

Factor estático de estructura para metales líquidos simples

Ó. Vázquez R. y J.N. Herrera*

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
Apartado postal 1152, 72001 Puebla, Puebla, Mexico

*e-mail: nherrera@fcfm.buap.mx

Recibido el 11 de noviembre de 1999; aceptado el 8 de febrero de 2000

Calculamos el factor estático de estructura $S(k)$ para metales líquidos usando la teoría clásica de líquidos. En este estudio usamos un modelo con dos contribuciones fundamentales, una de ellas es el potencial de esfera dura y la otra es una perturbación, representada por una cola de Yukawa. Encontramos que los parámetros usados, pueden ser obtenidos en términos de la energía de Fermi y un diámetro efectivo. En este artículo hacemos dos aplicaciones particulares, en la primera se hace el estudio de $S(k)$ para el Cs a diferentes temperaturas y finalmente encontramos $S(k)$ para el Ca y el Pb. Las predicciones teóricas son satisfactorias para estos casos.

Descriptores: Factor estático de estructura; aproximación esférica media; aproximación de Thomas-Fermi

Using the classical theory of liquids we calculate the static structure factor $S(k)$ for simple liquid metals. In this study we use a model with two fundamental contributions, one of them is the hard sphere potential and the other is a perturbation represented by a Yukawa tail. We find that the parameters used, can be obtained in terms of the Fermi Energy and an effective diameter. In this paper, we made two particular applications, in the first we study $S(k)$ for Cs at different temperatures and finally we find $S(k)$ for Ca and Pb. The theoretical predictions are successful in all cases.

Keywords: Static structure factor; mean spherical approximation; Thomas-Fermi's approximation

PACS: 61.20.Gy; 61.25.Mv

1. Introducción

El estudio de los metales líquidos es de gran importancia para los procesos metalúrgicos, pues es necesario conocer sus propiedades químicas, térmicas y reológicas [1]. El progreso en la modelación de metales líquidos ha sido lento, y las técnicas involucradas en la teoría de la mecánica estadística clásica son extensas y están basadas en el modelo de electrones casi libres [1], además se requieren de métodos numéricos para la modelación de estos sistemas.

Los sistemas de referencia más usados en las interacciones son el de esfera dura (ED) [1, 2] y el modelo clásico "One Component Plasma" (OCP) [3]. Un sistema de referencia más general es aquel donde se presenta una interacción coulombiana apantallada entre un par de esferas cargadas, esto es, un sistema compuesto por un potencial de esfera dura más una interacción perturbativa tipo Yukawa (EDY). La interacción de ED con una perturbación fue introducida por Waisman [4], a partir de la aproximación esférica media (MSA, del inglés *mean spherical approximation*). La solución analítica para el modelo de EDY en la MSA fue obtenida por Blum y Hoye [5]. Posteriormente, Ginoza [6, 7] reescribe la solución de Blum-Hoye presentando una nueva versión para la MSA de un fluido con interacción EDY, en esta nueva versión la función de correlación directa tiene una forma muy simple, la cual involucra un parámetro fundamental γ en donde están contenidas las propiedades acumulativas del sistema.

La primera aplicación del sistema de EDY para metales líquidos fue realizada por Hayter *et al.* [8], ajustando el factor estático de estructura para metales alcalinos; esos autores

concluyen que la pendiente de decaimiento que tiene el potencial es la propiedad más importante para predecir el factor estático de estructura $S(k)$, cuyo orden de magnitud es de $k_B T$.

El factor estático de estructura en el límite de longitud de onda larga para metales líquidos simples, dentro de la aproximación de la densidad media (MDA) de un sistema con interacción de esfera dura tipo Yukawa atractivo (AEDY), fue calculado por McLaughlin *et al.* [9–11]. Los resultados que ellos reportan se ajustan bien a los datos experimentales sólo en dicho límite.

En un trabajo reciente realizado por Herrera *et al.* [12], se calcula el factor estático de estructura $S(k)$ para metales líquidos modelado por el potencial de EDY en la nueva versión de la MSA, en términos del parámetro acumulativo γ . Ellos concluyen que el modelo de EDY puede ser un buen sistema de referencia en el estudio teórico de metales líquidos, reportando que el sistema con interacciones atractivas tiene limitada aplicación cerca del límite de longitud de onda larga, contrario a lo que ocurre para un sistema interaccionando con un potencial esfera dura tipo Yukawa repulsivo (REDY). Sin embargo los parámetros utilizados no tienen una interpretación física directa y son ajustados a los datos experimentales.

El objetivo de este trabajo es el de encontrar una interpretación física de los parámetros involucrados en la cerradura de Yukawa, a partir de la aproximación cuántica de Thomas-Fermi (ATF), y predecir el factor estático de estructura $S(k)$ para metales líquidos. En este trabajo mostramos resultados explícitos para Cs a diferentes temperaturas, Pb y Ca.

