

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕЖАТОМНОГО ПРОСТРАНСТВА ДЛЯ АНАЛИЗА МОДЕЛЕЙ СТРУКТУРЫ ЖИДКОСТИ

А.Г. Воронцов, Д.А. Куц

Предлагается способ анализа пространственного расположения атомов в моделях жидкости, основанный на исследовании топологии межатомного пространства – системы симплицальных полостей. Взаимное расположение полостей легче поддается анализу, чем сетки Вороного и Делоне, используемые для описания расположения самих атомов. Получено качественное и количественное описание изменений, происходящих в структуре моделей расплавов Hg, Ga, Cs при повышении температуры. Проведено сравнение предложенного метода с традиционным статистико-геометрическим методом анализа моделей, методом Вороного–Делоне.

В настоящее время изучению неупорядоченных веществ уделяется существенно больше внимания, чем раньше. С одной стороны это связано с отсутствием достаточно полной теории в этой области, в отличие от обладающих трансляционной симметрией систем, а с другой стороны – все большей технологической востребованностью неупорядоченных материалов. До недавнего времени было возможно только построение качественных моделей, но значительное увеличение вычислительной мощности современных компьютеров открыло возможности получения количественных результатов методами численного моделирования.

Для однокомпонентных жидкостей существуют методы восстанавливающие расположение атомов: молекулярная динамика и Монте-Карло, а так же более современные численные методы: метод Шоммерса [1] и обратного Монте-Карло [2]. Причем методы обратного Монте-Карло и Шоммерса позволяют получать модели, функции радиального распределения которых заведомо соответствуют экспериментальным. Трудности численного анализа моделей связаны с тем, что объем информации, полученной после определения координат атомов, существенно больше, чем содержится в исходных данных дифракционного эксперимента. Поэтому возникает необходимость развития компьютерных методов статистико-геометрического анализа. Одним из возможных подходов являются метод Вороного–Делоне [3]. В этом методе формируется система многогранников Вороного (МВ), покрывающих всю модель, или дуальная к ней система симплексов Делоне (СД). Многогранник Вороного – область пространства, находящаяся ближе к одному из атомов, чем к остальным. МВ полностью заполняют пространство и несут информацию о локальной пространственной конфигурации, характерной для каждого отдельного атома. Соединив атомы, являющиеся геометрическими соседями в разбиении Вороного, можно получить симплексы Делоне, которые формируют сетку Делоне. Разбиение пространства на МВ или СД существует и однозначно для большого класса систем, что определило использование этого метода для объектов, не обладающих симметрией.

Предлагавшиеся ранее методы анализа разбиения Вороного или Делоне основаны на изучении статистических закономерностей форм и размеров получающихся областей. Изучалась статистика объема, площадей граней, числа граней, числа ребер на гранях многогранников Вороного [3] и тетраэдричность, октаэдричность [4], совершенность [5] симплексов Делоне. Очевидно, что статистический анализ разбиения Вороного затруднен большим разнообразием метрических параметров и широким диапазоном изменения топологических. В случае сетки Делоне изучение ее топологических свойств осложняется тем, что число выходящих из одного узла ребер может достигать 15–20.

Недавние работы [6, 7] по изучению геометрических характеристик неупорядоченных моделей показали, что конфигурация межатомного пространства более чувствительна к неоднородностям атомной структуры, чем к положению самих атомов, т.е. модели, имеющие схожие функции радиального распределения атомов можно различить, если провести исследование межатомного

пространства в них. Таким образом, систематический анализ межатомного строения жидкости позволяет полнее раскрыть особенности ее структуры. В этой работе предлагается способ анализа структуры жидкости, основанный на исследовании свободного от атомов пространства (системы симплициальных полостей), и рассматривается применение его для сравнения атомных моделей и количественного определения структурных изменений в них.

