ;  $v=V/N$ . Постійна Маделунга визначається структурою металу. Її значення розраховані для більшості кристалічних структур, а також для рідких металів в наближенні твердих сфер. Для всіх розрахованих значень  $\alpha$  виконується умова  $\alpha < 1.8$ . Можна інтуїтивно припускати, що вказана нерівність виконується для будь-якої структури, але доведення цього твердження в літературі відсутнє.

Розглянемо систему точкових додатніх зарядів в околі однорідного від'ємного компенсуючого заряду. Виділимо навколо кожного з додатніх зарядів нейтралізуючі сфери (НС). Сумарний об'єм НС дорівнює  $V$ ; зв'язання об'єму системи НС буде супроводжуватись перекриттям НС, а деяка частина системи не буде належати ні одній НС, тобто вільною. Введемо позначення: А - частина НС, що не перекриваються, В - область НС, що перекриваються, С - вільна область. Область В може бути розбита на субобласті різної кратності (кратність - кількість НС, що містять дану субобласть). Очевидно, має місце співвідношення  $V = V_2 \cup V_3 \cup V_4 \dots \cup V_M$ , в якому М - максимальна кратність перекриття.

Електростатична енергія  $W$  системи може бути подана у вигляді

$$W = \frac{\epsilon_0}{2N} \int_V [\vec{E}]^2 dV - W^* = \frac{\epsilon_0}{2N} \left\{ \int_V [\vec{E}^H]^2 dV + \int_V \left[ \vec{E}^C - \sum_{k=2}^M (k-1) \vec{E}_k^B \right]^2 dV + 2 \int_V (\vec{E}^H, \vec{E}^C) dV - 2 \int_V \left( \vec{E}^H, \sum_{k=2}^M (k-1) \vec{E}_k^B \right) dV \right\} - W^*,$$

з якого після досить складних перетворень одержуємо  $\alpha = 1.8 - \delta\alpha$ ,  $\delta\alpha > 0$ , що і дає додатньо вказану умову для довільної структури.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ УИКСА-ЧАНДЛЕРА-АНДЕРСЕНА И  
МАШИННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ РАСЧЕТА СТРУКТУРНЫХ  
ХАРАКТЕРИСТИК БИНАРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ

Ерьев А. А., Дубинин Н. Э.

Институт металлургии Уральского отделения РАН,  
Россия, 620219, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101

В настоящей работе изучается возможность теоретического описания структурных характеристик бинарных жидких расплавов простых металлов. В качестве объекта исследования выбраны сплавы щелочных металлов, для которых можно достаточно точно оценить эффективные потенциалы парного межатомного взаимодействия в рамках метода псевдопотенциала. В расчетах использован локальный модельный потенциал Анимьелу-Хейне, параметры которого были определены подгонкой к свойствам твердого тела при  $T=0$ . Выбранная в работе псевдопотенциальная модель приводит к точному описанию свойств чистых металлов в твердом и жидком состояниях. Нами исследуется точность описания функций радиального распределения и структурных факторов, которые очень чувствительны к деталям поведения потенциалов парного взаимодействия. Наиболее простым является расчет в рамках модели твердых сфер. Необходимые для этого твердосферные диаметры были определены нами из вариационного метода. Более точный аналитический расчет был проведен в рамках метода Уикса-Чандлера-Андерсена, в котором учитывается отклонение реального парного потенциала от твердосферного. Полученные по аналитическим формулам структурные функции сравниваются с величинами, полученными нами с помощью метода молекулярной динамики для тех же реальных потенциалов. В расчетах была использована молекулярно-динамическая программа, разработанная Дядиным В.М. [1]. Результаты также сопоставлены с экспериментальными данными из [2]. Сделаны заключения о точности различных моделей.

Литература

1. Дядин В.М. и др. Деп. ВИНТИ № 1537-В 91, 1991, 23 с.
2. Waseda Y. The structure of non-crystalline materials. Liquids and amorphous solids, N.Y., 1980, 326 p.

## АМПЛІТУДИ МАСШТАБНОГО РІВНЯННЯ КРИВИХ СПІВІСНУВАННЯ ТА МІЖМОЛЕКУЛЯРНА ВЗАЄМОДІЯ В ПРОСТИХ РІДИНАХ

Олейнік а А.В., Шиманська О.Т., Шиманський Ю.І.

Київськ. й університет ім.Тараса Шевченка  
252127, Київ, пр.Глушкова 6, Україна

Флуктуаційна теорія фазових перетворень пояснює поведінку фізичних властивостей в околі критичної точки рідини, виходячи з визначальної ролі флуктуацій параметру порядку, які поширюються на відстані набагато більші за міжмолекулярні. Тому природа критичної поведінки і насамперед критичні індекси, що являються найголовнішими параметрами теорії, повинні бути незалежними від деталей міжмолекулярної взаємодії і однаковими для систем одного класу універсальності. Одночасно міжмолекулярна взаємодія повинна проявлятися в значеннях амплітуд масштабних законів, показниками степені в яких виступають критичні індекси або їх комбінації.

Статистичний аналіз експериментальних даних для багатьох рідин показав, що в межах похибки експериментального визначення критичних параметрів адекватний опис експериментальних даних може бути отриманий при досить різних значеннях критичних індексів і відповідних амплітуд. При цьому досить часто для них різних наборів значень індексів і амплітуд виконуються універсальні співвідношення, що випливають з масштабної теорії. В пошуках способу однозначного визначення критичних індексів і амплітуд нашу увагу привернув зв'язок критичних амплітуд з конкретними мікроскопічними і термодинамічними параметрами рідини. Цій проблемі присвячені наприклад роботи [1,2]. В роботі [2] розроблена теорія впливу на значення амплітуд трьохчастинкової дисперсії своєї взаємодії Аксельрода-Теллера, з якої, наприклад, випливають лінійні залежності амплітуд асимптотичного члену кривої співіснування  $B$ , а також лінійного і сінгулярного членів в рівнянні диаметру від добутку  $d_p \rho_c$  поларизуємості  $d_p$  і критичної густини  $\rho_c$ . В даній роботі для великої кількості рідин проведено аналіз залежностей амплітуди  $B$ , що відповідає показнику  $\beta \approx 0,35$ , від поларизуємості, дипольного моменту, коефіцієнту стисливості та ін. Зроблені висновки:

1. Рабинович В.А. и др. *Свойства по темп. звест. в-в*, 1987, т.2/84/.
2. Pestak M.W. et al. // *Phys. Rev. B* - 1987. - 36, №1. - p. 599.

МОДЕЛЬ АМОРФНОЙ ЧЕТЫРЕХКООРДИНИРОВАННОЙ ТРЕХМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ  
В РАМКАХ ЛОКАЛЬНОГО ПОДХОДА

В.В.Манжар, А.Г.Крестов, В.Д.Губа

Институт химии неводных растворов РАН, ул. Академическая 1,  
153045 г. Иваново, Россия

Хорошо известно, что принцип трансляционной (глобальной) инвариантности не пригоден для описания аморфных веществ, так как последние не обладают дальним порядком. Поэтому в основу локального подхода, который естественным образом реализуется в рамках теории расслоенных пространств [1], положен принцип локальной инвариантности. Универсальность этого принципа проявляет себя в эмпирическом факте существования ближнего порядка (БП) у кристаллических, квазикристаллических и аморфных тел.

В работе рассмотрена модель структуры аморфного тетраэдрического полупроводника. Исходя из локальных атомных конфигураций, конфигураций ближнего порядка (КБП), совокупность которых образует так называемое конфигурационное пространство ближнего порядка (КБПП), сопоставляемое с каждым атомом структуры, строится ассоциированное расслоение  $E$ :

$$E \in M^3, v^3 \times S^2, SO_0(1, 3) \ltimes (SO(3)) \rangle.$$

Здесь  $M^3$  - база  $E$ . Слой  $v$  в расслоении  $E$  совпадает с КБПП, которое имеет вид прямого произведения открытого трехмерного шара  $v^3$  и двумерной сферы  $S^2$ :  $v = v^3 \times S^2$ . Точки  $v^3$  соответствуют всем возможным деформациям, а точки  $S^2$  - ориентациям БП. Переход от одной КБП к другой осуществляется действием на  $v$  некомпактной группы  $g = SO_0(1, 3) \ltimes (SO(3))$ , являющейся полупрямым произведением связной компоненты псевдоортогональной группы  $SO_0(1, 3)$  и ортогональной группы вращений  $SO(3)$ . В работе дана классификация  $E$  в зависимости от вида  $M^3$ , т.е. от граничных условий, накладываемых на аморфный образец в  $R^3$ . Тем самым показана возможность существования полиморфных модификаций аморфного вещества.

Список литературы

1. Манжар В.В. Твердые тела с ближним порядком в рамках локального подхода, основанного на математическом аппарате теории расслоенных пространств. - Львов, 1993. - 36с. - (1. репр./АН Украины. Ин-т прикл. пробл. механики и математики им. Я.С.Подстригача; №9-93).

## РОЗПОДІЛ ГУСТИНИ В ОБМЕЖЕНІЙ СИСТЕМІ ПОБЛИЗУ КРИТИЧНОЇ ТОЧКИ

Булавін Л.А., Гавришченко Д.А., Сисоєв В.М.  
Київський Університет ім. Тараса Шевченка  
Пр. Глушкова, 6, 252027, Київ, Україна.

