

## Электросопротивление жидкого цезия

О. В. Крисько<sup>1,a</sup>, В. М. Кузнецов<sup>2,b</sup>, В. М. Силонов<sup>2</sup>, Т. В. Скоробогатова<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Владимирский государственный университет, факультет прикладной математики и физики, кафедра функционального анализа и его приложений. Россия, 600005, Владимир, ул. Горького, д. 87.

<sup>2</sup> Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики твердого тела. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

<sup>3</sup> Кигальский институт науки и технологии, факультет науки, кафедра математики. Руанда, 3900, Кигали, авеню Армии.

E-mail: <sup>a</sup>krisko1952@mail.ru, <sup>b</sup>vkuznetsov@polly.phys.msu.ru

Статья поступила 15.12.2010, подписана в печать 21.12.2010

С использованием гладких нелокальных модельных псевдопотенциалов (ГНМП) и экспериментальных значений структурных факторов проведен расчет температурных зависимостей электросопротивления жидкого цезия. Расчеты проводились для температур 35, 150, 280, 310, 470 и 630°С как с учетом изменения параметров ГНМП в зависимости от температуры, так и без него. Параметры ГНМП жидкого цезия находились лишь из экспериментальных значений термов свободных ионов, без использования каких либо способов подгонки под электросопротивление цезия. Применение ГНМП позволило существенно улучшить сходство температурных зависимостей рассчитанных и экспериментальных значений электросопротивления жидкого цезия по сравнению с расчетами, основанными на локальных модельных потенциалах.

**Ключевые слова:** гладкий нелокальный модельный псевдопотенциал, электрические транспортные свойства, жидкие щелочные металлы.

УДК: 539.1, 536.21, 536.4, 537.311.3. PACS: 71.15Dx, 65.20.De, 72.15.Cz.

### Введение

Электросопротивлению жидких металлов и сплавов посвящено большое число экспериментальных и теоретических исследований [1–17]. В основе большинства теоретических исследований электросопротивления жидких металлов лежит использование теории Займана [1]. Выражение электросопротивления жидкого металла имеет простой вид

$$\rho = \frac{3\pi}{e^2 \hbar^3} \frac{1}{v_F^2} \Omega \langle a(q) | V(q)^2 \rangle, \quad (1)$$

где

$$\langle a(q) | V(q)^2 \rangle = 4 \int_0^1 a(q) |V(q)^2| \left( \frac{q}{2k_F} \right)^3 d \left( \frac{q}{2k_F} \right). \quad (2)$$

В (1), (2)  $a(q)$  — структурный фактор жидкого металла,  $V(q)$  — экранированный формфактор псевдопотенциала,  $k_F$  — импульс Ферми,  $e$  — заряд электрона,  $\hbar$  — постоянная Планка,  $v_F$  — скорость Ферми,  $\Omega$  — объем, приходящийся на атом в жидком металле. Во многих работах в качестве структурного фактора жидкого металла используется структурный фактор, рассчитанный в модели твердых сфер, а в качестве формфактора атома жидкого металла — простейший формфактор, предложенный Ашкрофтом [18]. Получаемые при этом удовлетворительные результаты часто определяются подгонкой параметров псевдопотенциалов Ашкрофта. Модель твердых сфер также не носит прецизионного характера.

Целью настоящей работы является расчет температурной зависимости электросопротивления жидкого цезия и исследование роли учета изменения параметров псевдопотенциала в зависимости от объема, приходя-

щегося на атом. При проведении расчетов использовались результаты прецизионных нейтронографических измерений его структурного фактора  $a(q)$  [19] и формфакторы гладких нелокальных модельных псевдопотенциалов (ГНМП) цезия, которые позволяют проводить расчеты как с учетом, так и без учета зависимости его параметров от величины атомного объема меняющегося с температурой [20–22].