Метод исследования

Новое развитие метод симплексов Делоне получает при определении свободного объема в модели. Симплекс Делоне определяет не только связи атомов, но и положение симплициальной полости (СП) – сферической области межатомного пространства максимального объема [3]. Симплициальная полость по определению сфера, внешне касающаяся 4-е атомные сферы и не пересекающаяся с другими атомными сферами. В двухмерном случае, показанном на рис. 1, сферы являются окружностями, а симплексы – треугольниками. В этой работе для выявления статистических закономерностей расположения атомов жидкости исследуется часть пространства, занятая симплициальными полостями. Построение полостей производится с помощью известного метода симплексов Делоне, однако получаемая система симплициальных полостей имеет более простое топологическое строение, чем сетка Делоне. Это обстоятельство облегчает процедуру анализа изменений структуры происходящих при переходе от модели к модели.

Расположение центров атомов известно из моделирования, поэтому для определения симплициальных полостей необходимо задать размеры атомов. Радиусы атомных сфер можно определять по-разному: можно, например, положить их одинаковыми, равными некоторой величине, исходя из размеров внешних электронных оболочек. Естественно, это порождает некоторую неопределенность в выборе радиусов атомных сфер. Неопределенность в выборе радиуса атомных сфер преодолевалась следующим образом. Возьмем в качестве начального атомного радиуса некоторое, одинаковое для всех, значение таким образом, чтобы атомные сферы не пересекались. Затем одновременно будем одинаково увеличивать атомные сферы. Если какая-нибудь атомная сфера коснется другой, то далее ее радиус не увеличиваем. В результате мы получаем атомные сферы немного различающихся радиусов, причем они не пересекаются. Такой выбор атомных сфер в простых жидкостях можно объяснить попыткой определения максимальной области сферически симметричного потенциала, соответствующего определенному атому, и тем, что размеры атомов не могут быть строго определены и зависят от локальной плотности. Это построение, удобно использовать для сравнения систем, имеющих сходную природу, но различные значения атомной плотности, например модели одной и той же жидкости при различных температурах. При таком выборе атомных сфер изменение масштабов системы приводит только к изменению размеров сфер (атомных и симплициальных), при этом изменения их взаимного расположения не происходит.

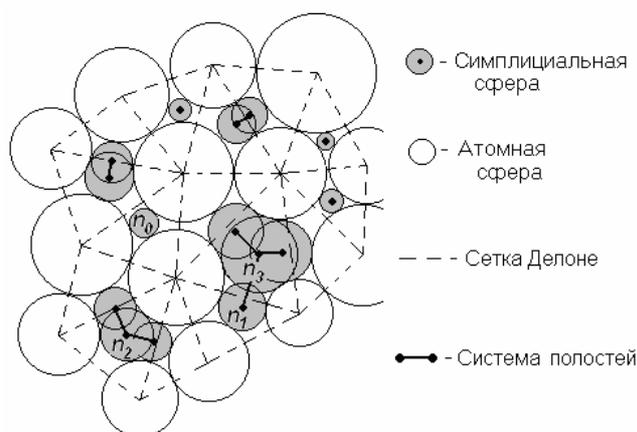


Рис. 1. Двухмерная иллюстрация построения сетки Делоне и системы симплициальных полостей

Для анализа не занятого атомными сферами пространства определим граф симплициальных полостей. Вершинами этого графа являются центры симплициальных полостей. Две вершины этого графа будем считать соединенными ребром, если соответствующие этим вершинам симплициальные полости пересекаются и принадлежат соседним СД. Двухмерная иллюстрация этого построения приведена на рис. 1. Необходимо отметить, что граф симплициальных полостей обладает более простым топологическим строением, чем сетка Делоне. Если в сетке Делоне из каждого узла может выходить до 15–20 ребер, то в полученном графе число приходящих

на одну вершину ребер не превышает четырех (в двухмерном случае – трех). Совокупность множества симплициальных полостей с соответствующим графом симплициальных полостей будем называть системой симплициальных полостей. Ее простое топологическое строение и физический смысл, а также то, что каждая полость определяется четырьмя атомами, т.е. устанавли-

ливают закономерности взаимного расположения групп атомов, позволяет по-новому решать задачу описания структуры неупорядоченных веществ.