En la segunda sección se describe la MSA y cómo se introduce la ATF en tal aproximación. En la Sec. 3 se realiza el cálculo de $S(k)$ y $S(k = 0)$. En la Sec. 4 se determina el factor estático de estructura $S(k)$ para algunos metales líquidos como el cesio, calcio y plomo. Finalmente, en la Sec. 5 se resumen los resultados.

2. Teoría

Para el caso de un metal líquido simple, se considera que los iones están en un mar de electrones casi libres; ahora, dentro de la teoría de líquidos simples en el marco de las funciones de distribución, se define la función de distribución radial $g(\mathbf{r})$, la cual es proporcional a la probabilidad de encontrar un ion a una distancia r a partir de un ion dado. Además se introduce también la función de correlación directa $c(\mathbf{r})$, la cual está definida a través de la ecuación de Ornstein-Zernike (OZ) [13] para un sistema homogéneo:

$$h(\mathbf{r}) = c(\mathbf{r}) + \rho \int c(|\mathbf{s}|)h(|\mathbf{r} - \mathbf{s}|) ds, \quad (1)$$

en donde $\rho = N/V$, es la densidad numérica de los átomos. De (1), la función de correlación total $h(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}) - 1$ se define de acuerdo a la desviación que tiene $g(\mathbf{r})$ respecto del gas ideal, cuyo valor es de uno. La función de correlación directa en la MSA tiene una forma muy sencilla para un sistema compuesto únicamente por esferas duras con una interacción de largo alcance y un diámetro σ , esto es,

$$c(r) = -\frac{u(r)}{k_B T}, \quad r > \sigma, \quad (2)$$

donde $|\mathbf{r}| = r$, k_B es la constante de Boltzmann y T la temperatura absoluta. La Ec. (2) resulta ser una extrapolación del comportamiento asintótico de la función de correlación directa $c(r)$. Además, para el modelo de esferas duras se cumple la condición exacta de no traslape entre iones:

$$h(r) = -1; \quad r < \sigma. \quad (3)$$

El sistema de interés es un metal líquido, el cual lo modelaremos como un sistema con partículas interactuando con un potencial a pares, $u(r/\sigma)$, de esfera dura tipo Yukawa (EDY). Tal potencial se define como

$$\frac{u(x)}{k_B T} = \begin{cases} \infty & x < 1 \\ \left(\frac{\epsilon}{k_B T}\right) \exp[-z(x-1)] & x > 1 \end{cases}, \quad (4)$$

con $z \equiv \kappa\sigma$, κ es el inverso de la longitud de apantallamiento y ϵ es la intensidad de la interacción Yukawa en contacto con núcleos duros y $x = r/\sigma$.

Ahora, los metales se llegan a dar debido a que contienen muchos átomos cuando éstos tienen pocos electrones (uno o dos) ligados débilmente al núcleo. Estos electrones que son menos "localizados" forman una nube extensa de carga negativa, en la cual se embeben los iones positivos. Entonces la

nube electrónica permite que los iones se unan formando un metal [14].

Debido a que el enlace permanece aún para los líquidos, entonces los electrones de valencia deben jugar un papel muy importante en las propiedades de los metales líquidos. Sin embargo, a pesar de que la densidad electrónica es totalmente un sistema cuántico degenerado podemos rescatar cierta información.

Nuestro modelo implica una interacción coulombiana entre iones positivos. Supongamos ahora que tenemos un plasma cuántico, al cual le introducimos una carga fija extra en el centro de origen del plasma [15]; debido a esto, los electrones de valencia no solamente se encuentran sujetos al campo eléctrico que produce esta carga, sino también a una polarización de los electrones en la vecindad de la carga, donde la densidad de estados electrónicos por unidad de volumen a $T = 0$ K es

$$D(E_F^0) = \frac{(8m_e^3 E_F^0)^{1/2}}{4\pi^2 \hbar^3}, \quad (5)$$

y

$$E_F^0 = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 \rho)^{2/3}, \quad (6)$$

donde m_e es la masa de un electrón y \hbar es la constante de Planck dividida por 2π [14].

El potencial electroestático es generado por el potencial coulombiano apantallado, es decir,

$$\frac{u_1(x)}{e} = \frac{\alpha \exp(-zx)}{x} \quad x > 1, \quad (7)$$

donde $\alpha = \epsilon \exp(z)/e$.