Для обчислення розподілу густини  $\rho(r)$  в обмежених системах було проведено мінімізацію вільної енергії. Для розрахунків профілю густини у зовнішньому полі  $\psi(r)$  звичайно враховують лише члени локального характеру, які не містять градієнтів густини. При розв'язуванні задачі по знаходженню розподілу густини у нескінченному плоскопаралельному шарі нами було використано нелокальне рівняння для хімічного потенціалу  $\mu$  вигляду

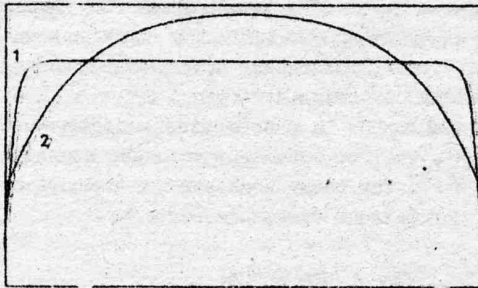
$$\mu(\rho(r)) = \psi(r) + \mu_0(\rho(r)) - b \cdot \nabla^2 \rho(r), \quad (1)$$

де  $b$  пропорційне  $R_c^2$ ,  $R_c^2$  - радіус кореляції.

Після розв'язування ізопериметричної задачі з вільними кінцями при умовах трансверсальності та ізопериметризму

$$\left. \frac{d}{dz} \rho(z) \right|_a = 0; \quad \left. \frac{d}{dz} \rho(z) \right|_b = 0; \quad \int_a^b \rho(z) dz = m; \quad (2)$$

для нескінченного плоскопаралельного шару, на стінках якого діють сили відштовхування з потенціалом  $\psi(z) = 2 \cdot b \cdot \exp(-kL) \cdot \text{ch}kz$ , одержано розв'язок рівняння (1). На малюнку зображено відповідні розподіли густини для системи, в якій  $k^{-1} = 3 \cdot 10^{-10}$  м,  $R_c^2 = 3 \cdot 10^{-8}$  м, а розмір системи становить  $10^{-6}$  м (1) та  $10^{-7}$  м (2).





ВПЛИВ БЛИЗЬКОГО ПОРЯДКУ НА КІНЕТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ  
НЕВПОРЯДКОВАНИХ СИСТЕМ.

Френчко В.С., Гапчин Б.М., Кушаба В.І.  
Львівський політехнічний інститут  
Львівський держуніверситет ім.Ів.Франка  
Інститут фізики конденсованих систем АН України  
вул.Л.Моносова 8, 290006, Львів, Україна

На основі дифракційної моделі металу в наближенні пом'ягнених сфер вивчено структуру і структурно-чутливі властивості розплавів системи Ga-Pb.

Парціальні структури  $a_{ij}(k)$  моделювалися з використанням експериментальної інформації за теплофізичними властивостями /густини, швидкості ультразвуку, ізотермічної стисливості/ для визначення параметру  $\eta$ -сплавування і  $\alpha$ -відношення діаметрів сфер.

Концентраційна залежність  $\rho(C,T)$  визначена в наближенні Займана на основі III Ашкрофта. Характерною особливістю ізотерміє те, що в області малих концентрацій Pb вони мають лінійний характер, а для сплавів з концентрацією  $>50\text{at.}\%$  Pb спостерігається відхилення від лінійності, яке характерне для експериментальних кривих розплавів багатоваєнтних металів.

На політермах  $\rho(T)$  наявні сингулярності, що відповідають умові  $a_{ij}(k)=0$  при обчисленнях і температурам кривої, що обмежує область розплавлення.

Інтерпретація повних  $\sigma_{\text{теор.}}(R)$  і  $\sigma_{\text{експ.}}(R)$  радіальних функцій проведена методом порівняння площ під першим максимумом в симетричному розділенні в наближенні різних структурних моделей.

За парціальними  $G_{ij}(R)$  визначалися координаційні числа  $z_{ij}^{\text{теор.}}$ ,  $z_{ij}^{\text{експ.}}$  і радіуси координаційних сфер  $R_{ij}^{\text{теор.}}$ ,  $R_{ij}^{\text{експ.}}$ , на основі яких можна описати структуру розплавів в модельних наближеннях.

ЗАПІЗНЮВАННЯ ВЗАЄМОДІЇ І ДИНАМІКА  
ПЛАЗМОВО-МОЛЕКУЛЯРНИХ ТА КОНДЕНСОВАНИХ  
НЕВПОРЯДКОВАНИХ СИСТЕМ

Л.Ф.Блажиевський, Г.Б.Гіль

Львівський державний університет ім.І.Франка, м.Львів

Досліджуються класичні статистичні системи взаємодіючих зарядів та атомів, що знаходяться у зовнішньому електромагнітному полі. Ефекти запізнювання взаємодії враховуються у квазістаціонарному наближенні. На основі одночасового лагранжевого підходу побудовано рівняння Ліувілля таких систем. Особливість запропонованого підходу являється опис динамічного стану лише за допомогою фізичних незалежних змінних зарядів та атомів. Знайдено мікроскопічні рівняння балансу енергії, імпульсу та моменту імпульсу для окремих атомів та системи в цілому. Показано, що у розглядуваному наближенні їх трансформаційні властивості відповідають лоренц-інваріантному динамічному опису.

Розглянуто перехід до гамільтонового формалізму. Для систем заряджених частинок такий формалізм побудовано у працях [1,2]. У даній праці розвинуто аналогічний гамільтоновий підхід для опису взаємодіючих заряджених частинок та атомів. Побудовано функції Гамільтона та розподіл Гіббса досліджуваних систем.

Проведено статистичне усереднення мікроскопічних рівнянь балансу і виразів для внутрішніх мікроскопічних полів. Отримано мікроскопічні рівняння балансу та відповідні закони збереження для енергії, імпульсу та моменту імпульсу системи. Розглянуто їх зв'язок з описом термодинамічних властивостей. Знайдено вирази для електричної та магнітної поляризації речовини у вигляді розкладу по усередненим мультипольним моментам атомів. Показано, що знайдені макроскопічні рівняння балансу узгоджуються з лоренц-інваріантністю запропонованого статистичного опису. Обговорюється застосування розглянутого підходу до рідких, аморфних, полікристалічних та плазово-молекулярних систем.

1. Блажиевський Л.Ф. Укр. фіз. журнал.-1975.- 20, №8, - С.1273-1289.
2. Блажиевський Л.Ф., Гіль Г.Б., Яншевський В.С. В сб. "Вопросы квантовой теории конденсированных сред". Кишинев: Штиинца, 1980, С. 74-83.

РІВНЯННЯ СТАНУ НЕОДНОРІДНОЇ РЕЧОВИНИ В ГРАВІТАЦІЙНОМУ  
ПОЛІ У НАВКОЛОКРИТИЧНОМУ СТАНІ УЗДОВЖ ЛІНІЇ ЕКСТРЕМУМІВ  
СПРИЯТЛИВОСТІ.

Альошин О. Д., Рудніков Є. Г.

Київський університет ім. Тараса Шевченка,  
вул. Володимирська, 64, 252017, м. Київ, Україна

Проведені експериментальні дослідження світлорозсіяння в неоднорідних індивідуальних речовинах та подвійних розчинах у гравітаційному полі поблизу критичної точки рідина-пара. Дані дослідження показали, що в області температур вище критичної при польових змінних  $h = \rho_m g \Delta z \approx \rho_c^{-1}$  інтенсивність розсіяного світла досягає свого максимального значення не при критичній температурі, а при  $T > T_c$  (тут  $\rho_c, P_c$  - критичні значення густини та тиску речовини,  $g$  - прискорення вільного падіння,  $\Delta z$  - висота, відрахована від рівня з критичною густиною речовини). Проведений аналіз цих даних показав, що уздовж виявленої лінії екстремумів спр. пливості при  $h \neq 0$  властивості неоднорідної речовини у гравітаційному полі одночасно поєднують в собі властивості рідин уздовж трьох граничних критичних напрямків - критичної калори, критичної ізотерми, границі поділу фаз. На підставі одержаних результатів досліджені польова та температурна залежності густини та спр. пливості неоднорідної речовини у гравітаційному полі уздовж даної лінії екстремумів спр. пливості

$$\Delta \rho = \rho_c t^\beta; \quad \frac{d\rho}{d\mu} = \Gamma_1 t^{-\gamma}; \quad \frac{d\rho}{d\mu} = D_1 h^{1/\delta - 1} \quad (I)$$

Виявлені чисельні значення імплітуд  $\beta, \Gamma_1, D_1$  та критичних пок. зників цих співвідношень. Одержане масштабне рівняння стану неоднорідної речовини у гравітаційному полі поблизу лінії екстремумів спр. пливості.

ПРО ЗВ'ЯЗОК ІЗОТЕРМІЧНОГО РІВНЯННЯ СТАНУ  
ТЕЙТА З ІНШИМИ МАЛОПАРАМЕТРИЧНИМИ РІВНЯННЯМИ

Бєдік В.Ю., Сисоев В.М.