Один из самых простых параметров системы симплициальных полостей – число связей, входящих на симплициальную полость. Каждый узел полученной системы (центр симплициальной полости) характеризуется числом соседей n , т.е. числом полостей, расположенных в соседних симплексах и пересекающихся с данной симплициальной полостью. Поскольку каждая симплициальная полость определяется некоторым симплексом, то параметр n характеризует также и симплексы. Этот параметр допускает достаточно простое толкование с точки зрения расположения атомов (атомной структуры). Примерные атомные конфигурации, соответствующие различным значениям параметра n приведены на рис. 2.

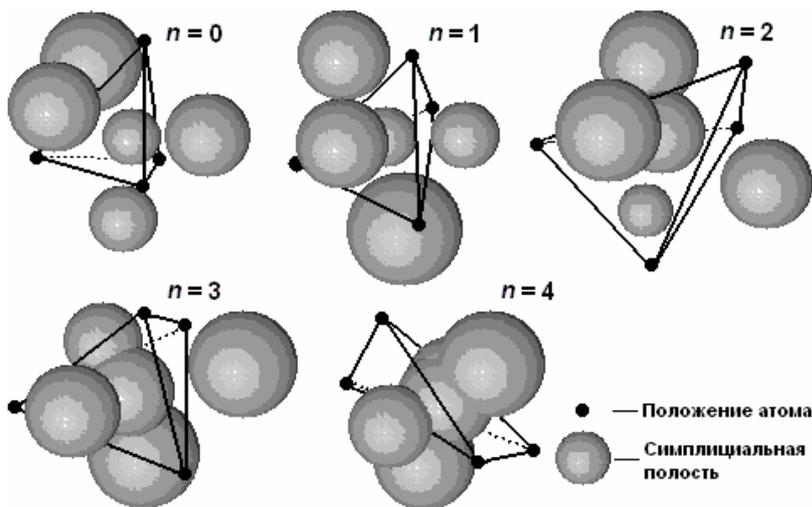


Рис. 2. Пространственное расположение атомов, соответствующее различным значениям параметра n

Можно сказать, что симплексы с $n = 0, 1, 2$ – часть плотной атомной структуры, симплексы с $n = 3$ – границы «плотной» и «рыхлой» атомной структуры, а симплексы с $n = 4$ представляют «рыхлую» структуру, в которой атомы сгруппированы преимущественно парами и цепочками. Через n_0, n_1, n_2, n_3, n_4 обозначим симплициальные полости (а также соответствующие им симплексы), для которых n соответственно равно 0, 1, 2, 3, 4 и будем в дальнейшем рассматривать соотношение между их долями в различных системах.

Результаты

Продемонстрируем работу этого метода на моделях ртути, галлия и цезия. Модели, содержащие от 1000 до 4000 атомов, были получены ранее для Hg (293–1723 К) методом Шоммерса [8], Ga (293–1273 К) и Cs (323–1923 К) методом Шоммерса [9, 10] и обратного Монте-Карло [11, 12]. Эти методы не используют дополнительных подгоночных параметров, поэтому более предпочтительны для данной задачи. Метод Шоммерса является разновидностью молекулярной динамики, в которой парный потенциал определяется таким, чтобы в МД моделировании с его использованием восстанавливалась известная функция радиального распределения. В методе ОКМ изменяемым параметром является непосредственно расположение атомов в модели. При построении моделей использовались только термодинамические параметры (плотность, температура) для состояний, на кривой равновесия жидкость–пар, и функции радиального распределения, полученные в эксперименте. Полученные атомные конфигурации уже были исследованы методами Вороного Делоне [11, 12]. Параметры МВ и СД этих моделей постепенно изменялись, что свидетельствовало об изменениях, происходящих в структуре, но их конкретную природу установить не удалось.

В этой работе способом, описанным выше, во всех перечисленных моделях были построены и исследованы системы симплициальных полостей. Зависимости параметров n от температуры для Hg, Cs и Ga приведены на рис. 3–5. Наиболее полную картину изменения структуры жидкости при переходе от температуры плавления до критической температуры можно проследить на примере Cs и Hg, у которых диапазон экспериментальных значений полностью покрывает диапазон существования жидкой фазы.