### Гладкий нелокальный модельный псевдопотенциал

В прямом пространстве модельный потенциал ГНМП  $V(r)$  записывается в виде [22]

$$V(r, E) = -\frac{Z}{r} + \sum_{\ell=0}^{\infty} V_{\ell}(r, E), \quad (3)$$

где

$$V_{\ell}(r, E) = - \left( A_{\ell}(E) - \frac{Z}{r} \right) \frac{1}{\left[ 1 + \left( \frac{r}{R_m} \right)^2 \right]^K}, \quad (4)$$

$E$  — энергия рассеивающегося электрона в поле свободного иона,  $\ell$  — орбитальное квантовое число,  $Z$  — валентность иона,  $r$  — расстояние от центра иона в прямом пространстве,  $R_m$  — параметр, характеризующий радиус модельной сферы,  $A_{\ell}(E)$  — параметр, характеризующий глубину потенциальной ямы ГНМП для каждого  $\ell$  при  $r < R_a$ ,  $K$  — целое число. В дальнейшем будем полагать  $K = 12$ .

При расчетах  $V(q)$  матричный элемент ГНМП неэкранированного иона разбивается на две части: локальную, зависящую только от модуля вектора расстояния  $q$ , и нелокальную, зависящую от  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$  —

векторов состояний электрона, взаимодействующего с рассеивающим потенциалом [22]

$$\langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | V^{\text{ion}}(r, E) | \mathbf{k} \rangle = V^{\text{ion}}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, E) = \\ = V^{\text{ion}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E) = B(q) + F(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E). \quad (5)$$

Здесь  $B(q)$  — локальная часть,  $F(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E)$  — нелокальная часть потенциала. Локальная часть представляется в виде

$$B(q) = \frac{4\pi Z}{\Omega q^2} [-B_1(q) + B_2(q)]. \quad (6)$$

Выражение в квадратных скобках представляет собой сумму двух слагаемых: первое имеет аналитический вид, второе представляется в виде интеграла, берущегося лишь численно:

$$B_1(q) = 1 + C \frac{\pi R_m}{2^{12}(11)!} e^{-X} X^2 f_{12}^{-1}(X), \quad (7)$$

$$B_2(q) = X \int_0^\infty \frac{\sin(t)}{(1+t^2)^{12}} dt, \quad X = qR_m, \quad (8)$$

где  $C = A_2$ ,  $f_K^{-1}(X)$  — многочлен порядка  $K - 2$  [20].

Нелокальную часть формфактора ГНМП можно представить в виде суммы двух функций:  $E$ -зависящей нелокальной части формфактора и  $E$ -независящей:

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E_k) = F_0(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) + F_1(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E_k), \quad (9)$$

$$F_0(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) = -\frac{4\pi R_m^3}{\Omega} \sum_{l=0}^2 [2l+1] [A_l(E_F) - C] \times \\ \times D_\ell(a, b) P_\ell(\cos \Theta), \quad (10)$$

$$F_1(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E_k) = -\frac{4\pi R_m^3}{\Omega} \sum_{l=0}^2 [2l+1] \left[ \frac{d(A_l(E))}{dE} \Big|_{E=E_F} \right] \times \\ \times (E_k - E_F) D_\ell(a, b) P_\ell(\cos \Theta), \quad (11)$$

где  $\frac{d(A_l(E))}{dE} \Big|_{E=E_F}$  — производная параметров ГНМП по энергии на уровне Ферми,  $\Theta$  — угол между векторами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ ,  $E_k$  — энергия электрона с импульсом  $\mathbf{k}$ ,  $E_F$  — энергия электрона на уровне Ферми,  $b = |\mathbf{k} + \mathbf{q}| \cdot R_m$ ,  $a = |\mathbf{k}| \cdot R_m$ ,  $R = b - a$ ,  $a$ ,  $S = b + a$ .  $D_\ell(a, b)$  вычислялись по формулам

$$D_0(a, b) = \frac{1}{2ab} (f_K^0(R) - f_K^0(S)) \frac{\pi}{2^K(K-1)!}, \quad (12)$$

$$D_1(a, b) = \frac{-1}{2(ab)^2} [(f_K^1(R) - abf_K^0(R)) - (f_K^1(S) + abf_K^0(S))] \times \\ \times \frac{\pi}{2^K(K-1)!}, \quad (13)$$

$$D_2(a, b) = \frac{3}{2(ab)^3} [(f_K^2(R) - abf_K^1(R)) - (f_K^2(S) + abf_K^1(S))] \times \\ \times \frac{\pi}{2^K(K-1)!} + D_0(a, b), \quad (14)$$