A distancias cercanas del diámetro de la carga (esfera dura) el electrón responde a la carga externa y a una polarización de la carga inducida $e\delta n/\epsilon_0$, las cuales están conectadas por la ecuación de Poisson, escrita como

$$\nabla_x^2 \beta u(x)_1 - \beta \frac{e^2 \sigma^2}{\epsilon_0} \delta n = -\beta \epsilon \exp(z) \delta(x) \quad x > 1, \quad (8)$$

donde ϵ_0 es la constante dieléctrica, e es la carga del electrón y $\beta = 1/(k_B T)$. La carga inducida en el espacio puede ser calculada con ayuda de la aproximación de Thomas-Fermi (ATF) [15], donde

$$\beta \frac{e^2 \sigma^2}{\epsilon_0} \delta n = \beta \frac{e^2 \sigma^2}{\epsilon_0} D(E_F^0) u_1(x) = Z_{TF}^2 \beta u_1(x) \quad x > 1, \quad (9)$$

donde Z_{TF} es llamado el apantallamiento de Thomas-Fermi, y según (5) y (6) tiene la siguiente forma:

$$Z_{TF} = e \sqrt{\frac{9\eta}{\pi \sigma E_F^0 \epsilon_0}}. \quad (10)$$

La cantidad

$$\eta = \frac{\pi \rho \sigma^3}{6} \quad (11)$$

es llamada la fracción de empaquetamiento y se define como el volumen neto de las esferas duras Este último resultado nos indica cómo la carga será apantallada por los electrones, por lo tanto, el alcance del potencial efectivo entre iones debe estar asociado con este apantallamiento, así como primera aproximación podemos asumir que en el potencial efectivo promedio

$$z \equiv Z_{TF}. \tag{12}$$

Recordemos que nuestro modelo de potencial no representa una interacción física directa, sino más bien representa una interacción promedio de toda la información microscópica del sistema.

La ATF es válida siempre y cuando tenga validez la Ec. (5), además supone que la perturbación causada por la carga debe ser débil para así seguir resguardando los estados de Fermi, entonces $|\alpha| \ll E_F^0$ y Z_{TF} es esencialmente la razón entre la energía potencial promedio y la energía cinética promedio, esto significa analíticamente que

$$Z_{TF} = Z_{TF}(\rho) \propto \sqrt{\frac{e^2/(4\pi\epsilon_0\sigma)}{3E_F^0/5}} \eta^{1/2}, \tag{13}$$

y a densidades metálicas la energía potencial promedio es aproximadamente la energía cinética promedio, por lo cual consideramos que la intensidad ϵ del modelo tipo Yukawa repulsivo es de la forma

$$\epsilon \equiv \frac{3}{5} E_F^0 \eta. \tag{14}$$

Esta identificación es una aproximación razonable porque estamos considerando que el metal líquido conserva información fundamental de su estructura sólida. Finalmente haciendo

$$\frac{Q(x)}{\pi\sigma^2} = \begin{cases} Ax(x-1) + B(x-1) + C\exp(-Z_{TF}x) + D[\exp(-Z_{TF}x) - \exp(-Z_{TF})] & x < 1 \\ C\exp(-Z_{TF}x) & x > 1 \end{cases}, \tag{19}$$

donde los coeficientes en esta última ecuación son

$$A = \frac{1}{1-\eta} \left[\frac{1+2\eta}{1-\eta} (1+2\gamma) + 2Z_{TF}\gamma(\gamma+1) \right], \tag{20}$$

$$B = \frac{1}{1-\eta} \left\{ 1 - 2\gamma \left[1 + 2\gamma + \left(\frac{1+2\eta}{1-\eta} \right) \frac{2}{Z_{TF}} \right] \right\}, \tag{21}$$

$$C = -\frac{\gamma \exp(Z_{TF})}{3\eta} (\zeta_1\gamma + \zeta_0), \tag{22}$$

$$D = -\left[\frac{\gamma}{3\eta} (\alpha_0 + (\alpha_1 - 1)\gamma Z_{TF}) + C \right], \tag{23}$$

con

$$\alpha_0 = \frac{6\eta}{Z_{TF}^2(1-\eta)^2} [2(1+2\eta) + Z_{TF}(2+\eta)], \tag{24}$$

$$\alpha_1 = \frac{6\eta}{Z_{TF}^2(1-\eta)} (2 + Z_{TF}), \tag{25}$$

do la transformada de Fourier de la Ec. (8) obtenemos parcialmente la función de correlación directa en el espacio de Fourier

$$\beta\hat{u}_1(k) = \hat{c}_1(k) = \frac{4\pi\beta\epsilon[Z_{TF}\sin k + k\cos k]}{k^3\epsilon_{TF}(k)}, \tag{15}$$

con $k = K\sigma$ y $\epsilon_{TF}(k) = 1 + Z_{TF}^2/k^2$, la constante dieléctrica de una carga puntual en la ATF. En general, la función $\hat{c}(k)$ se escribe como

$$\begin{aligned} \hat{c}(k) &= \hat{c}_0(k) + \hat{c}_1(k) \\ &= 4\pi \int_{x=0}^1 c(x) \frac{\sin kx}{kx} x^2 dx + \hat{c}_1(k). \end{aligned} \tag{16}$$

Ahora la ecuación de OZ permite definir *el factor estático de estructura* $S(k)$ en términos de $\hat{c}(k)$, y la forma de resolver la ecuación de OZ para sistemas compuestos por núcleos duros es a través del formalismo de Baxter [16]. La factorización de Baxter desacopla a la ecuación de OZ, produciendo una expresión para la función de correlación directa o similarmente también para el factor estático de estructura tal como

$$[S(k)]^{-1} = 1 - \frac{6\eta}{\pi} \hat{c}(k) = \tilde{Q}(k)\tilde{Q}(-k), \tag{17}$$

donde el factor de correlación $\tilde{Q}(k)$ satisface la siguiente relación [16]:

$$\tilde{Q}(k) = 1 - \frac{6\eta}{\pi\sigma^2} \int_0^\infty dx Q(x) \exp(ikx). \tag{18}$$