Київський Університет ім.Тараса Шевченка,  
фізичний факультет  
252127, м.Київ-127, пр.Академіка Глушкова, 6

Рівняння стану Тейта адекватно описує ізотермічне стиснення газів, речовин, твердих тіл і є статистично обґрунтованим. Основним критерієм застосування є умова малої ізотермічної стисливості в досліджуваному інтервалі тисків та температур.

Відмінною особливістю рівняння стану є те, що воно приводить до лінійної залежності модуля ізотермічної стисливості- $K_T$  від  $P$ .

В даній роботі досліджувались залежності  $K_T$  від  $P$  в рамках деяких малопараметричних рівнянь стану /Ван-дер-Ваальса, Дітерічі та Бергліс'.

Рівняння Ван-дер-Ваальса призводить до таких самих якісних результатів, що і рівняння стану Тейта /лінійні залежності  $K_T$  від  $P$  в області малих ізотермічних стисливостей/.

Але значення констант, які описують лінійну залежність  $K_T$  від  $P$  декілька інші, ніж у випадку рівняння стану Тейта. Рівняння Ван-дер-Ваальса приводить до  $A^{-1} I_2+I_4$ , коли як  $PCT$  дає  $A^{-1} 7+II$ . Тобто рівняння Ван-дер-Ваальса дає декілька завищене значення модуля стисливості.

Залежність параметра  $B$  від  $T$  така ж сама, як і в рівнянні Тейта. Рівняння Дітерічі в цьому плані неадекватно описує поведінку конденсованих систем і цільного газу в області малих стисливостей.

ТЕРМОДИНАМІЧНІ І СТРУКТУРНІ ВЛАСТИВОСТІ  
ЧАСТКОВО ЗБУДЖЕНОЇ ДВОКОМПОНЕНТНОЇ СУМІШІ ГАЗІВ

О.В.Держко, Р.Р.Левіцький, О.І.Чернявський

Інститут фізики конденсованих систем АН України, м.Львів

Розглядається газова суміш двох сортів а і б дворівневих атомів, частина з яких перебуває у збуджених електронних станах - двокомпонентна частково збуджена суміш газів (ЧЗСГ) дворівневих частинок. Звичайно у ЧЗСГ рівновага щодо поступального руху частинок встановлюється при заданому (нерівноважному) стані електронної підсистеми, і ЧЗСГ володіє (у такому сенсі) рівноважними властивостями.

Узагальнюючи результати, отримані раніше в однокомпонентному випадку, у методі групових розвинень отримано великий термодинамічний потенціал  $\Omega(T, z_0^a, z_1^a, z_0^b, z_1^b, V)$  і парні просторові функції розподілу у великому канонічному ансамблі  $\mathcal{F}_2^{aa}(K_{12}; T, z_0^a, z_1^a, z_0^b, z_1^b)$ ,  $\mathcal{F}_2^{ab}(K_{12}; T, z_0^a, z_1^a, z_0^b, z_1^b)$ ,  $\mathcal{F}_2^{bb}(K_{12}; T, z_0^a, z_1^a, z_0^b, z_1^b)$  для ЧЗСГ з врахуванням внесків від одно-, дво- і тричастинкових груп (тут  $z_0^a$  - активність частинок сорту а в основному стані і т.д.). Це дозволяє отримати другий і третій віртуальні коефіцієнти у рівнянні стану та дво- і тричастинкові внески у розвиненні за степенями густини звичайно використовуваних парних просторових функцій розподілу у канонічному ансамблі [1,2]. У знайдених рівноважних властивостях істотними є внески від резонансних ефективних міжчастинкових взаємодій, що виникають у групах тотожних різнозбуджених атомів.

1. Діхновський І.Р., Держко О.В., Чернявський О.І., Левіцький Р.Р. Рівноважні властивості двокомпонентної суміші газів, що містить частинки у збуджених електронних станах, у методі групових розвинень. I. Термодинамічні властивості. - Препринт ІТФ-90-83У, Київ, 1991, 48 с.
2. Діхновський І.Р., Держко О.В., Чернявський О.І., Левіцький Р.Р. Рівноважні властивості двокомпонентної суміші газів, що містить частинки у збуджених електронних станах, у методі групових розвинень. II. Структурні властивості. - Препринт ІФКС-93-У, Львів, 1993, с.

ПРОФИЛИ ПЛОТНОСТИ В ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ Х МЕДИ, ЗОЛОТА И ГЕРМАНИЯ

Спиридонов М.А., Лавров А.В.

Уральский государственный технический университет-УПИ

620002, Екатеринбург, Российская Федерация

В своих исследованиях Я.И. Дутчак большое внимание уделял раскрытию особенностей межчастичного взаимодействия в металлических расплавах дифракционными методами [1]. В настоящем сообщении представлены ультратонкографические изучения структуры ближнего порядка скользящим по экваториальной поверхности массивных капелек меди, золота и германия [2] пучком применены для расчета профилей плотности вблизи межфазной границы.

Структурные факторы поверхностных слоев использовали для вычисления прямых корреляционных функций, необходимых для расчета в гиперсетевом приближении эффективных потенциалов межчастичного взаимодействия, и для полислойной модели определяли профили плотности  $\rho_1(z)$  по нормали  $z$  к поверхности:

$$\rho_1(z) = \rho_0 \exp \left\{ - \frac{4\pi}{3k_B T} \sum_{i=1}^3 \rho_i \int_{-z}^z \int_0^r A_i(z) \Delta \varphi_i(r) \varrho(r) r^3 dr dz \right\},$$

в котором  $A_i(z) = A_i \exp(-b_i z^2)$ ;  $A_i$  - высота  $i$ -го пика;  $b_i$  - его дисперсия;  $\rho_i$  - слоевая плотность.

Рассчитанные с учетом сделанных приближений профили плотности в переходной области от расплава к пару уменьшаются немонотонно, имея локальные максимумы на ниспадающей ветви.

1. Дутчак Я.И. Рентгенография жидких металлов. Львов: Вища школа, 1977. 163 с.

2. Лавров А.В., Поцель С.И., Спиридонов М.А. Атомное упорядочение в поверхностных слоях жидких металлов: меди, золота и германия // Расплавы. - 1991. - Т. 5. - № 6. - С. 16-21.

АПРІОРНІ  $SOPW$ -ПСЕВДОПОТЕНЦІАЛИ КРИСТАЛІВ ТА РОЗПЛАВІВ  
НАПІВПРОВІДНИКІВ

Сиротюк С.В., Кинеш Ю.С., Швед М.М., Собчук І.С.

Львівський політехнічний інститут, вул.С.Бандери,12  
290013, Львів, Україна

Рівняння Шредінгера для кристалу розв'язуємо в базисі повністю ортогоналізованих плоских хвиль ПОПХ [1], який складається з  $SOPW$ -функцій та ортогоналізованих сул Блоха  $|t\vec{k}\rangle$ , де  $t = \{1s^2\}$  для алмазу,  $t = \{1s^2 2s^2 2p^2\}$  для кремнію,  $t = \{1s^2 2s^2 2p^2 3s^2 3p^2 3d^2\}$  для германію.

Секулярне рівняння має такий вигляд [2]

$$\begin{vmatrix} H_{\varphi\varphi} - E \delta_{\varphi\varphi} & H_{\vec{k}\varphi} \\ H_{\varphi\vec{k}} & H_{\vec{k}\vec{k}} - E \delta_{\vec{k}\vec{k}} \end{vmatrix} = 0. \quad (1)$$

Псевдопотенціал  $W$  визначається з блоку

$$H_{\vec{k}\vec{k}} = \langle \vec{k} + \vec{G} | L^+ H L | \vec{k} + \vec{G} \rangle = T + W, \quad (2)$$

де  $L$  - лінійний унітарний оператор, результатом дії якого на плоскі хвилі є ПОПХ [3].

Матричні елементи гамільтоніана обчислюються на германіанх аналітично.

Для розплавів обчислюються матричні елементи  $\langle \vec{k} + \vec{q} | W | \vec{k} + \vec{q} \rangle$ , де  $\vec{q}$  - неперервний імпульз розсіювання.

1. Гурський В.О., Гурський З.О. УФЖ, 1976, т.21 (І603).

2. Гривнак Н.Я., Сиротюк С.В. Препринт АН України. ІЖС-93-6У. Київ. 1993. - II с.

3. Ганн В.В., Походящий В.И. УФЖ. 1968, т.23 (І407).

## НАВЕДЕНИЕ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ В АМОРФНЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЛЕНКАХ

Мицек А.И., Пушкарь В.Н.

Институт металлофизики АН Украины, Киев, 252142  
пр. Вернадского 36, Украина

Магнитная анизотропия (МА) аморфных пленок  $3d-(4f)$ -сплавов навводится как в процессе получения образца, так и в результате термо- или упруго-магнитной обработки. Для сравнения теории с экспериментом следует либо проводить эксперимент без существенного изменения ближнего порядка, либо при контролируемом изменении структуры образцов.