где  $f_K^{-1}(X)$ ,  $f_K^0(X)$ ,  $f_K^1(X)$ ,  $f_K^2(X)$  — многочлены соответственно порядка  $K - 2$ ,  $K - 1$ ,  $K$ ,  $K + 1$ , которые можно вычислить явно, используя выражения

$$f_k^0(X) = \sum_{j=0}^{k-1} \frac{X^{K-1-j}}{2^j} C_{K-1}^j \frac{(K-1+j)!}{(K-1)!}, \quad (15)$$

$$f_{K+1}^{-1}(X) = f_K^0(X) = f_{K-1}^1(X) = f_{K-2}^2(X). \quad (16)$$

Формфактор экранированного ГНМП потенциала иона в кристалле представляется в виде суммы двух функций

$$V(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E_k) = V^{\text{ion}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E_k) + V^{\text{scr}}(q), \quad (17)$$

где  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$ ,  $V^{\text{scr}}(q)$  — потенциал экранирующей электронной плотности с учетом потенциала экранированной ортогонализационной дырки [7, 10, 22, 23]:

$$V^{\text{scr}}(q) = \frac{V_{ee}(q) \Pi[V^{\text{ion}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)] + V_{\text{ort}}(q)}{\varepsilon(q)}, \quad (18)$$

$V_{\text{ort}}(q)$  — потенциал ортодырки в приближении Дадженса [23]:

$$V_{\text{ort}}(q) = V_{ee}(q) \rho_{\text{ort}}(q), \quad (19)$$

$V_{ee}(q)$  — потенциал электрон-электронного взаимодействия с учетом обмена и корреляции в обратном пространстве:

$$V_{ee}(q) = \frac{4\pi}{\Omega q^2} (1 - f(q)), \quad (20)$$

$f(q)$  — обменно-корреляционная функция в приближении Шоу [24]:

$$f(q) = 1 - \exp \left( -0.535 \left( \frac{q}{k_F} \right)^2 \right), \quad (21)$$

$\rho_{\text{ort}}(q)$  — фурье-образ электронной плотности ортогонализационной дырки:

$$\rho_{\text{ort}}(q) = Z_{\text{dpl}} \frac{\pi}{1 - 6/\pi^2} \frac{(f_d(\pi - qR_m) - f_d(\pi + qR_m))}{2qR_m}, \quad (22)$$

$f_d(x) = \frac{2\sin(x)}{x^2} - \frac{2\cos(x)}{x} - \frac{\sin(x)}{x}$ ,  $Z_{\text{dpl}}$  — заряд ортодырки. В наших обозначениях для ГНМП

$$Z_{\text{dpl}} = \frac{\Omega}{\pi^2} \int_0^{k_F} \left( -\frac{4\pi R_m^3}{\Omega} \sum_{l=0}^2 [2l+1] \left[ \frac{d(A_l(E))}{dE} \Big|_{E=E_F} \right] \times \right. \\ \left. \times D_l(|\mathbf{k}|R_m, |\mathbf{k} + \mathbf{q}|R_m) k^2 \right) dk, \quad (23)$$

$\Pi[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)]$  — экранирующий функционал [22, 23] для простых металлов, представляющий собой сумму в  $\mathbf{k}$ -пространстве по  $\mathbf{k}$  в области  $|\mathbf{k}| < k_F$ , которую можно преобразовать в интеграл вида

$$\Pi[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)] = 2 \sum_{k < k_F} \frac{2F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E_k)}{k^2 - k'^2} = \\ = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} \frac{2F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E_k)}{k^2 - k'^2} d\mathbf{k}, \quad (24)$$

в атомных единицах  $E_k = \frac{k^2}{2}$ . При расчете интеграла (24) возникают проблемы, связанные с особенностью подынтегральной функции при  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ . Интегрирование подобных интегралов проводилось методом Гаусса.