В моделях исследуемых веществ можно отметить схожее изменение параметров n с ростом температуры: доля симплициальных полостей (и соответственно симплексов) n_2 заметно уменьшается, а доля полостей n_4 – растет. Число правильных симплексов n_0 и n_1 мало и еще больше уменьшается с увеличением температуры, что характерно для жидкостей. При низких температу-

рах преобладают полости n_2 , при повышении температуры их доля уменьшается и становится меньше n_3 , а при высоких температурах преобладают симплициальные полости n_4 . Значительное увеличение доли симплексов n_4 для моделей Hg и Cs при повышении температуры от температуры плавления до околоскритической температуры показывает постепенный переход от плотной структуры к структуре, в которой преобладают парные связи, а атомы выстраиваются в цепочки.

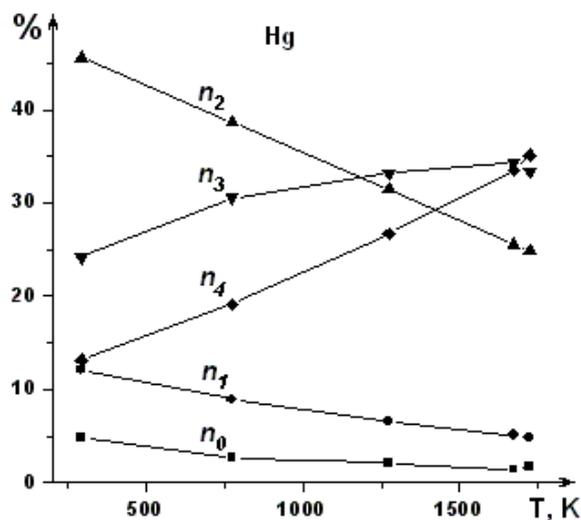


Рис. 3. Соотношение количества симплициальных полостей с различным значением параметра n в зависимости от температуры для моделей ртути (метод Шоммерса)

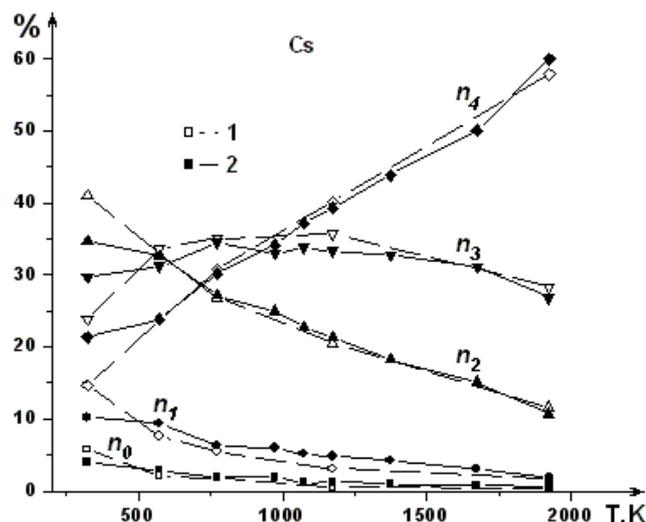


Рис. 4. Соотношение количества симплициальных полостей с различным значением параметра n в зависимости от температуры для моделей цезия: 1 – метод обратного Монте-Карло; 2 – метод Шоммерса

По зависимостям, показанным на рис. 3 и 4, и наиболее полно представляющим структурные изменения в расплавах, можно выделить три области I, II, III, в которых преобладают симплексы n_2 , n_3 , n_4 соответственно. Отметим, что часть температурного диапазона существования жидкой фазы Ga, показанная на рис. 5, целиком соответствует области I. Выделенные области условно можно охарактеризовать, как I – область плотной структуры, II – структура с появляющимися границами между сгустками атомов, III – неоднородная структура, состоящая из плотных и рыхлых фрагментов. Диапазоны температур, в которых структура расплава соответствует определенной области, различны для различных веществ. Обсуждение свойств жидкости в каждой из этих областей приведено в следующем разделе.