Теория наведения интегральной МА строится в рамках одноионного механизма. Электронная микроскопия аморфных пленок  $Fe_2Si$  с очень слабым *zitter* ("струями") локальной намагниченности обнаруживает микроструктуру масштабом  $\lesssim 3$  нм [1]. Менее однородные пленки других составов также обнаруживают ближний порядок с масштабом  $\sim 1$  нм. Это позволяет в качестве единиц локальной МА рассматривать плотноупакованные кластеры. Структурную единицу аморфной пленки типа  $Tb-Co$  берем в форме ГЦК кластера, состоящего из центрального сильноанизотропного  $4f$ -иона и  $3d$ -лигандов. Появление в лигандном окружении другого  $4f$ -иона или немагнитного "чужого" лиганда нарушает симметрию окружения. Изменение локальной МА (кластера) рассматриваем как его деформацию во внешнем упругом поле, либо как перемещение лигандов по периферии кластера. В случае одинаковых лигандов окружения  $4f$ -иона ( $O$ -кластер) появляется выделенное направление деформации  $\vec{U}$ , вдоль которого навводится МА.

Наличие "чужих" лигандов (для  $n$ -кластеров) приводит к перескоковому механизму наведения МА. Рассчитанное время релаксации кинетики наведения МА  $\tau$  ( $T, H$ ) вдоль насыщающего магнитного поля  $\vec{H}$  зависит от энергии активации  $\mathcal{U}$  перескока лиганда. В линейном по времени наведения МА  $t$  приближении находим функциональную зависимость  $\tau$  от распределения осей симметрии  $I$ -кластеров и от разностей параметров анизотропного кристаллического поля  $I$ -кластера согласно общей теории [2].

1. А.А. Лесник, В.Н. Пушкарь и др. Металлофизика 8, 128, 1986.

2. А.И. Мицек. Фазовые переходы в кристаллах с магнитной структурой. Киев, Наумова думка, 1989.



ТЕРМ. ДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ І ЕЛІКСАЦІЙНА ДИНАМІКА  
НЕПОРЯДКОВАНОЇ МОДЕЛІ ІЗІНГА.

Левинський Р.Р., Сороков С.І., Соколовський Р.О.  
Інститут фізики конденсованих систем АН України  
Львів 290011, пл. Свянцицького 1

У наближенні двочастинкового кластера виявляються термодинамічні і динамічні властивості неупорядкованої ізінгівської системи ( $m$ -компонентного сплаву за іщення). На простій ґратці довільної розмірності у статичному випадку розглянуто системи з рівноважним і нерівноважним безладом (рухомі і нерухомі атоми [1]). Узагальнюючи метод, розвинений у роботі [2], на випадок неупорядкованої системи, розраховано її термодинамічні характеристики, а також парні і тернарні кореляційні функції (КФ). У випадку одновимірної системи при відсутності зовнішнього поля одержані нам термодинамічні характеристики і парні КФ співпадають з відомими точними результатами [1,3].

На основі глауберівського рівняння для уварної функції розподілу  $\langle \langle S_{1a}^z \rangle \rangle_x(t)$  в рамках кластерного наближення розраховано динамічну кореляційну функцію

$$\chi_{\alpha\beta}(q, \omega) = (\langle \langle S_{1a}^z(t) \cdot S_{j\beta}^z \rangle \rangle_x - \langle \langle S_{1a}^z \rangle \rangle_x \cdot \langle \langle S_{j\beta}^z \rangle \rangle_x)(q, \omega)$$

(тут  $\alpha, \beta = 1..m$ ; а  $\langle \dots \rangle_x$  означає усереднення по атомних конфігураціях) для випадку нерівноважного безладу. Завдяки кластерним ефектам число полюсів  $\chi_{\alpha\beta}(q, \omega)$  в комплексній  $\omega$ -площині перевищує число сортів  $m$ , в той час як у наближенні молекулярного поля  $K=m$ . Проведено детальний числовий аналіз одержаних результатів.

1. Вакс В.Г., Зейн Н.Е. Журн. експ. и теор. физ. -1974. -7, N9. -С.1082-1100.
2. Левинський Р.Р., Сороков С... Кіев, 1986. (Препринт/АН УССР. Ін-т теор. физ.; ИТФ-86-142R..)
3. Балагуров В.Я., Вакс В.Г., Зайцев Г.О. Фізика твердого тела -1974 -16, вып.8 - С.2302-2309.

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ФОРМУВАННЯ АМОРФНОЇ  
СТРУКТУРИ В МЕТАЛЕВИХ ПОРС КАХ

Мірошніченко Л.С., Балук З.В., Брехаря Г.П., Аніщенко Т.І.  
Дніпропетровський університет, пр.Гагаріна, 72  
320625, Дніпропетровськ, Україна

В роботі використана кінетична модель формування аморфної структури в металевих порошках при значних швидкостях охолодження. Моделювання процесів, які відбуваються в металах при охолодженні, ґрунтується на розв'язанні рівняння Колмогорова. Використовується як стаціонарна так і нестаціонарна частота зародження кристалів.

На прикладі структур, які формуються в порошках нікеля, показано, що при збільшенні швидкості охолодження структура порошків змінюється від монокристалічної до полікристалічної, а потім до аморфної. Перехід від кристалічної структури до аморфної здійснюється поступово.

При деяких скоростях охолодження і розмірах порошків доля закристилізованої фази складас менше  $10^{-6}$  (рентгенівсько-аморфна структура), в той час як кількість кристалів може досягати  $10^6$  і більше. Таким чином утворюється аморфна структура з "замороженими" кристалами.

Оскільки кількість цих кристалів залежить від умов охолодження, то сталість аморфної структури залежить від умов одержання цих сплавів. Кристалізація аморфної структури може починатися з росту "заморожених" кристалів, при менших температурах, чим при гомогенному утворенні кристалів в аморфній матриці.

## КРИТЕРІЇ ЗАСТОСУВАННЯ РЕШІТОЧНИХ ТЕОРІЙ РІДКОГО СТАНУ

Адаменко І.І., Еугенів Л.А., Сисоєв В.М.

Київський університет імені Тараса Шевченка  
пр.акад.Глушкова 6, фізичний факультет, 252127 Київ, Україна

В роботі отримані критерії застосування решітчастих теорій рідкого стану виходячи з умов малості середньої квадратичної флуктуації числа частинок  $N$ , створюваних середнє поле, або об'єму  $V$ , в якому вони містяться.

Показано, що критерії застосування решітчастих теорій можна представити у формі, подібній до критерія Гінзбурга-Леванька

$$t f_1(t, \rho_0) \sqrt{G_i} \ll 1 \quad /1/$$

де  $G_i$  - число Гінзбурга, яке визначається співвідношенням  $G_i = \sigma^6 / R_0^6$ , де  $\sigma$  та  $R_0$  - радіуси дії коротко- та дальнодіючих сил.

Для потенціальної моделі твердих корів критерій /1/ має виг-

$$\sqrt{G_i} / q_2(z = \sigma, T, \rho_0) \ll 1 \quad /2/$$

ляд /2/, де  $q_2(z = \sigma)$  - контактне значення бінарної кореляційної функції, з якого випливає наявність вимоги квазікристалічності рідини. Умова /1/ може бути реалізована якщо

$$G_i \ll 1 \quad /3/, \text{ або } t f_1(t, \rho_0) \ll 1 /4/$$

Нерівності /3/ та /4/ можна розглядати як молекулярний та термодинамічний критерії застосування решітчастих теорій, при цьому умову /4/ можна переписати у формі /5/, до якої входять фізичні властивості, які можуть бути визначені експериментально:

$$RTU / Mc^2 N \ll 1 \quad /5/$$

В роботі показано, що для групи рідин з подібною молекулярною будовою решітчасті теорії більш адекватно описують термодинамічні властивості тих рідин, молекулярна маса яких більша.

ФЕРРОМАГНІТНЕ ВПОРЯДКУВАННЯ В МОДЕЛІ РОЗВЕДЕНОГО МАГНІТИКА  
ПРИ ДОВІЛЕННІ ВИМІРНОСТІ ПРОСТОРУ

Юрій ГОЛОВАЧ

(Інститут Фізики конденсованих систем А. України, Львів, 290011)

Досліджується фазовий перехід у магніто-впорядкований стан у системі класичні  $n$ -компонентних спінів  $S = (S^1, S^2, \dots, S^m)$ , локалізованих на вузлах  $(i, j)$   $d$ -вимірної ґратки з гамільтоніаном:

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} c_i c_j S_i S_j, \quad (1)$$

тут  $J_{ij}$  - трансляційно-інваріантна взаємодія,  $c_i$  - випадкова змінна.

Для "замороженого" безпорядку універсальні характеристики такої моди і в околі точки фазового переходу другого роду можуть бути проаналізовані в термінах Евклідової теорії поля з лагранжіаном:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\Phi) = \int d^d R \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \left[ (\nabla \Phi^{\alpha 2})^2 + m_0^2 |\Phi^{\alpha 2}|^2 \right] + \right. \\ \left. + \frac{u_0}{4!} \left[ \sum_{\alpha=1}^n |\Phi^{\alpha 2}|^2 \right]^2 + \frac{v_0}{4!} \sum_{\alpha=1}^n |\Phi^{\alpha 4}| \right\}, \quad (2) \end{aligned}$$

тут  $\Phi^{\alpha 2} = \Phi^{\alpha 2}(R)$  - векторне поле:  $\Phi^{\alpha 2} = (\phi^1, \phi^2, \dots, \phi^m)$ ,  $\alpha$  - реплічний індекс, маса  $m_0^2$  а лінійною функцією температури,  $u_0$  і  $v_0$  - константи зв'язку ( $u_0 < 0$ ,  $v_0 > 0$ ).