В частном случае вычисления экранирующего функционала от локальной части потенциала (т. е. при  $F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E) = \Phi(q)$  — функции, зависящей лишь от вектора рассеяния  $q$ ), функционал вычисляется аналитически и имеет вид

$$\Pi[\Phi(q)] = \frac{1 - \varepsilon(q)}{V_{ee}(q)} \Phi(q). \quad (25)$$

Здесь  $\varepsilon(q)$  — диэлектрическая функция металла с учетом обмена и корреляции. Используя (5), (25), получаем

$$\begin{aligned} V_{ee}(q)\Pi[V^{\text{ion}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E_k)] &= V_{ee}(q)\Pi[B(q) + F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E_k)] = \\ &= (1 - \varepsilon(q))B(q) + V_{ee}(q)\Pi[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E_k)], \quad (26) \end{aligned}$$

Подставляя (26) в (17), с учетом (18) имеем для электронов на уровне Ферми значение нелокального экранированного потенциала иона

$$V(\mathbf{k}, \mathbf{k}+q; E_F) = F(\mathbf{k}, \mathbf{k}+q; E_F) + \frac{V_{\text{loc}}(q)}{\varepsilon(q)}, \quad (27)$$

где  $V_{\text{loc}}(q) = B(q) + V_{\text{ort}}(q) + V_{f1}(q)$ ,  $V_{f1}(q) = V'_{ee}(q) \times \Pi[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}+q; E_k)]$ .

В формуле расчета электросопротивления [2] рассеивающий экранированный потенциал  $V(q)$  локален по определению. В случае нелокального потенциала при расчете электросопротивления из семейства нелокальных потенциалов при фиксированном значении модуля вектора рассеяния  $q$  выбирается один локальный, у которого модуль рассеянного вектора равен  $k_F$ . Обычно для сравнения различных моделей псевдопотенциалов [7] используют формфактор экранированного иона при рассеянии назад или вперед. При рассеянии назад нелокальная часть формфактора  $F(\mathbf{k}, \mathbf{k}+q; E_F)$  с  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_F$  ( $\mathbf{k}_F$  — вектор рассеяния на уровне Ферми) рассчитывается исходя из того, что

$$|\mathbf{k}_F + \mathbf{q}| = \begin{cases} k_F, & q < 2k_F, \\ q - k_F, & q \geq 2k_F. \end{cases} \quad (28)$$

При рассеянии вперед

$$|\mathbf{k}_F + \mathbf{q}| = |\mathbf{k}_F| + |\mathbf{q}|.$$

Графическое представление соотношений между векторами  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ ,  $\mathbf{q}$  на уровне Ферми при рассеянии назад при  $q < 2k_F$  приведено на рис. 1. Из (28) и рис. 1 видно, что при рассеянии назад модуль вектора рассеянного электрона равен  $k_F$ . Основной вклад в электросопротивление металла дают электроны на поверхности Ферми, поэтому мы использовали локальную форму экранированного ГНМП при рассеянии назад.

Значения атомных объемов жидкого цезия находились из значений плотности [25] и приведены в табл. 1. Там же даны значения радиусов Ферми  $k_F$  и параметров ГНМП  $A_0$ ,  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $\frac{dA_0(E)}{dE}|_{E=E_F}$ ,  $\frac{dA_1(E)}{dE}|_{E=E_F}$ ,  $\frac{dA_2(E)}{dE}|_{E=E_F}$ ,  $Z_{\text{dpl}}$ . Методика получения параметров ГНМП приведена в [21]. Из табл. 1 видно,

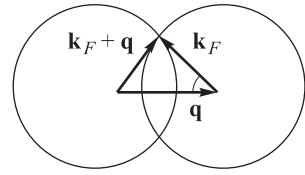


Рис. 1. Схематическое представление соотношения векторов  $\mathbf{k}_F$  на уровне Ферми и вектора рассеяния  $\mathbf{q}$  при рассеянии назад