Para un sistema modelado por una interacción de EDY, el factor de correlación $\tilde{Q}(k)$ fue obtenido por Blum y Hoyer [5] y simplificado por Ginoza [7]. En términos de la notación de Ginoza, y de acuerdo con los parámetros característicos de un metal líquido, $Q(x)$ tiene la siguiente forma:

el resto de las cantidades involucradas en las ecuaciones anteriores son

$$\zeta_0 = Z_{TF} - (2 + Z_{TF})\varphi_0 + \frac{\zeta_1}{Z_{TF}} \left(\frac{1+2\eta}{1-\eta} + \frac{Z_{TF}}{2} \right), \tag{26}$$

además

$$\zeta_1 = 2Z_{TF}\varphi_0 - \frac{12\eta}{1-\eta} (Z_{TF}^2\varphi_1), \tag{27}$$

$$\varphi_1 = \frac{1}{Z_{TF}^3} \left[1 - \frac{Z_{TF}}{2} - \left(1 + \frac{Z_{TF}}{2} \right) \exp(-Z_{TF}) \right], \tag{28}$$

y

$$\varphi_0 = \frac{1 - \exp(-Z_{TF})}{2}. \tag{29}$$

La existencia del parámetro acumulativo γ es una consecuencia de las relaciones de simetría que debe cumplir el factor de correlación $\tilde{Q}(k)$, además γ satisface una ecuación polinomial, la cual se obtiene de la cerradura MSA. Para obtener este parámetro es necesario resolver una ecuación de cuarto orden, en el caso monodisperso [7], dicha ecuación puede escribirse como

$$\gamma(\gamma + 1)(\zeta_1\gamma + \zeta_0)^2 = 6\eta \left(\frac{\epsilon}{k_B T} \right). \quad (30)$$

En este trabajo determinamos el factor estático de estructura $S(k)$, el cual está dado por la relación (17) para un sistema con un potencial a pares de EDY.

3. Factor estático de estructura para metales líquidos

La compresibilidad isotérmica puede ser escrita en términos del factor estático de estructura en el límite de longitud de onda larga como

$$\frac{\chi_T}{\chi_T^0} = S(k = 0), \quad (31)$$

donde $\chi_T^0 = 1/(k_B T \rho)$, es la compresibilidad para el gas ideal. La compresibilidad isotérmica en términos de la función de correlación directa está dada por la Ec. (17), para $k = 0$ entonces

$$[S(k = 0)]^{-1} = 1 - \frac{6\eta}{\pi} \hat{c}(k = 0) = [\tilde{Q}(k = 0)]^2. \quad (32)$$

Al sustituir la Ec. (19) en la (18) obtenemos que

$$\tilde{Q} = 1 + \eta \left[A + 3B - \frac{6(C + D)}{Z_{TF}} + 6D \exp(-Z_{TF}) \left(1 + \frac{1}{Z_{TF}} \right) \right]. \quad (33)$$

Finalmente, el factor estático de estructura en el límite de longitud de onda larga es

$$S(k = 0) = \frac{Z_{TF}^2}{\eta^2} \left[AZ_{TF} + 3BZ_{TF} - 6(C + D) + 6D \exp(-Z_{TF}) \left(1 + Z_{TF} + \frac{Z_{TF}}{\eta} \right) \right]^{-2}. \quad (34)$$

En general, la expresión explícita para el factor estático de estructura $S(k)$ está dado por la relación (17), la cual se escribe como

$$[S(k)]^{-1} = \frac{1}{k^4 \epsilon_{TF}^2} \left((6\eta)^2 \left[\epsilon_{TF} \left(2A \frac{\cos k - 1}{k} + (A + B) \sin k - Bk \right) - D \exp(-Z_{TF}) \left(k \epsilon_{TF} + Z_{TF} \sin k - \frac{Z_{TF}^2 \cos k}{k} \right) + (C + D)k \right]^2 + \left\{ k^2 \epsilon_{TF} - 6\eta \left[\epsilon_{TF} \left(A - B - \frac{2A \sin k}{k} + (A + B) \cos k \right) - D \exp(-Z_{TF}) \left(Z_{TF} \cos k + \frac{Z_{TF}^2 \sin k}{k} \right) + Z_{TF}(C + D) \right] \right\}^2 \right). \quad (35)$$

A pesar de tener varios términos la expresión anterior es fácilmente manipulable, pues tiene una forma realmente simple.