Для аналізу критичних властивостей (2) рівняння Каллана - Сіа нічка розглядаються безпосередньо для довільного  $d$  [1]. У трипетельовому наближенні обчислено критичні показники фазового переходу у ферромагнітний стан як функції  $d$  і  $m$  [2]. Результати роз'явннків підтверджують евристичний критерій Харріса [3], згідно з яким критичні показники "чистого"  $n$ -векторного магнетика не змінюються при слабкому розведенні немагнітних компонентів, якщо критичний показник питомої теплоємності  $\alpha_{\text{pure}} > 0$  в від'ємним. Якщо ж  $\alpha_{\text{pure}} < 0$ , то слабе розведення спричиняє зміну критичних показників.

1. Yu. Holovatch, M.L. Pot, J.Stat.Phys. 65 (1992) 847.

2. Yu. Holovatch, T. Krokmal's'kii, Preprint ICMP-92-3E, Lviv, 1992.

3. A.V. Harris, J. Phys.C, 7 (1974) 1671.

КОМПЬЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ ТА ФІЗИЧНИХ  
ВЛАСТИВОСТЕЙ АМОРФНОГО КРЕМНІЯ

Грехов А.М.

Київський технологічний інститут харчової промисловості,  
вул.Володимирська 68,252017,Київ,Україна

В теорії твердих некристалічних (аморфних) речовин зараз послідовно розвивається модель м'яких трьохцентрових зв'язків як мікр.копічний фундамент утворення некристалічних матеріалів.В доповіді повідомляється про теоретичне дослідження важливих питань,пов'язаних з трьохцентровими зв'язку ми.Розраховані рівноважні міжатомні відстані трьохцентрових зв'язків,які містять лігуючі домішки; вивчений перерозподіл електричного заряду вдовж зв'язку з врахуванням оптимізації геометричних параметрів зв'язку; знайдені теплоти утворення комплексів,які містять трьохцентрові зв'язки; визначені дипольні та квадрупольні моменти комплексів з трьохцентровими зв'язками; розраховані електронні структури трьохцентрових зв'язків,які містять лігуючі домішки; розраховані частоти коливань відповідних комплексів атомів.

Трьохцентровий зв'язок моделюється кластером  $[H_3SiHSiH_3]$ ,відомим в літературі як  $T^0$ -система.Електронна структура розрахована з використанням полуемпіричного квантовохімічного метода AM1 для відкритих оболонок.В процесі розрахунків оптимізувалися всі геометричні параметри кластера. Розглянуті також інші кластери:  $[H_3BiHSiH_3]$ ,  $[H_3OHSiH_3]$ ,  $[H_3NHHSiH_3]$ ,  $[H_3PHSiH_3]$ ,  $[H_3SiFSiH_3]$ . Поява трьохцентрових зв'язків Si-H-Si, C-H-Si, Si-F-Si призводить до появи однократно заповненого рівня,який лежить вище останнього заповненого рівня кластера  $[Si_2^{+6}]$ .Введення більш легких,ніж кремній,атомів призводить до появи високочастотних коливань C-H,N-H зв'язків.

СРАВНЕНИЕ ТОЧНОСТИ РАЗЛИЧНЫХ МЕТОДОВ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ  
ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ ПРИ РАСЧЕТАХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ  
БИНАРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ

Дубинин Н.Э., Юрьев А.А., Ватолин Н.А.

Институт металлургии Уральского отделения РАН  
Россия, 620219, Екатеринбург, Амундсена, 101

Термодинамическая теория возмущений (ТТВ) в сочетании с методом псевдопотенциала зарекомендовала себя как достаточно точный инструмент расчета различных характеристик жидких металлов и их сплавов. До недавнего времени наиболее широко в подобных расчетах использовался вариационный метод ТТВ. Более совершенный с точки зрения выбора системы сравнения метод Уикса-Чандлера-Андерсона (wca) применялся ранее для исследования термодинамики чистых жидких металлов (1) и структур ряда бинарных расплавов (2). В (1) было проведено сравнение полученных результатов с результатами расчета другими методами ТТВ и выявлено преимущество метода wca. Для расчета термодинамических свойств многокомпонентных металлических расплавов wca-метод ранее не использовался. Таким образом, целью настоящей работы является применение данного метода к изучению термодинамики двойных металлических расплавов и сравнение полученных результатов с результатами, полученными вариационным методом, и имеющимися экспериментальными данными.

Для исследования нами были выбраны расплавы щелочных металлов и система  $Li-Mg$  вблизи температуры плавления. В расчетах использовался модельный псевдопотенциал Анималу-Хейне. Полученные концентрационные зависимости свободной энергии смешения, теплоты смешения и избыточной энтропии показывают, что wca-метод позволяет получать более точные результаты, нежели вариационный.

Литература

1. Bratkovsky A.M., Vaks V.G., Trefilov A.V. - J.Phys.F: Metal Phys., 1987, vol.13, p.2317-2342.
2. Ng D.A., Slibert M. - Z.Phys.Chem., Bd.156, p.663-669.

РАСЧЕТ СДВИГОВ НАЙТА В СПЛАВАХ ПРОСТЫХ МЕТАЛЛОВ  
МЕТОДОМ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА

Болотникова Н.А., Бескачко В.П.

Челябинский государственный технический университет,  
пр. Ленина 76, 454080, Челябинск, Россия

Сдвиг Найта ( $SN$ ) является одной из немногих наблюдаемых в эксперименте характеристик, позволяющей непосредственно судить об изменениях в электронной структуре металлических систем, происходящих вследствие изменения их термодинамического состояния. Еще на стадии становления метода псевдопотенциала (ПП) были предложены схемы расчета электронной плотности на ядре (контактной плотности - (КП)), которая вместе с паулиевской магнитной восприимчивостью непосредственно и определяет наблюдаемую величину СН. В настоящее время известно, что в случае чистых металлов для расчета КП существует учет нелокальной природы ПП (G.A.Styles, G.Tranfield, 1978), а в случае сплавов расчеты выполнены только для щелочных металлов с использованием простейшей формы ПП - ПП Ашкрофта (J.P. Perdew, J.W. Wilkins, 1972). Далее систематических исследований КП в рамках метода ПП не предпринималось. Нами выполнены следующие расчеты:

1. Для семейства локальных модельных ПП выяснена роль выбора их параметров в определении КП для чистых металлов. Неопределенность в задании этих параметров, связанная с подгонкой под различные экспериментальные данные, оказалась в большинстве случаев слишком велика для надежной оценки КП и СН.

2. Для чистых металлов выяснено, как изменяется предсказываемая величина КП в зависимости от выбора функций и параметров ПП внутри семейства нелокальных модельных ПП. Сравнением результатов расчетов в полной нелокальной теории и в локальном приближении установлена роль нелокальности для разных представителей этого семейства.

3. Выполнена оценка КП в чистых металлах с помощью априорного OPW-псевдопотенциала, изучена роль эффектов нелокальности и выбора основных волновых функций, являющихся исходными данными метода.

4. В локальном приближении с использованием модельных ПП выполнены расчеты концентрационной зависимости КП для сплавов с различной степенью отклонения от идеальности. Сделана попытка учесть в схеме расчетов КП и эффекты нелокальности.

## БІНАРНА ФУНКЦІЯ РОЗПОДІЛУ ЗАРЯДЖЕНИХ ЧАСТИНОК

Возняк О.М., Костробий П.П.

Прикарпатський університет, вул.Шевченка, 57  
284000, Івано-Франківськ, Україна

Більшість відомих методів розрахунку функцій розподілу приводять до того, що позитивна за визначенням величина  $F_2(z)$  стає від'ємною при малих відстанях між частинками. Застосування ж методу функціонального інтегрування до їх розрахунку приводить до експоненціальної форми, яка не допускає нефізичної поведінки при  $z \rightarrow 0$ .

В роботі одержано вираз для бінарної функції розподілу для односортової системи заряджених частинок з кулонівською міжчастинковою взаємодією. Частинки другого сорту, що забезпечують електронейтральність системи вважаються рівномірно розподіленими.

Бінарна форма для функції розподілу має вигляд

$$F_2(z) = F_2^{id}(z) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{q_1} g(q_1) W_{z_1}^{(2)}(q_1) W_{z_1}^{(2)}(z_1) \right\}.$$

Бінарний кулонівський потенціал  $g(q)$  і коефіцієнти розкладу в зумовлений ряд  $W_{z_1}^{(2)}$  виражаються через функції Гріна ідеальної системи

$$G_P^0(v) = \frac{1}{v + \epsilon_{P-1}}.$$

$$g(q) = \frac{q v_q}{1 - q v_q \sum_P G_P^0(v) G_{P+q}^0(v+q)},$$

$$W_{z_1}^{(2)} = \frac{1}{\beta^2} \sum_{P, q_1, v_1} G_P^0(v_1) G_{P+q_1}^0(v-v_1) \left[ \int_{P-q_1} + \int_{P+q_1} \right] e^{i[q_1 \bar{R}_1 - (q+q_1) \bar{R}_2]}.$$

В цих виразах

$$f_P = [q(\epsilon_P - 1) + 1]^{-1} - \text{Фермієвська функція розподілу, а}$$

$$v_q = \frac{4\pi e^2}{qz} - \text{образ кулонівського потенціалу.}$$

Проведено аналіз одержаного виразу для системи клонівних частинок.