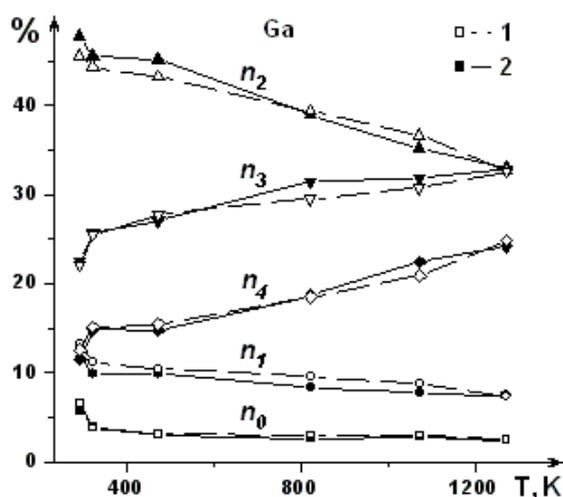


Рис. 5. Соотношение количества симплициальных полостей с различным значением параметра n в зависимости от температуры для моделей галлия (298 К – переохлажденная жидкость): 1 – метод обратного Монте-Карло; 2 – метод Шоммерса

Небольшое число параметров n , используемое для описания системы симплициальных полостей, позволяет сравнивать модели, полученные различными способами. Для примера на рис. 4 и 5 приведены значения параметров n для моделей Ga и Cs, полученных методами Шоммерса и ОМК. Отметим хорошее совпадение значений параметра n для моделей Ga на всем температурном диапазоне (293–1273 К), и цезия при температурах больших 600 К. Небольшие отклонения в показанных результатах можно объяснить небольшими размерами моделей, что отражается на величине статистической ошибки. В то же время у Cs при температуре 293 К наблюдается существенное отличие параметров моделей, полученных методами Шоммерса и ОМК. В модели, полученной методом ОМК, больше доля фрагментов имеющих структуру близкую к плотноупакованной, а методе Шоммерса – меньше. Обсуждение этого разли-

чия выходит за рамки данной статьи, однако скажем, что оно может быть связано либо с недостаточной точностью совпадения одной из моделей с экспериментальными данными, либо с особенностями построения моделей самими методами Шоммера и ОМК.

Для сравнения предложенной методики с уже существующими, исследовалась связь параметра n с мерами симплексов Делоне [3–5] тетраэдричностью T и октаэдричностью O . Тетраэдричность (T), октаэдричность (O) – безразмерные величины, численно характеризующие близость симплекса к правильному тетраэдру, октаэдру. Симплекс с малым значением меры T ($T < 0,018$ [3]) близок по форме к правильному тетраэдру, симплекс, имеющий малое значение меры O ($O < 0,03$ [3]), близок по форме к правильному квартоктаэдру (согласно [3] квартоктаэдр – четвертинка октаэдра). Эти меры построены таким образом, что для правильных фигур они обращаются в 0, симплексы с мерами далекими от 0 значительно искажены. Значения мер тетраэдричности и октаэдричности превышающие приведенные выше значения не удается однозначно связать с формой симплекса: одному и тому же большому значению T или O могут соответствовать симплексы совершенно разной формы [3].

Распределения симплексов, имеющих определенное значение параметра n по величине тетраэдричности и октаэдричности приведены на рис. 6 и 7. По данным с рис. 6 и 7 можно заключить, что нет взаимно однозначного соответствия параметра n и тетраэдричности или октаэдричности симплекса. Однако можно сказать, что при увеличении значения параметра n ($n_0 \rightarrow n_4$) симплексы отдаляются от правильной тетраэдричной формы. Почти все симплицеальные полости n_0 и n_1 соответствуют тетраэдричным ($T < 0,018$) симплексам (рис. 6), а малая октаэдричность присуща в основном симплексам n_2 (рис. 7), т.е. структуры с октаэдричным расположением атомов непосредственно связаны с полостями n_2 . Симплексы n_3 и n_4 не являются правильными, для них характерны большие значения как меры T , так и O .