4. Resultados

Dado los parámetros η , $\epsilon/(k_B T)$ y Z_{TF} para la cerradura de EDY en la MSA, se calcula γ de acuerdo a la relación (30). Para un sistema con interacción atractiva ($\epsilon < 0$) existen dos soluciones reales para un rango determinado de la densidad, esto es, $\gamma_2 < \gamma_1 < 0$, donde γ_1 debe ser la solución física. Para una cola repulsiva ($\epsilon > 0$), existen también dos soluciones reales para cualquier cantidad de la densidad y un rango de apantallamiento fuerte; estas soluciones son $\gamma_2 < 0 < \gamma_1$, donde la raíz positiva es la solución física [8].

La ATF permite modificar levemente el modelo, es decir, ahora la interacción ion-ion está embebida en un gas de electrones casi libres; donde los parámetros Z_{TF} y ϵ están dados por las Ecs. (10) y (14), las cuales corresponden a interacciones repulsivas (REDY), pues suponemos un plasma

cuántico. Notemos que tanto Z_{TF} como ϵ dependen de la densidad (η) del sistema en cuestión, por lo cual el potencial de Yukawa también dependiera de η , y como se observa en las relaciones (10) y (14) estos parámetros disminuyen al descender la densidad. Este tratamiento es análogo a un estudio hecho por Shuji Munejiri *et al.* [17].

Para una interacción atractiva (AEDY), podemos suponer que el parámetro de apantallamiento es igual a Z_{TF} para mantener un equilibrio en nuestro sistema, y la cantidad ϵ del sistema AEDY debe ser diferente comparada con una interacción repulsiva (REDY), porque en general para el caso de una interacción atractiva sugiere un tratamiento en la fluctuación de la densidad de los electrones, pues éstos son los causantes de la atracción entre iones con enlace metálico.

Usando los parámetros Z_{TF} y ϵ se ha calculado el factor estático de estructura $S(k)$ y en el límite de longitud de onda larga $S(k = 0)$ [ver Ecs. (34) y (35), respectivamente] con un modelo REDY para un número importante de metales lí-

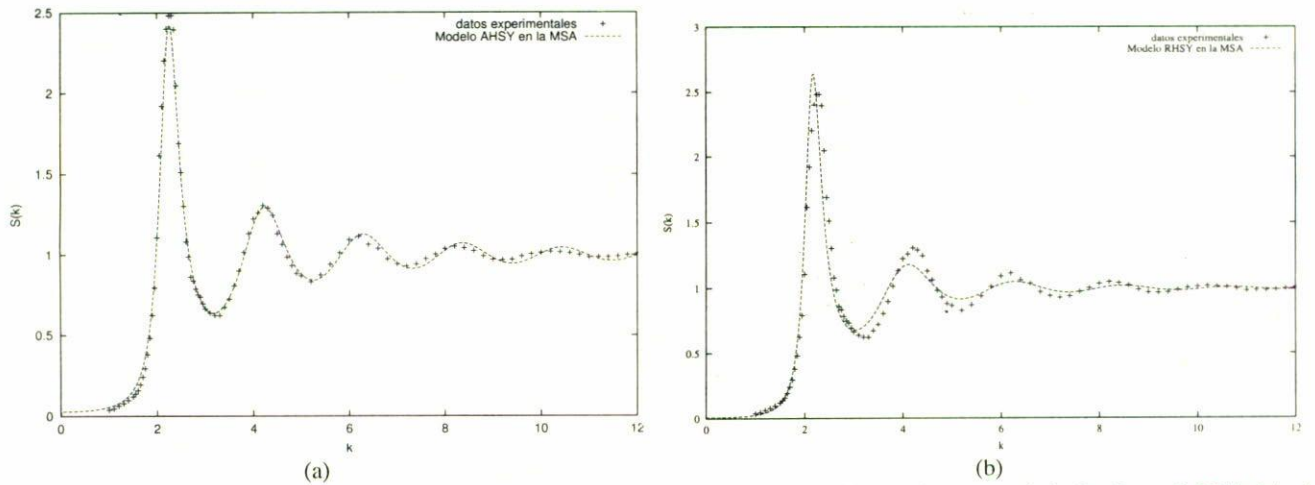


FIGURA 1. Gráficas de $S(k)$ para Pb ($T=613.16$ K), a) calculado usando AEDY en MSA. Los parámetros están indicados en la Tabla I (---); b) calculado usando REDY en MSA. Los parámetros están indicados en la Tabla II (---), los valores experimentales (*) son de Waseda [20].