ЗСУВ СПІНОДАЛІ РІДКОГО ДВОСОРТНОГО МАГНІТИКА  
ПІД ДІЄЮ ЗОВНІШНЬОГО МАГНІТНОГО ПОЛЯ

Вакарчук І.О. Львівський державний університет  
Марголич І.Ф. ІФКС АН України

Досліджується вплив зовнішнього магнітного поля і обмінних взаємодій між атомами двокомпонентного рідкого магнетика на зсув спінодалі. Магнітні взаємодії в системі описуються за допомогою ефективного гамільтоніану Гейзерберга. Було розраховано [1] вираз для повного структурного фактору двокомпонентного рідкого магнетика. У цьому виразі враховано вплив магнітних взаємодій на структуру рідини. Враховуючи добре відоме співвідношення між структурним фактором рідини та ізотермічною стисливістю і прирівнюючи знаменник функції  $S^{(n)}$  до нуля, було отримано рівняння для точок спінодалі дво сортної рідини магнітних атомів. На основі цього рівняння ми розраховуємо зсув температур точок спінодалі під впливом сильного зовнішнього магнітного поля. У випадку, коли обмінні взаємодії між атомами одного сорту є "ферромагнітними"  $J_0^{11}$ ,  $J_0^{22} > 0$  і  $\det \hat{J}_0 = 0$ , зсув спінодалі під впливом сильного зовнішнього магнітного поля вирається таким чином:

$$\Delta T_c = \rho c_1 c_2 (S_1 \sqrt{J_0^{11}} \pm S_2 \sqrt{J_0^{22}})^2 + \rho S^{HS}(v) \times \\ \times (c_1 S_1 \sqrt{J_0^{11}} \pm c_2 S_2 \sqrt{J_0^{22}})^2,$$

де  $c_a$  - концентрація атомів сорту  $a$ ,  $\rho$  - густина магнітних атомів,  $S_a$  - величина спіну атому сорту  $a$ ,  $S^{HS}(0)$  - структурний фактор, сфокусований сильною відштовхувальною конфігураційною взаємодією на малих відстанях. У цьому виразі верхній знак відповідає додатньому характеру обмінних взаємодій між атомами різних сортів  $J_0^{12} > 0$ , а нижній - від'ємному  $J_0^{12} < 0$ .

Таким чином, під впливом сильного зовнішнього магнітного поля точки спінодалі дво сортної рідини магнітних атомів зсуваються в область вищих температур, коли обмінні взаємодії між односортовими атомами є додатні, незалежно від характеру обмінних взаємодій між атомами різних сортів.

1. Вакарчук І.О., Марголич І.Ф. // УФЖ.- 1991, т.36,18.- с.1174-1179.

## ЕЛЕКТРОННА СТРУКТУРА І ВПОРЯДКОВАНИХ СИСТЕМ В УЯВЛЕННЯХ РЕАЛЬНОГО ПРОСТОРУ

В. І. Соколенко, Д. М. Моїсєєв, О. І. Соколенко

Одеський державний педагогічний інститут ім. К. Д. Ушинського

Одним з основних питань, виникаючих при дослідженні неупорядкованих систем, є в'ясування особливостей енергетичного спектра електронів. Експериментально доведено, що у неупорядкованому стані зонний характер спектра електронів зберігається, але розмиваються краї дозволених зон, таке тонка структура. Модельно це уявляється виникненням локальних рівнів з безперервним їх розподілом усередині недозволеної зони та густиною, спадальною від країв дозволених зон. Експериментальні дослідження дають неоднозначні результати, що приводить часто до різних інтерпретацій у різних модельних уявленнях.

В даній роботі розглянуто модельно уявлення реальної зонної структури та її трансформація при переході від упорядкованого до неупорядкованого стану, що відповідає загальній особливості як електронних переходів, так і ряду спектروفізичних властивостей і має експериментальне підтвердження. Такою загальною особливістю для упорядкованого стану є елементи симетрії кристала, відносно яких електрофізичні властивості інваріантні, а також для неупорядкованого стану зонний характер спектра, що потребує наявності властивостей симетрії та інваріантності відносно механізму формування енергетичного спектра.

Механізм формування зонної структури у неупорядкованих системах пов'язаний із структурою взаємодій і теплових коливань, статистичний характер яких повторює структуру атомного розподілу у кристалах, яку можна уявити правильними системами точок, розподілених відповідно гаусовим законам. Показано, що у розподіленні електронної густини з неупорядкованістю відбувається розщеплення полів, що корелює з розщепленням координаційних сфер. Зонна структура трансформується в сторону структури безперервних розподілів, в якій зберігається "неупорядковані" міжзонні переходи. Це відображається у рентгенівських спектрах у вигляді танення тонкої структури та розмазування короткохвильових стелитів.

## ЕЛЕКТРОН-ІОННИЙ ПСЕВДОПОТЕНЦІАЛ РІДКОЗЕМЕЛЬНИХ МЕТАЛІВ

Якібчук П.М., Вакарчук С.О., Фурман В.В., Жовтанецький М.І.

Львівський державний університет ім. Івана Франка

6.

Пропонується модельний псевдопотенціал рідкоземельних металів у вигляді [1]:

$$\tilde{W}(r) = \tilde{W}^{ion}(r) + W_{дод} + W_{рез} + V_{вал}(r) + \delta V_I(r) \quad (1)$$

Перший доданок в (1) - це повний іонний псевдопотенціал, другий виникає внаслідок відхилення потенціалу кристалу  $V(r)$  від потенціалу ізолюваного іона  $v^{ion}(r)$  на величину  $\delta V = v^{ion}(r) - V(r)$

$$W_{дод} = \sum_f \left[ |f\rangle \langle f| \Delta + \Delta |f\rangle \langle f| \right] \quad (2)$$

тут:  $|f\rangle$  - хвильова функція  $f$ -стану, оператор  $\Delta$  задається виразом

$$\Delta |f\rangle = \delta V |f\rangle - |f\rangle \langle f| \delta V |f\rangle$$

Якщо взяти відхилення потенціалу кристалу від потенціалу ізолюваного іона  $\delta V$  сферично-симетричним  $\delta V(r) = \delta V(r)$ , то резонансний потенціал можна записати:

$$W_{рез} = \sum_f \frac{\Delta |f\rangle \langle f| \Delta}{\Gamma(k)} \quad (3)$$

$$\text{де } \Gamma(k) = 1/2 \left[ A_{k,k} \pm \sqrt{A_{k,k}^2 + 4B_{k,k}} \right] ,$$

$$\text{а } A_{k,k} = 1/2 k^2 + \langle k|W|k\rangle - E_f \quad \text{і} \quad B_{k,k} = \sum_f \langle k|\Delta |f\rangle \langle f|\Delta |k\rangle .$$

Для розрахунку потенціалу, що створюється і-лентними електронами розраховувалась густина згяду валентних електронів і з допомогою рівняння Пуассона визначався потенціал валентних електронів [1]. Аналогічно визначався Фур'є образ потенціалу  $\delta V_I(r)$ , обумовлений відхиленням густини і електронів в кристалі відносно ізолюваного іона.

Запропонована схема розрахунку формфакторів модельного псевдопотенціалу та врахування екранування.

1. П.М. Якібчук, С.А. Вакарчук, В.В. Фурман, М.І. Моторняк, Модельний псевдопотенціал рідкоземельних металів, Київ, 1987, 12 с. (Препринт Ін-та теор. фізики АН УРСР, 87-182 P)

## ЗАЛЕЖНІСТЬ КОЕФІЦІЄНТА ПОРЧХНЕГО НАТЯГУ РІДИНИ ВІД РАДІУСА КРИВИЗНИ ПОВЕРХНІ

Булавін Л.А., Сисоєв В.М

Київський університет ім. Тараса Шевченка, фізичний  
факультет Київ, 252127, пр. акад. Глушкова, 5.

Під дією поверхневого натягу краплина р'дини р'діуса  $R$  стискується і змінює свій об'єм  $V_0$  на величину  $\Delta V = (V_0 - V)/V_0 \approx \approx 3(\Delta R/R) - 3(\Delta R/R)^2$ . Якщо використати для обчислення величини  $\Delta V$  відповідне рівняння стану  $\Delta p = p - p_c = f(\Delta V)$ , то з урахуванням формули Лапласа  $\Delta p = 2\sigma/R$ , де  $\sigma = \sigma(R)$  - коефіцієнт поверхневого натягу рідини, та формули Толмена

$$\sigma(R) = \sigma_\infty \left(1 - \frac{2\delta}{R}\right),$$

де  $\sigma_\infty = \sigma(R \rightarrow \infty)$ , а  $\delta$  - так звана поправка Толмена, можна одержати зв'язок між величинами  $\sigma_\infty, \delta$  та рівнянням стану рідини. Слід зауважити, що визначення величини  $\delta$  на даний час є ще не вирішеною до кінця проблемою.