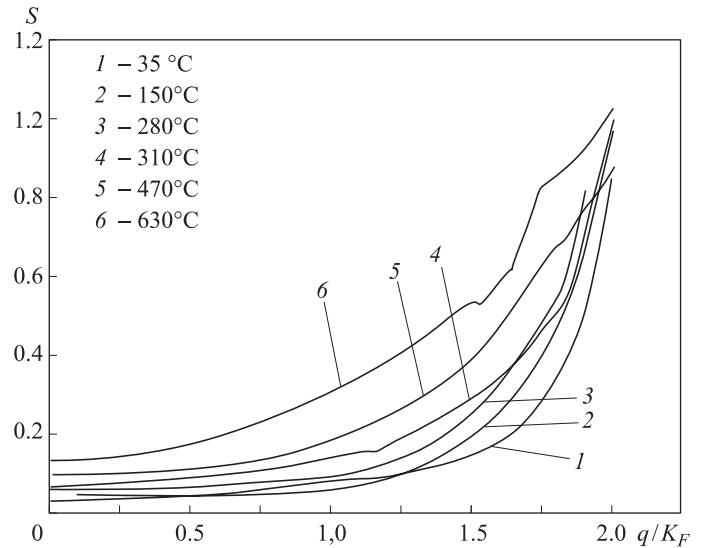


Рис. 2. Зависимости структурных факторов жидкого цезия от температуры, °C: 1 — 35, 2 — 150, 3 — 280, 4 — 310, 5 — 470, 6 — 630

что значения  $\Omega$  увеличиваются с ростом температуры от 35 до 630 °C на более чем 20%. Изменения параметров  $A_0$ ,  $A_1$ ,  $A_2$  менее значительны и составляют порядка 1% при изменении температуры почти в 5 раз. Все три параметра увеличиваются с ростом температуры. Производные  $\frac{dA_0(E)}{dE}|_{E=E_F}$ ,  $\frac{dA_1(E)}{dE}|_{E=E_F}$ ,  $\frac{dA_2(E)}{dE}|_{E=E_F}$  не изменяются. На рис. 2 приведены структурные факторы жидкого цезия для 35, 150, 280, 310, 470 °C из [24]. Из рис. 2 видно, что с ростом температуры наблюдается рост значений структурных факторов в интервале значений модулей векторов рассеяния от 0 до  $2k_F$ . Исключение составляют данные для 35 и 150 °C. Эти кривые пересекаются при значении  $q$ , равном 0.34 а.е.

На рис. 3 приведены рассчитанные значения формфакторов ГНМП жидкого цезия для тех же температур.

Таблица 1

Значения параметров ГНМП цезия в зависимости от объема, приходящегося на атом

$T, ^\circ\text{C}$	$\Omega, \text{а.е.}$	$A_0, \text{а.е.}$	$A_1, \text{а.е.}$	$A_2, \text{а.е.}$	$\frac{dA_0(E)}{dE} _{E=E_F}$	$\frac{dA_1(E)}{dE} _{E=E_F}$	$\frac{dA_2(E)}{dE} _{E=E_F}$	$Z_{\text{dpl}}$
35	839	-0.872	-1.883	1.361	-4.379	-10.246	4.471	-0.168
150	839	-0.874	-1.888	1.363	-4.379	-10.246	4.471	-0.162
280	878	-0.876	-1.894	1.366	-4.379	-10.246	4.471	-0.154
310	887	-0.877	-1.895	1.366	-4.379	-10.246	4.471	-0.152
470	941	-0.88	-1.903	1.369	-4.379	-10.246	4.471	-0.143
630	1001	-0.884	-1.911	1.373	-4.379	-10.246	4.471	-0.134