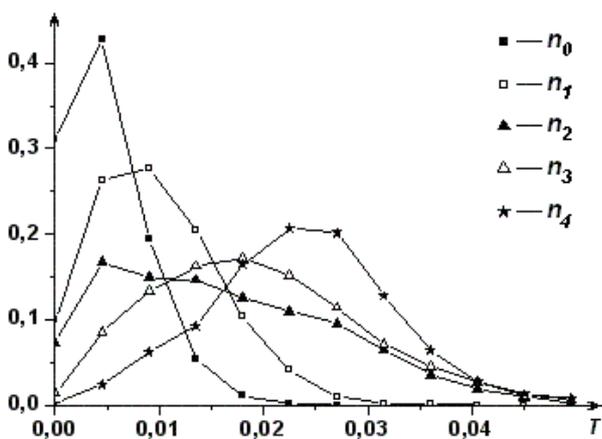


Рис. 6. Распределение мер тетраэдричности симплексов с различным значением параметра n для модели ртути (293 К)

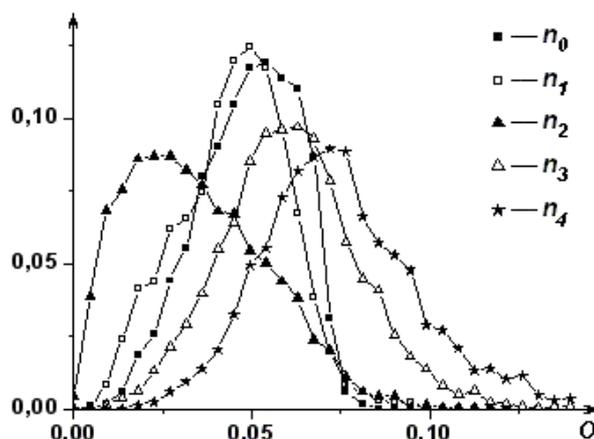


Рис. 7. Распределение мер октаэдричности симплексов с различным значением параметра n для модели ртути (293 К)

Меры T и O вводились [4, 5] для определения фрагментов кристаллического упорядочения в жидкостях, поэтому их целесообразно использовать только в случае плотных структур, т.к. в случае «рыхлых» структур эти меры принимают большие значения и такой анализ становится неинформативен. В предложенном нами подходе одновременно выделяются и плотные фрагменты структуры с $n = 0, 1, 2$, так и «рыхлые» с $n = 3, 4$, что является более удобным при низких плотностях.

Обсуждение свойств расплавов

Изменения, происходящие в структуре расплавов, имеют постепенный характер, поэтому их трудно наблюдать в эксперименте. Еще труднее указать связь между этими изменениями структуры и изменением других свойств системы. Здесь приведены некоторые факты, понимание которых может стать проще при использовании информации об изменении структуры расплавов цезия, ртути и галлия, приведенной в этой статье.

Цезий и ртуть являются наиболее подходящими объектами для изучения поведения проводящих жидкостей в широком диапазоне температур, от температуры плавления до окологритической. Из металлов они имеют самые низкие критические температуры (менее 2000 К), что позволило измерить различные их свойства [13–17], и определило их использование как образца для проверки различных теоретических моделей. Несмотря на близость этих элементов в периодической системе и схожесть некоторых из свойств, существует ряд различий. У цезия наблюдается сильное нелинейное изменение парамагнитной восприимчивости при температурах 1073–1923 К [13], у ртути – нет. Так же отмечают различие в интенсивности падения электропроводности у ртути и щелочных металлов [18], образование энергетической щели в спектре ртути [19], различная несимметричность кривых существования жидкость – пар [18].

Наше исследование позволяет показать, что расплавы Hg и Cs при одинаковых температурах имеют сильно отличающиеся структуры. У ртути структура около критической точки достаточно плотная, и только начинают появляться рыхлые фрагменты. Поэтому падение электропроводности ртути должно определяться ее химическим строением (разделением заполненного s уровня и свободного p уровня), что и подтверждается в теоретических и экспериментальных работах [19, 20]. В это же время изменение свойств цезия, по-видимому, больше определяются расположением атомов. У цезия при высоких температурах мала доля плотных фрагментов структуры, а преобладают цепочки атомов соединенных попарно, т.е. структура становится очень рыхлой. Это обстоятельство может приводить к появлению обособленных молекулярных комплексов в цезии, что объясняет необычное поведение его парамагнитной восприимчивости [13] и падение электропроводности [14].

У ртути выделяют несколько областей с различным типом проводимости [21]:

- а) режим распространения $11 < \rho < 13,6 \text{ г/см}^3$;
- б) диффузионный режим, $9,2 < \rho < 11 \text{ г/см}^3$;
- в) негомогенный транспортный режим, $8,0 < \rho < 9,2 \text{ г/см}^3$;
- г) полупроводниковый режим $\rho < 7,8 \text{ г/см}^3$, где ρ – плотность.