Удалими від критичної точки, де як відомо адекватним рівнянням стану є рівняння Тейта [1] було одержано таким чином для і ди та аргону для  $\delta$  величини порядку  $3 \cdot 10^{-10}$  м, що добре узгоджується з модельними розрахунками, проведеними в ряді робіт /див./, наприклад, [2] /.

Поблизу критичної точки нами було застосовано рівняння скайлінгової теорії. В результаті було знайдено, що величина має сингулярний характер типу

$$\delta = \tilde{c}_0 \left[ (T_c - T)/T_c \right]^{-a},$$

де критичний індекс  $a$  близький до  $1/2$ , що свідчить про фрактальний характер форми краплини рідини поблизу критичної точки.

1. Сисоєв В.М. Тезр. и мат. физика, т. 55, 1983 г. № 2, с. 305-312.
2. Чо С., Кондо . Молекулярная теория поверхностного натяжения в жидкостях. М.: ИИЛ, 1963.

## ФУНКЦІОНАЛЬНИЙ ПІДХІД ДО ПРОБЛЕМИ ДИФУЗІЇ В СЕРЕДОВИЩІ З ФЛЮКТУЮЮЧИМИ ВЛАСТИВОСТЯМИ

Ласкін М.В.

*Фізико-технічний інститут, 310108, Харків, Україна*

В доповіді на трикладі дифузії в випадковому середовищі запропоновано функціональний підхід для систем, описуваних нелінійними стохастичними диференціальними рівняннями з мультиплікативним шумом. Цей підхід являється розвитком методу статистичної гідродинаміки [1] в застосованні до задачі дифузії в турбулентному потоці. Установлено інтегральний, в термінах функціонального інтегралу, зв'язок між характеристичним функціоналом поля домішки в початковий момент часу і просторово-часовим характеристичним функціоналом поля домішки в даний момент часу. Ядро інтегрального рівняння являється "матричним елементом" унітарного оператора, діючого в просторі функціоналів з визначеним скалярним добутком. Розвинутий формалізм унітарних операторів узагальнює побудову роботи [2], вивчені для проблеми турбулентності нестисливої ріднини.

Можливо, формалізм унітарних операторів в просторі функціоналів дасть змогу розповсюдити методи теорії канонічних перетворень на задачі дифузії в середовищах з флюктууючими властивостями.

### *Література*

1. G. Rosen, J.Math. Phys., 1971, v.12, p.812-820.
2. T. Alankus, J.Stat. Phys., 1989, v.54, p.859-872.

УЗАГАЛЬНЕНА ГІДРОДИНАМІКА ПРОСТИХ РІДИН:  
ДОСЛІДЖЕННЯ КОЛЕКТИВНИХ МОД

І.М.Мриглюк, М.В.Токарчук

Інститут фізики конденсованих систем

АН України, м.Львів

Прогрес нейтронної спектроскопії і поява високоякісних експериментів з високим розділенням [1,2] стимулювали до більш глибоких теоретичних досліджень колективних збуджень в рідинах, обумовлених скорельованим рухом частинок [1,3]. Це привело до створення загальної теоретичної схеми опису динамічних явищ в рідинах відомої під назвою "узагальнена гідродинаміка", яка дозволяє описувати і проміжну область хвильових векторів  $k$  та частот  $\omega$ , що досліджується методами розсіяння світла.

Для ортогоналізованого набору динамічних змінних, до якого входять густини числа частинок  $\hat{n}(k)$ , імпульсу  $\hat{p}(k)$ , ентальпії  $\hat{h}(k)$ , а також потоків імпульсу  $\hat{\pi}(k)$  та ентальпії  $\hat{Q}(k)$ , методом нерівноважного статистичного оператора зубарьова отримані рівняння узагальненої гідродинаміки простих рідин [4]. Знайдена система рівнянь для кореляційних функцій, побудованих на цих змінних. Отримані вирази для узагальнених коефіцієнтів переносу.

З використанням марківського наближення для вищих функцій пам'яті злізжено колективні моди в одноатомній рідині. Показано, що для такого набору динамічних змінних крім відомих гідродинамічних мод (теплової та двох звукових) в системі існують дві кінетичні моди, з яких дисперсія має зовсім інший характер. Це підтверджує результати досліджень отриманих в роботі [3]. Проаналізовані залежності узагальнених коефіцієнтів переносу від хвильового вектора і частоти. Проведені дослідження динамічного структурного фактора Леонард-Джонсівської рідини.

1. Монтен Р.Д. Коллективные возбуждения в классических одноатомных жидкостях. - В кн.: Динамические свойства твердых тел и жидкостей, М.: Мир, 1980. - С. 391-423.
2. van Well A.A., Verkerk P., de Graaf L.A., Susa J.B., Copley J.R.D. // Phys.Rev. A., 1985, v. 31, № 5, p. 339.
3. de Schepper I.M., Cohen E.G.D., Bruin C., van Rijs J.C., Montfrooij W., de Graaf L.A. // Phys. Rev.A., 1988, v.38, №1, p.271.
4. Мриглюк І.М., Токарчук М.В. Препринт ІФКС-91-6У, Київ. 1991, 24с.

РІВНОВАЖНІ ВЛАСТИВОСТІ НЕСКІНЧЕНОЇ СИСТЕМИ ЗАРЯДЖЕНИХ ЧАСТИНОК  
В ПРИСУТНОСТІ ДИНАМІЧНОЇ МЕМБРАНИ

Пічавський І.І.

Львівський торговельно-економічний інститут  
290008 Львів, вул. Туган-Барановського, 10

Нехай в просторі  $\mathbb{R}^3$  виділено область  $S$ , яка є об'єднанням сферичних областей  $S_\alpha$  ( $\alpha=1,2,\dots$ ), що не перетинаються, мають однакові радіуси і містяться в шарі  $\Gamma$  товщиною  $d$ . Області  $S$  і  $\mathbb{R}^3 \setminus S$  характеризуються діелектричними постійними  $\epsilon_1$  та  $\epsilon_2$  і називаються динамічною мембраною і середовищем відповідно [1]. Вважаємо, що спочатку система частинок знаходиться у скінченному об'ємі  $\Lambda \subset \mathbb{R}^3$  і описується за допомогою функцій розподілу  $\rho_{i_1, \dots, i_m}(x_1, \dots, x_m)$ , які визначають щільність імовірності знаходження  $m$  частинок сортів  $i_1, \dots, i_m$  в точках  $x_1, \dots, x_m$ . Використовуючи метрику евклідової квантової теорії поля і кластерні розклади [2,3] отримуємо основний результат у вигляді теореми.

Теорема. Нехай  $A_{i_1, \dots, i_m}(x_1, \dots, x_m)$  деяка обмежена функція з

$\text{supp} \subset X_A$ ,  $X_A$  - компактна область в  $\Lambda \setminus S$  і

$$(I) \langle A \rangle_\Lambda = \sum_{i_1, \dots, i_m} \int dx_1 \dots dx_m \rho_{i_1, \dots, i_m}(x_1, \dots, x_m) A_{i_1, \dots, i_m}(x_1, \dots, x_m)$$

Тоді для достатньо малих значень параметрів  $\beta = e^2/4\pi\epsilon_2 kT$  і розподілів областей  $S_\alpha$  в  $S$ , що задовільняють умовам роботи [4], існують константи  $c_1$  та  $c_2$ , а також константи  $c_A$  і  $c_B$ , що залежать від функцій  $A_{i_1, \dots, i_m}$  і  $B_{i_1, \dots, i_m}$  такі, що існує границя

$$\langle A \rangle = \lim_{\Lambda \rightarrow \mathbb{R}^3} \langle A \rangle_\Lambda$$

а для двох середніх типу (I), локалізованих в окремих областях  $X_A$  і  $X_B$ , має місце нерівність

$$| \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle | \leq c_A c_B \left( c_1 \exp(-\bar{d}_{AB}/e) + c_2 \frac{\exp(-\bar{d}_{AB}/e)}{1 + \beta^3} \right)$$

Тут  $d_{AB} = \text{dist}(X_A, X_B)$ ,  $\bar{d}_{AB} = \text{dist}(\Gamma, X_A) + \text{dist}(\partial\Gamma, X_B)$ ,  $1 + \beta^3$   
 $\rho_{AB}$  - віддаль між  $X_A$  та  $X_B$  в площині паралельній  $\partial\Gamma$ ,  
 $\epsilon_D$  - кореляційна довжина Дебая.

1. Дитнерский В.И. Обратный осмос и ультрафильтрация. М., "Химия" 1978
2. Brydges D., Fr tergush P. Commun Math Phys. 1980, 73,3, 197-246
3. Ребенко А.Л. УМН, 1988, 43, в.3, 55 - 97
4. Пяльовский А.И. Препринт ИТФ-82-37Р, Г'ев, 1982, 36 с.