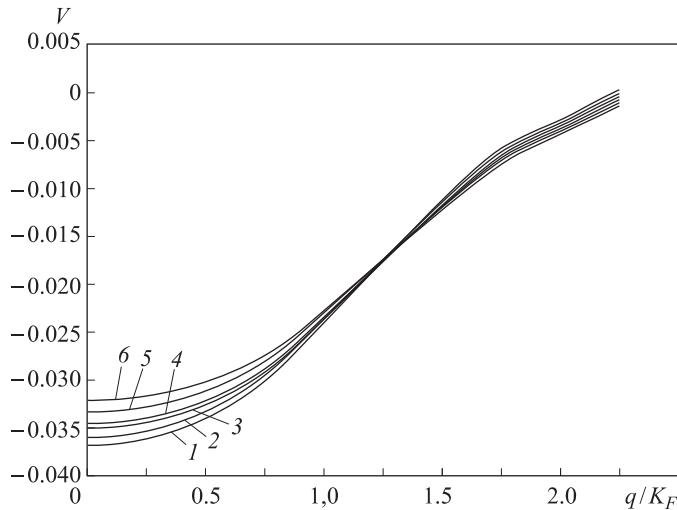


Рис. 3. Зависимости формфакторов ГНМП жидкого цезия температуры, °C: 1 – 35, 2 – 150, 3 – 280, 4 – 310, 5 – 470, 6 – 630

Из рисунка видно, что значения формфакторов ГНМП жидкого цезия в длинноволновом пределе падают с ростом температуры. Также видно, что с ростом значений  $q/k_F$  наблюдается инверсия и вблизи значений  $q/k_F = 2$  значения этих формфакторов растут с температурой.

В табл. 2 и на рис. 4 приведены экспериментальные и теоретические значения электросопротивления жидкого цезия для различных температур. Видно, что рассчитанные в модели ГНМП значения электросопротивления по абсолютному значению отличаются от экспериментальных значений не более чем на 20%. Расчеты с локальным потенциалом [27] приблизительно в 3 раза отличаются от экспериментальных значений. Аналогичная разница была получена в работе [3] при других, отличающихся от нашего случая значениях структурного фактора. Это говорит о важности учета нелокальности и гладкости модельных потенциалов при расчетах физических свойств жидких металлов. Рассчитанная температурная зависимость значений электросопротивления жидкого цезия несколько отличается от экспериментальной. На рис. 4 приведены также функции, аппроксимирующие линейные зависимости электросопротивления от температуры. Расчеты линейных зависимостей проводились в трех моделях. Две линейные зависимости — пунктирная и штрихпунктирная — отвечают расчетам с атомным объемом, равным 745.5 а.е., а штрихпунктирная — с атомными объемами из табл. 1. Видно, что учет изменений параметров ГНМП от атомного объема цезия несуществен. Из сравнения значений электросопротивления (табл. 2 и рис. 4), видно, что теоретические значения электросопротивления, рассчитанные в модели ГНМП, ниже экспериментальных [26] вблизи 250°С. С дальнейшим ростом температуры теоретические значения становятся больше экспериментальных. На этом же рисунке приведены рассчитанные значения электросопротивления жидкого цезия с использованием формфакторов квазилокальных модельных псевдопотенциалов Анималу. Там же приведена экстраполяционная линейная зависимость, построенная по этим данным. Видно, что эти расчеты значительно отличаются от экспериментальных

Таблица 2  
Экспериментальные и теоретические значения  
электросопротивления жидкого цезия в зависимости  
от температуры

$T$	$\rho$ , мкОм/см, эксперимент	$\rho$ , мкОм/см, параметры $A_0, A_1, A_2$ зависят от $\Omega$	$\rho$ , мкОм/см, параметры $A_0, A_1, A_2$ фиксированы
35	32.1	25.2	25.5
150	39.7	31.9	32.5
280	49.7	45.4	46.4
310	54.8	56.4	57.6
470	70.8	82.0	84.2