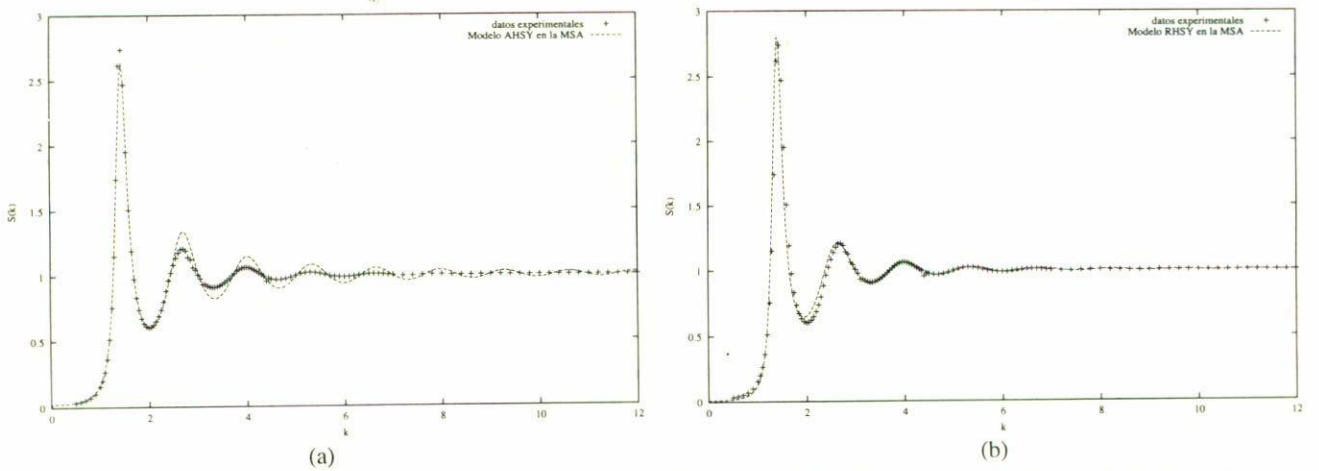


FIGURA 2. Gráficas de $S(k)$ para Cs ($T=303.16$ K), a) calculado usando AEDY en MSA. Los parámetros están indicados en la Tabla I (---); b) calculado usando REDY en MSA. Los parámetros están indicados en la Tabla II (---), los valores experimentales (*) son de Waseda [20].

TABLA I. Parámetros de AEDY y valores de $S(k=0) = S_0$

Metal	T/K	$\rho(\text{\AA}^{-3})$	η	$\epsilon/k_B T$	z	$\sigma/\text{\AA}$	$S_0(\text{AEDY})$	$S_0(\text{EXP})$
Cs	303.16	0.0083	0.467	-1.061	5.835	4.750	0.023	0.024 ^a
Ca	1123.16	0.0206	0.466	-0.908	5.013	3.510	0.024	0.035 ^a
Pb	613.16	0.0310	0.447	-0.6663 ^c	4.618	3.02	0.027	0.014 ^b

^a Hasegawa *et al.* (1988) [18];

^b McAlister *et al.* (1974) [19];

^c McLaughlin (1997) [9]

quidos simples (Na, Mg, Rb, K) a la temperatura de fusión (T_f), dando resultados semejantes a los reportados por Herrera *et al.* [12], esto es, se modelan mejor estos sistemas con una interacción repulsiva. Excepto para el Pb, donde $S(k)$ se reproduce mejor para un modelo atractivo (AEDY) con los parámetros Z_{TF} y un valor ajustado ϵ (ver Figs. 1a y 1b).

En esta ocasión presentamos dos sistemas diferentes, modelados con interacciones REDY y AEDY cerca de la tempe-

ratura de fusión, estos son el Cs y el Ca a $T_f = 303.16$ K y $T_f = 1123.16$ K, respectivamente (ver Figs. 2a, 2b, 4a y 4b), para los cuales existen muy pocos reportes en la literatura [1-3]. Además, para el Cs se predice su estructura estática a dos diferentes temperaturas mayores que la T_f para un modelo REDY (ver Figs. 3a y 3b).

Los valores que permiten modelar a los metales líquidos del Pb, Cs y Ca tanto con interacciones AEDY y REDY se