ОПИС КРИСТАЛА З ДЕФЕКТАМИ В ТЕРМІНАХ ТЕОРІЇ  
РОЗШАРОВАНИХ ПРОСТОРІВ

Тричезець Ю.М.†, Титаренко І.М.‡, Картиш А.А.††

† Інститут теоретичного матеріалознавства, вул. Наукова, 36  
290601, Львів, Україна

†† Інститут прикладної фізики Львівського університету,  
вул. Пушкіна, 49 290044, Львів, Україна

Для вивчення впливу дефектів на електричні, оптичні та механічні властивості кристалів необхідні моделі, які дозволяють врахувати вплив неупорядкованості системи, в даному випадку кристала, на його електронну структуру. При цьому є доцільним знайти зв'язок між континуальною теорією дислокацій і квантовим рівнянням руху, на базі якого розраховуються фізичні властивості кристалів. Таким чином, можна отримати рівняння руху, яке містить в собі інформацію про неупорядкованість кристала, описаного в термінах узагальненої континуальної теорії дислокацій. Континуальна теорія дислокацій по суті є геометричною моделлю, тому при її узагальненні природньо використовувати методи диференційної геометрії, зокрема, деякі предствалення теорії розшарованих просторів. При описі кристала з дефектами за допомогою розшарованого простору є доцільним в якості бази використовувати простір  $R^4 \otimes V^\infty$ , а в якості шару - деяку групу  $L_1$ . Вплив електронної підсистеми враховується розширенням цієї конструкції до асоційованого розшарування із стандартним шаром  $N$ , який вибирається у вигляді гільбертового простору. Вектор дисторсії отожднюється з компонентами форми зв'язності на головному розшаруванні, а тензор густини потоку дислокацій - з компонентами кривизни розшарованого простору. Після визначення найпростішого лагранжіану, який враховує вплив електронної підсистеми і провівши стандартну варіаційну процедуру, отримуємо рівняння для тензора дисторсії, яке описує зміну густини потоку дислокацій за рахунок впливу електронної підсистеми і є узагальненням континуальної теорії дислокацій. Рівняння руху, яке враховує вплив структурної неупорядкованості кристала на його властивості отримується в результаті варіації функції Лагранжа по біспінорах.



РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ПОТЕНЦИАЛА Me-Om МЕТОДОМ MNDO ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ИОННО-КОВАЛЕНТНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ.

Воронова Л.И.

Челябинский государственный технический университет,  
пр. Ленина 76, 454080, Челябинск, Россия

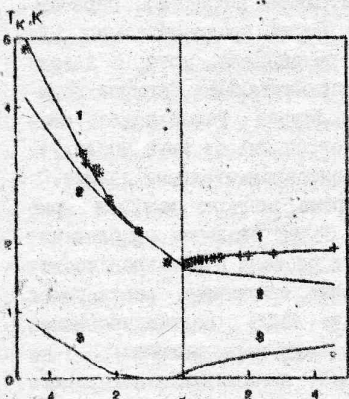
Результаты моделирования структуры и других физико-химических свойств оксидных расплавов зависят, в основном, от выбранного потенциала межчастичного взаимодействия. Традиционно для этих систем применялся ионный, сферически симметричный потенциал, параметры которого определялись в результате серий предварительных MD-моделирований и выбора тех параметров потенциала, которые давали наилучшее соответствие модельных и экспериментальных функций радиального распределения и коэффициентов диффузии. Такой подход снижает качество независимой информации и ограничивает круг исследуемых систем теми, для которых имеются экспериментальные данные.

Поскольку в оксидных расплавах кроме ионного имеется ярко выраженное ковалентное взаимодействие, более реальное приближение для потенциала должно это учитывать. Для расчета параметров ионно-ковалентного потенциала была использована программа, реализующая расчеты по квантово-химическому методу MNDO (модифицированное пренебрежение двухчастичным дифференциальным переопытанием). С ее помощью были оптимизированы "большие" комплексы, содержащие порядка двенадцати частиц, соответствующих типов и получены заряды на атомах, силовые постоянные двух и трехцентрового взаимодействия для связей Me-Om, где Me - Si, B, Al, Om-мостиковый кислород. Эти данные затем использовались для построения суперпозиционного потенциала включающего четыре основных вклада, каждый из которых описывается своими параметрами: отталкивательный короткодействующий вклад, кулоновский дальнедействующий вклад, ковалентный двухцентровый вклад и ковалентный трехцентровый вклад, "отвечающий" за направленность связей внутри элементарного комплекса, центрированного на сеткообразователе. Для каждого типа связи Me-Om, был определен набор параметров суперпозиционного ионно-ковалентного потенциала, который можно использовать как для молекулярно-динамического моделирования, так и для моделирования методом Монте-Карло различных физико-химических свойств оксидных систем.

ПРО З'ЯСОВАННЯ ОСОБЛИВОСТЕЙ ЕЛЕКТРОННОГО СПЕКТРУ  $Re$   
З ПОВЕДІНКОЮ  $T_K$

Т. Ігнат'єва, О. М. Великодний  
Харківський фізико-технічний інститут,  
310108, Харків, Україна

Надпровідні властивості  $Re$  досить чутливі до домішок. Домішки меншої валентності  $Mo$ ,  $w$  збільшують  $T_K$   $Re$  в декілька разів, додавання домішок більшої валентності  $Os$ ,  $Ru$  приводить до незначного росту  $T_K$ . Таку поведінку  $T_K$  можна пояснити, враховуючи тонку структуру електронного спектру. Як з'ясува-



лось, в  $Re$  по обидві сторони від  $\epsilon_F^0$  знаходяться критичні енергії  $\epsilon_{n1}$  і  $\epsilon_{n2}$ . Коли  $\epsilon_F^0$  досягає одного із значень  $\epsilon_{n1}$  відбувається електронно-топологічний перехід (ЕТП). Під впливом домішок  $Mo$  з'являється діркова порожнина поверхні Фермі, а введення домішок  $Os$  приводить до народження електронної порожнини ПФ. Ці переходи спостерігались по екстремумах в  $\frac{\partial T_K}{\partial P}(c)$ , які корелювали з нелінійним ходом  $T_K(c)$ . Кількісний аналіз ЕТП і поведінки  $T_K$  показав, що зміни  $T_K$  можна розглядати як плавний хід  $T_K^0(c)$ , на фоні якого з'являється  $\Delta T_{top}$ , пов'язані з ЕТП. Результати кількісного аналізу  $T_K$  з врахуванням ЕТП для  $Re-Mo$  і  $Re-Os$ , виконаного по теорії Макарова-Бар'яхтара, зображені на рис. З цього рис. видно, що хід  $T_K$  (крива 1 теоретична, точки — експериментальні) під дією домішок  $Mo$ ,  $Os$  визначається результуючими плавного ходу  $T_K^0$  (крива 2) з  $\frac{\partial T_K^0}{\partial c_{Mo}}$ ,  $\frac{\partial T_K^0}{\partial c_{Os}}$  і топологічної добавки  $\Delta T_{top} > 0$  (крива 3), яка посилює ріст  $T_K$  у випадку домішок  $Mo$  та компенсує зменшення  $T_K$  у випадку домішок  $Os$ . Отже величину  $T_K$  визначає характер зміни складових частин.

## МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРНОГО РОЗПОРЯДКУВАННЯ В БІНАРНІХ ГЦК - СТРУКТУРАХ

Д.М. Фрейк, Я.П. Салій Г.М. Добровольська  
Прикарпатський університет, вул. Шевченка, 57  
284000, Івано-Франківськ, Україна

Однією із задач моделювання структурних параметрів дефектних кристалах є визначення стабільних конфігурацій в них. Однак не менш важливим є інтерпретація одержаних результатів моделювання і аналізу з їх допомогою наявних експериментальних даних.

В даній роботі методами динамічного моделювання розраховано координати атомів у кристаліті розміром  $10 \times 10 \times 10$  атомів з ГЦК-ґраткою при наявності в ньому дефекту. Парну взаємодію атомів описано потенціалом Ленарда-Джонса з параметрами для атомів ксенону, взаємодія яких вважається подібною до взаємодії атомів у  $PbTe$ . Зовнішні атоми вважались нерухомими. На основі значень координат атомів побудовано гістограму зміщень відстаней між площинами (III). Використовуючи функціональний вигляд кривої дифракційного відбивання /КДВ/ для ідеального кристалу і виконуючи перехід від гістограми міжплощинних зміщень до гістограми кутів Бреґа за формулою Вульфа-Бреґа одержано КДВ дефектного кристалу.

Встановлено, що зі збільшення концентрації дефектів спостерігається зміщення максимуму КДВ, причому у випадку вакансій у сторону зменшення міжплощинних відстаней, а у випадку міжвузловинних атомів - збільшення. Однак, нетривіальним є результат, котрий показує зменшення сталої ґратки при наявності френкелівської пари. Крім цього, встановлено, що при збільшенні роздільної здатності реєструючого пристрою, тобто зменшенні півширини КДВ для ідеального кристалу, появляються додаткові максимуми на КДВ, амплітуда яких зростає зі зростанням концентрації дефектів.

Таким чином, реалізовано спосіб співставлення результатів моделювання дефектних структур і результатів рентгено-структурного дослідження. Одержано задовільне співпадання модельних і експериментальних КДВ для монокристалів халькогенідів свинцю у випадку радіаційного дефектоутворення при промінні альфа-частинками.