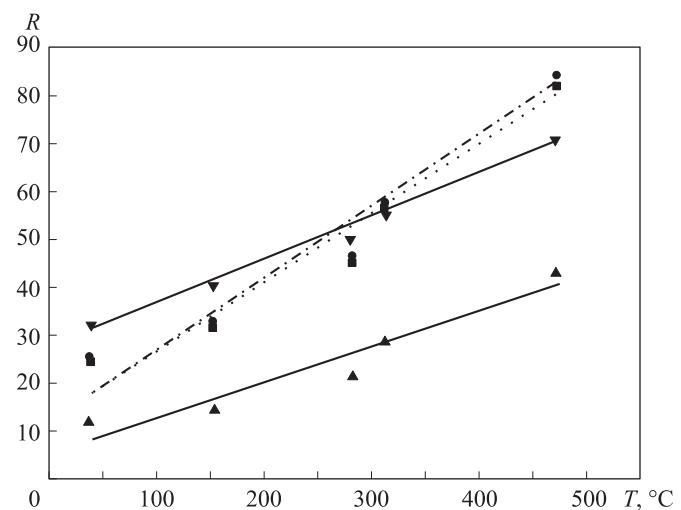


Рис. 4. Температурные зависимости экспериментальных и теоретических значений электросопротивления жидкого цезия: ▲ — эксперимент, ● — расчет с формфакторами ГНМП и параметрами, не учитывающими изменения атомного объема с температурой, ■ — расчет с формфакторами ГНМП и параметрами, учитывающими изменения атомного объема с температурой, ▲ — расчет с формфакторами Анималу; пунктир — линейная аппроксимация рассчитанных значений с учетом изменения параметров формфактора ГНМП с температурным изменением атомного объема, штрихпунктир — то же без его учета; 1 — линейная аппроксимация экспериментальных данных, 2 — линейная аппроксимация рассчитанных значений с формфакторами Анималу

данных и результатов расчетов с использованием гладких нелокальных модельных псевдопотенциалов.

В результате сравнения экспериментальных и теоретических значений зависимости электросопротивления жидкого цезия (рис. 4, табл. 2) можно прийти к выводу о реалистичности использования теории Займана совместно с ГНМП при расчетах электросопротивления жидкого цезия. Об этом говорят:

1) удовлетворительное совпадение теоретических значений электросопротивления с экспериментальными значениями;

2) совпадение характера экспериментальной зависимости электросопротивления цезия от температуры с теоретически рассчитанной. В эксперименте и в рас-

четах наблюдаются близкие к линейным зависимости электросопротивления от температуры в рассматриваемом интервале.

Влияние учета изменения параметров ГНМП от атомного объема мало. Этим можно объяснить некоторые достаточно успешные расчеты электросопротивления простых жидких металлов с помощью локальных псевдопотенциалов [3]. Параметры ГНМП цезия не подгонялись под значения электросопротивления цезия или другие его физические свойства в твердом или жидком состоянии. Они были получены из экспериментальных значений термов свободных ионов цезия [20, 21]. Все это говорит о реалистичности применения теории нелокальных псевдопотенциалов (в частности, ГНМП) к расчету физических свойств простых металлов в конденсированном состоянии.

Авторы выражают благодарность Л. А. Благонравову за полезные обсуждения результатов работы.