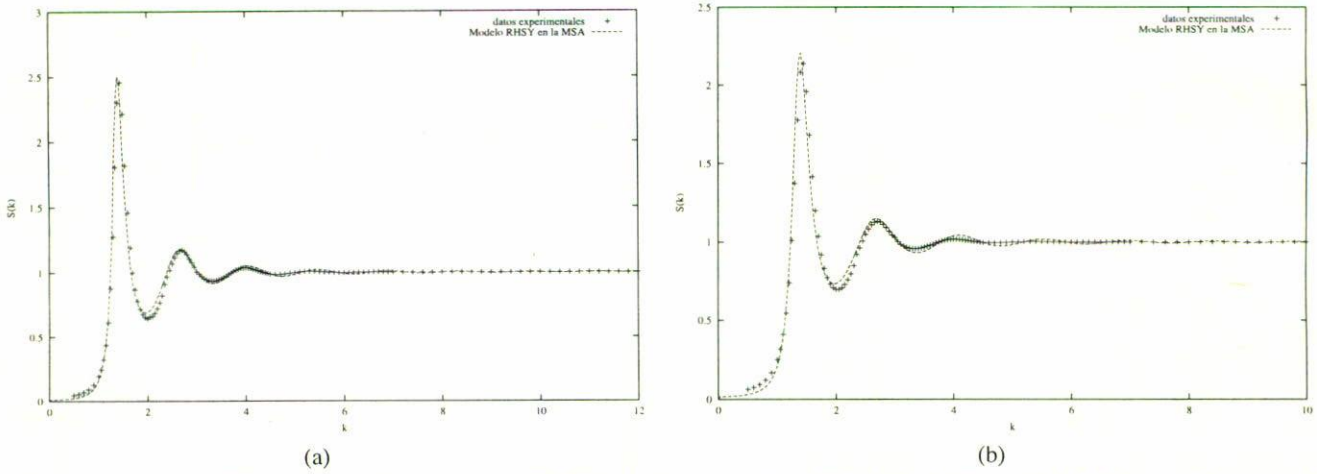


FIGURA 3. Gráficas de $S(k)$ para Cs calculado usando REDY en MSA para a) $T = 373.16$ K y b) $T = 473.16$ K. Los parámetros están indicados en la Tabla III (---), los valores experimentales (*) son de Waseda [20].

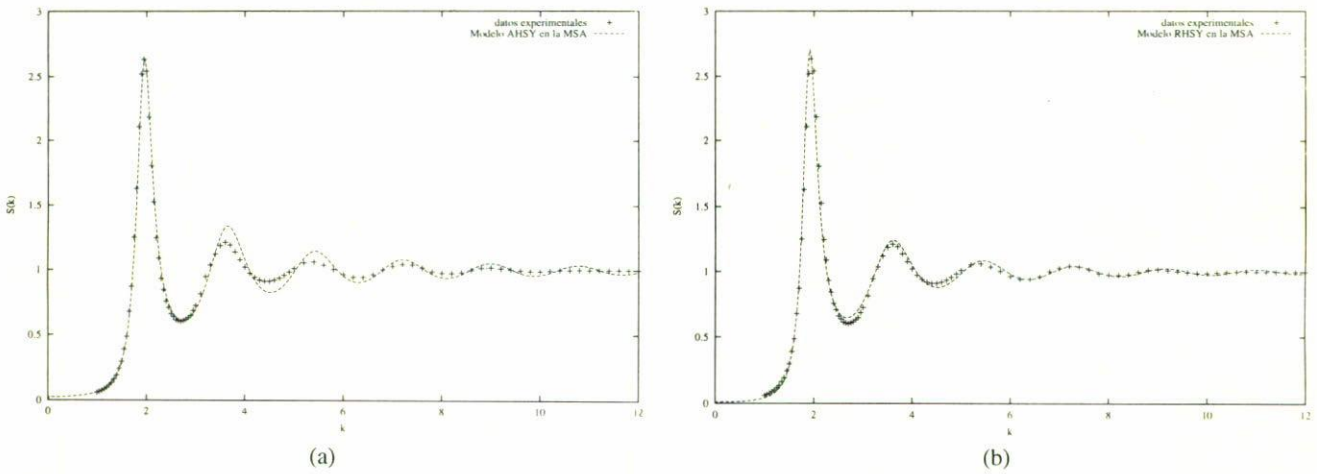


FIGURA 4. Gráfica de $S(k)$ para Ca ($T=1123.16$ K), a) calculado usando AEDY en MSA. Los parámetros están indicados en la Tabla I (---), b) calculado usando REDY en MSA. Los parámetros están indicados en la Tabla II (---), los valores experimentales (*) son de Waseda [20].

TABLA II. Parámetros de REDY y valores de $S(k = 0) = S_0$

Metal	T/K	$\rho(\text{\AA}^{-3})$	η	$\epsilon/k_B T$	z	$\sigma/\text{\AA}$	$S_0(\text{AEDY})$	$S_0(\text{EXP})$
Cs	303.16	0.0083	0.371	12.782	5.405	4.40	0.0096	0.024 ^a
Ca	1123.16	0.0206	0.420	7.129	4.842	3.390	0.0106	0.035 ^a
Pb	613.16	0.0310	0.360	14.716	4.297	2.810	0.0294	0.014 ^b

^a Hasegawa *et al.* (1988) [18]; ^b McAlister *et al.* (1974) [19]

despliegan en las Tablas I, II y III. Los datos experimentales de estado (ρ, T) y de estructura son tomados de Waseda [20]. Aclaremos que para el modelo AEDY se ha utilizado el parámetro Z_{TF} y se propone el valor de ϵ de tal forma que se ajuste lo mejor posible a los resultados experimentales, pero dicho ajuste no tiene, por el momento, una justificación física.