Точки, приведенные на рис. 3, соответствуют: 293 К – $13,55 \text{ г/см}^3$; 773 К – $12,4 \text{ г/см}^3$; 1273 К – $10,98 \text{ г/см}^3$; 1673 К – $9,25 \text{ г/см}^3$; 1723 К – $8,78 \text{ г/см}^3$. Можно заметить, что области а, б и в практически совпадают с областями I, II и III, в которых преобладает разный тип структуры (см. рис. 3). Область г не попадает в изучавшийся температурный диапазон. По-видимому, совпадение интервалов электропроводности и областей I, II, III связано с тем, что у ртути изменения в атомной структуре непосредственно влияют на электронную проводимость.

Можно отметить, что необычное изменение свойств Cs при 590 К [22], соотносится с изменением преобладающего типа структуры $n_2 \rightarrow n_3$. А начало резкого роста парамагнитной восприимчивости и изменение электропроводности Cs при температуре около 1000 К [13, 14] связано с изменением преобладающего типа структуры $n_3 \rightarrow n_4$. К сожалению, используемый нами метод не позволяет определить наличие качественного перехода в цезии при температуре около 1600 К, как это было сделано ранее в работе [7]. По-видимому, для очень рыхлых систем анализа параметров n оказывается недостаточно для этого.

Интересным объектом с точки зрения структурных превращений является Ga. Это один из немногих элементов, у которого при плавлении увеличивается плотность. В твердом состоянии Ga образует псевдотетрагональную решетку, атомы в которой связаны ковалентными связями. При плавлении ковалентные связи разрушаются, и атомы уплотняются, образуя плотную жидкость. Экспериментально найдено, что переохлажденный Ga достаточно устойчив. Из рис. 4 видно, что галлий около температуры плавления (323 К) имеет структуру жидкости с большим числом плотных фрагментов (преобладают полости n_2), число которых при переохлаждении (290 К) становится еще больше. Видимо это препятствует процессу кристаллизации, т.к. необходим переход к рыхлой кристаллической структуре. Интересен участок 323–473 К, где соотношение чисел n практически не изменяется (горизонтальные отрезки). Это говорит о том, что изменяется только масштаб структуры, при этом пространственное расположение атомов практически не изменяется. Видимо, плотная жидкость должна «набрать объем», чтобы начались структурные перестройки атомов. Можно предположить, что подобное свойство должно проявиться и у других веществ с плотной структурой.

Заключение

В этой статье предложен метод анализа моделей атомного строения веществ на основе исследования параметров межатомного пространства. Метод разделяет масштабные (однородные) изменения и изменения, происходящие во взаимном расположении атомов, что позволяет использовать его для сравнения структур одноатомных жидкостей различной природы при различных термодинамических условиях. Небольшое число параметров, использующихся для описания модели, позволяет сравнивать модели не только качественно, как в методах предлагавшихся ранее, но и количественно. Структуры различных веществ оказывается возможным сравнивать по степени их «рыхлости» при помощи параметра n , предложенного в этой работе. Анализ исследуемых моделей позволил выявить общий механизм изменения структуры расплавов и указать диапазоны температур, в которых происходит качественное изменение структуры.

Работа выполнена при поддержке грантов 04-02-96013-р2004урал_а, 03-03-32368-а.