### Список литературы

1. Ziman J.M. // Phil. Mag. 1961. **6**. P. 1013.
2. Bradley C.C., Faber T.E., Wilson E.G., Ziman J.M. // Phil. Mag. 1962. **7**. P. 865.
3. Sundstrom L.J. // Phil. Mag. 1965. **11**. P. 657.
4. Ashcroft N.W., Lekner J. // Phys. Rev. 1966. **145**, N 1. P. 83.
5. Ashcroft N.W., Langreth D.C. // Phys. Rev. 1967. **159**. P. 500.
6. March N.M. Liquid metals. Oxford, 1968.
7. March N.M. // Can. J. Chem. 1977. **55**. P. 2165.
8. Faber T.E. Introduction to the theory of liquid metals. L., 1972.
9. Ratti V.K., Evans R. // J. Phys. F: Metal Phys. 1973. **3**. P. L238.
10. Харьков Е.И., Лысов В.И., Федоров В.Е. Физика жидких металлов. Киев, 1979.
11. Шарыкин Ю.И., Глазков В.П., Сквородько С.Н. и др. // Докл. АН СССР. 1979. **244**, № 1. С. 78.
12. Марч Н., Тоси М. Движение атомов жидкости М., 1980.
13. Момм Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. М., 1982.
14. Korkmaz S., Korcmaz S.D. // Comp. Mater. Sci. 2006. **37**. P. 618.
15. Faber T.E. // Advances in Physics. 1967. **16**, N 64. P. 637.
16. Ворса А.М. // Теплофизика высоких температур. 2008. **6**, № 6. С. 870.
17. Благонравов Л.А., Крылов А.С., Мизотин М.М. и др. // ТВТ. 2008. **46**, № 1. С. 1.
18. Ashcroft N.W. // Phys. Lett. 1966. **23**. P. 48.
19. Шарыкин Ю.И., Менделеев В.Я., Сквородько С.Н., Штильрайн Э.Э. Структура жидкого цезия. М.: ВИНИТИ, 1999. Деп. № 1356-В99. С. 22.
20. Крисько О.В., Силонов В.М., Скоробогатова Т.В., Бокарев Д.П. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2006. № 1. С. 76.
21. Крисько О.В., Силонов В.М., Скоробогатова Т.В., Бокарев В.П. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2006. № 5. С. 53.
22. Крисько О.В., Силонов В.М., Скоробогатова Т.В., Бокарев В.П. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2007. № 2. С. 30.
23. Dagens F. // J. Phys. F. 1976. № 10. P. 1801.
24. Show R.W., Jr. // J. Phys. C. 1970. **3**. P. 1140.
25. Кириллов П.Л., Денискина Н.Б. Теплофизические свойства жидкокометаллических теплоносителей: Справочные таблицы и соотношения. Обзор ФЭИ-0291. М., 2000.
26. Chi T.C. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1979. **8**, N 2. P. 339.
27. Animalu A.O.E., Heine V. // Phil. Mag. 1965. **12**. P. 1249.
28. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. М., 1968.

### The electrical resistivity of liquid cesium

O. B. Krisko<sup>1,a</sup>, V. M. Kuznetsov<sup>2,b</sup>, V. M. Silonov<sup>2</sup>, T. V. Skorobogatova<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Departament of Functional Analysis and Its Applications, Faculty of Applied Mathematics and Physics, Vladimir State University, Vladimir 600005, Russia.

<sup>2</sup>Department of Solid State Physics, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.

<sup>3</sup>Departament of Mathematics, Faculty of Science, Kigili Institute of Science and Technology, Kigili 3900, Rwanda. E-mail: <sup>a</sup>krisko1952@mail.ru, <sup>b</sup>vkuznetsov@polly.phys.msu.ru.

Using smooth non-local model pseudopotentials (SNMP) and experimental values of structure factors the temperature dependence of liquid cesium resistivity was calculated. Calculations were performed for the temperature of 35, 150, 280, 310, 470 and 630°C with SNMP parameters depending on the temperature, and without them. Parameters of SNMP liquid cesium were only from the experimental values of the free ions terms, without using any ways of fit for the resistivity of cesium. Application of SNMP significantly improved the similarity of the temperature dependence of the calculated and experimental values of liquid cesium resistivity compared with the calculations based on local model potentials.

**Keywords:** model pseudopotential, electrical transport properties, liquid alkali metals.

PACS: 71.15Dx, 65.20.De; 72.15.Cz.

Received 15 December 2010.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 2(2011).

### Сведения об авторах

1. Крисько Олег Валентинович — канд. физ.-мат. наук, доцент; e-mail: krisko1952@mail.ru.
2. Кузнецов Василий Михайлович — аспирант; тел.: (495) 939-43-08, e-mail: vkuznetsov@polly.phys.msu.ru.
3. Силонов Валентин Михайлович — докт. физ.-мат. наук, профессор, гл. науч. сотр.; тел.: (495) 939-43-08, e-mail: silonov\_v@mail.ru.
4. Скоробогатова Татьяна Васильевна — канд. физ.-мат. наук, доцент; e-mail: tankris@mail.ru.