De los resultados obtenidos podemos afirmar que en REDY es posible ajustar el diámetro efectivo para reproducir adecuadamente los resultados experimentales de $S(k)$ para el Cs y Ca. Por otro lado, para el modelo AEDY no es posible ajustar los parámetros y obtener resultados similares, sin embargo en límite de longitudes de onda larga AEDY da una predicción relativamente buena (ver también [12]). De acuer-

TABLA III. Parámetros de REDY y valores de $S(k=0) = S_0$ para el Cs a $T > T_f$

T/K	$\rho(\text{\AA}^{-3})$	η	$\epsilon/k_B T$	z	$\sigma/\text{\AA}$	$S_0(\text{REDY})$
373.16	0.0081	0.363	9.991	5.384	4.40	0.0335
473.16	0.0079	0.351	7.467	5.355	4.40	0.0403

do a los parámetros dados por la ATF se logra mejorar la aplicación del modelo atractivo (AEDY) más allá del límite de longitud de onda larga [12], pues su alcance llega hasta el primer mínimo de $S(k)$ experimental, como se observa en las figuras.

Es importante enfatizar que no es posible hacer la comparación directa de los factores estáticos de estructura obtenido por REDY y AEDY ya que los parámetros usados, en principio, obedecen a situaciones físicamente diferentes, este es el caso del parámetro de interacción ϵ .

5. Conclusiones

Este trabajo viene a completar el trabajo anterior de Herrera *et al.* [12], donde se usó la MSA para calcular el factor estático de estructura sin justificación física de los parámetros usados. De acuerdo a los resultados presentados, se tiene que la nueva versión para la MSA de un sistema con interacción de esfera dura más un potencial tipo Yukawa bajo una aproximación cuántica, como la ATF, puede ser una buena teoría de referencia en el estudio teórico de los metales líquidos. En general se observa como el sistema de AEDY tiene limitada

aplicación, en contraposición con lo que ocurre para el caso de REDY. En los casos de cesio y calcio en estado líquido se tiene una predicción satisfactoria, los cuales únicamente han podido ser predichos por técnicas más complejas [17]. Al tratar de interpretar los parámetros involucrados en esta teoría, pensamos que los electrones de valencia deben jugar un papel primordial en el entendimiento de los metales líquidos, y que de alguna manera se tiene una presencia importante en tales parámetros, por lo tanto, es posible mejorar tanto los resultados repulsivos como atractivos, al modificar el diámetro σ , ya que como se observa este es el único parámetro ajustable en la ATF, y el cual lo hemos dejado con un único valor; esto es viable porque de acuerdo a los diversos trabajos que se han realizado respecto de los potenciales efectivos para los metales líquidos [1] se observa que al variar la temperatura varía la densidad, y por lo tanto cambia notablemente el mínimo de esos potenciales. Creemos que nuestra predicción puede mejorarse si se considera una combinación entre potenciales tipo Yukawa repulsivos y atractivos, así como considerar las interacciones de los electrones.

Resultados recientes muestran que es posible calcular las propiedades estructurales de los metales líquidos por otros caminos. Debido a que la analogía no es inmediata, creemos que será un problema de gran interés futuro el buscar la conexión entre nuestra aproximación y la de otros tratamientos [21].

Agradecimiento

Este trabajo fue apoyado por el proyecto 1806P-E de CONACYT.

1. W.H. Young, *Phys* **55** (1992) 1769.
2. J. Hafner, *From Hamiltonians to Phase Diagrams*, (Springer, Berlin, 1987).
3. S. Ono and I. Yokoyama, *J. Phys. F: Met. Phys* **14** (1984) 2909.
4. E. Waisman, *Mol. Phys.* **25** (1973) 45.
5. L. Blum and J.S. Hoye, *J. Stat. Phys.* **19** (1978) 317.
6. M. Ginoza, *J. Phys. Soc. Japan* **55** (1986) 95.
7. M. Ginoza, *Mol. Phys.* **71** (1990) 145.
8. J.B. Hayter and J. Penfold, *Mol. Phys.* **42** (1981) 109.
9. L.I. McLaughlin, *Mol. Phys.* **91** (1997) 377.
10. L.I. McLaughlin and W.H. Young, *J. Phys. F* **12** (1982) 245.
11. L.I. McLaughlin and K.N. Kanna, *Phys. Chem. Liq.* **27** (1994) 199.
12. J.N. Herrera, P.T. Cummings, and H. Ruíz-Estrada, *Mol. Phys.* **96** (1999) 835.
13. L.S. Ornstein and F. Zernike, *Proc. Akad. Sci.* **17** (1914) 1637.
14. Ibach Harald and Lüth, *Solid-State Physics* (Springer-Verlag, New York, 1990).
15. N.F. Mott and H. Jones, *Theory of Metals and Alloys* (Dover, New York, 1936).
16. R.J. Baxter, *Aust. J. Phys.* **21** (1968) 563.
17. S. Munejiri, F. Shimojo, K. Hoshino, and M. Watabe, *J. Phys. Condens. Matter* **9** (1997) 3303.
18. M. Hasegawa *et al.*, *J. Phys. F: Met. Phys.* **18** (1988) L 27.
19. S.P. McAlister, E.D. Crozier, and J.F. Cochran, *Can. J. Phys.* **52** (1974) 1847.
20. Y. Waseda, *The Structure of Non-Crystalline Materials* (McGraw-Hill, New York, 1980).
21. A.A. Louis and N.W. Ashcroft, *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998) 4456.