Литература

1. Schommers W. Pair potential in disorder many-particle systems: A study for gallium// *Phys. Rev. A.* – 1983. – V.28. – №6. – P. 3599–3705.
2. McGreevy R. L., Pusztai L. Reverse Monte Carlo simulation: a new technique for the determination of disordered structures// *Mol. Simulation.* – 1988. – V. 1. – P. 359–367.
3. Медведев Н.Н. Метод Вороного–Делоне в исследовании структуры некристаллических систем. – Новосибирск: Изд-во СО РАН НИЦ ОИГГМ, 2000. – 214 с.
4. Medvedev N.N., Naberukhin Yu.I. Shape of the Delaunay simplices in dense random parking of hard and soft spheres// *J. Non-Cryst. Solids.* – 1987. – V. 94. – P.402–406.
5. Медведев Н.Н., Наберухин Ю.И., Лучников В.А. Области «совершенной» структуры в аморфном аргоне// *ЖСХ.* – 1994. – Т. 35 (1). – С. 53–63.
6. Voloshin V.P., Beaufils S. and Medvedev N.N. Void space analysis of the structure of liquids// *Journal of molecular liquids.* – 2002. – V.96–97. – P. 101–112.
7. Воронцов А.Г., Мирзоев А.А., Гельчинский Б.Р. Анализ межатомного пространства в жидком цезии// *ЖФХ.* – 2003. – Т. 77. – № 11. – С. 1800–1804.
8. Белащенко Д.К. Моделирование жидкой ртути по дифракционным данным и восстановление межионного потенциала// *Теплофизика высоких температур.* – 2002. – Т. 40. – № 2. – С. 240–249.
9. Белащенко Д.К., Гинзбург А.С. Расчет характеристик жидкого галлия по дифракционным данным // *ЖФХ.* – 2001. – Т. 75. – № 3. – С. 885–890.
10. Белащенко Д.К., Гинзбург А.С., Менделев М.И. Расчет характеристик жидкого цезия по дифракционным данным// *ЖФХ.* – 2000. – Т. 74. – № 4. – С. 669–674.
11. Smolin N.P., Gelchinski B. R., Mirzoev A.A., Dyuldina E.V.// *Journal of Non-Crystalline Solids.* – 2002. – V. 312–314. – P.90–94.
12. Gelchinski B.R., Mirzoev A.A., Belaschenko D.K., Winter R. Use of the Voronoi polyhedra method for analyzing short-range-order of liquid cesium and its reproducibility in reverse Monte Carlo modeling// *Jornal of non-Crystalline Solids.* – 1990. – V. 250–252. – P. 40–44.
13. Freyland W. Magnetic Susceptibility of metallic and nonmetallic expanded fluid cesium// *Phys. Rev. B.* – 1979. – V. 20. – P. 5104–5110.
14. Franz G., Freyland W., Hensel F. Thermodynamic and electric transport properties of fluid cesium and rubidium in the M-NM transition region// *J. Phys. (Paris) Colloq.* – 1980. – № 41. – C8 – P. 70–72.
15. Warren W.W., Brennert G.F., El-Hanany U. NMR investigation of the electronic structure of expanded liquid cesium// *Phys. Rev. B.* – 1989. – V. 39. – № 7. – P. 4038–4050.
16. Even U. and Freyland W. Hall mobility of expanded liquid caesium in the metallic propagation region// *J. Phys. F.* – 1975. – V. 5. – L104–L106.
17. Hosokawa S., Sinn H., Hensel F., Alatas A., Alp E.E., Pilgrim W.C. Collective dynamics of liquid Hg investigated by inelastic X-ray scattering// *Journal of Non-Crystalline Solids.* – 2002. – V. 312–314. – P. 163–167.
18. Hensel F., Marceca E. and Pilgrim W.C. The metal–non-metal transition in compressed metal vapors// *J. Phys.: Condens. Matter.* – 1998. – V. 10. – P. 11395–11404.

19. Yao M., Hayami W. and Endo H. Optical absorption coefficient of dense mercury vapor// J. Non-Cryst. Solids. – 1990. – V. 117–118. – P. 473–476.

20. Kresse G., Hafner J. Ab initio simulation of the metal/nonmetal transition in expanded fluid mercury// Phys. Rev. B. – 1997. – V. 55. – № 12. – P. 7539–7548.

21. Cohen M.H., Jortner J. Comment on electronic structure and transport in expanded liquid Hg// Phys. Rev. B. – 1977. – V. 15. – № 2. – P. 1227–1230.

22. Blagonravov L.A., Skovorod'ko S.N., Krylov A.S., Orlov L.A., Alekseev V.A., Shpilrain E.E. Phase transition in liquid cesium near 590 K// Journal of Non-Crystalline Solids. – 2000. – V. 277. – P. 182–187.

Поступила в редакцию 9 сентября 2005 г.