

КИЇВСЬКИЙ УНІВЕРСИТЕТ ім. ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

На правах рукопису

КАЛЕНИК ОЛЕКСАНДР ОЛЕКСАНДРОВИЧ

УДК 539.2

**БАГАТОЗОННА 3-D МОДЕЛЬ РОЗРАХУНКУ
ЕЛЕКТРОННИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ СПЛАВІВ.**

01.04.07. - фізика твердого тіла

Автореферат

дисертації на здобуття вченого ступеня
кандидата фізико - математичних наук

Київ - 1995 р.

ЛННБ України ім.В.Стефаника



00759857 (+)

КИЇВСЬКИЙ УНІВЕРСИТЕТ ім. ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

На правах рукопису

КАЛЕНИК ОЛЕКСАНДР ОЛЕКСАНДРОВИЧ

УДК 539.2

**БАГАТОЗОННА S-D МОДЕЛЬ РОЗРАХУНКУ
ЕЛЕКТРОННИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ СІЛАВВ.**

01.04.07. - фізика твердого тіла

Автореферат

дисертації на здобуття вченого ступеня
кандидата фізико - математичних наук

Київ - 1995 р.

Дисертація є рукописом.

Робота виконана на кафедрі фізики металів фізичного
факультету Київського університету ім. Тараса Шевченка

Наукові керівники: член - кор. НАН України, доктор фізико-математичних
наук, професор МАКАРА Володимир Арсенійович
доктор фізико-математичних наук, професор
РЕПЕЦЬКИЙ Станіслав Петрович

Офіційні опоненти:

1. Доктор фізико-математичних наук, професор, зав. відділом Інституту фізики конденсованих систем НАН України ГУРСЬКИЙ Зиновій Олександрович (м. Львів);
2. Доктор фізико-математичних наук, зав. відділом Інституту проблем матеріалознавства НАН України МАЙБОРОДА Володимир Петрович (м.Київ).

Провідна установа: Львівський державний університет ім. І. Я. Франка
(м. Львів).

Захист відбудеться 22 квітня 1996 року на засіданні спеціалізованої
вченої ради Д.01.01.22. при Київському університеті ім. Тараса Шевченка
за адресою : 252127, м.Київ-127, просп. акад. Глушкова, 6, аудиторія N200

З дисертацією можна ознайомитися в науковій бібліотеці Київського
університету ім. Тараса Шевченка за адресою: м.Київ, вул.
Володимирська, 62.

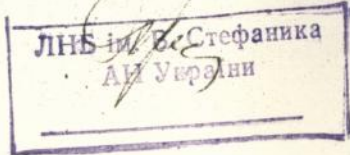
Автореферат розісланий

20 березня 1996 р.

Вчений секретар

спеціалізованої ради

Б.А. Схріменко



ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ.

Актуальність теми.

Невпорядковані системи є одними з важливих об'єктів теоретичних та експериментальних досліджень сучасної фізики твердого тіла. Фізичні властивості реальних твердих тіл - металів, напівпровідників, сплавів, надпровідників, діелектриків можуть бути описані коректно лише при врахуванні різноманітних відхилень в кристалічній структурі від ідеальної. Особливу увагу вчених привертають надпровідники, напівпровідники, сплави на основі переходних та благородних металів завдяки їх незвичайним електричним, магнітним та фізико-хімічним властивостям. Порушення регулярності в розташуванні атомів в вузлах кристалічної ґратки призводить до втрати потрібних властивостей та набуття інших. Одною з задач фізики невпорядкованих систем є прогнозування властивостей реальних фізичних тіл. Для успішного вирішення цієї задачі потрібне моделювання фізичних процесів, їх аналітичне та чисельне дослідження, яке дасть змогу краще зрозуміти природу виникнення тих чи інших ефектів в твердих тілах.

Метою роботи є:

-розвиток модельних досліджень енергетичного спектру електронів та електропровідності сплавів з врахуванням статистичних кореляцій в розподілі атомів, тобто ближнього та дальнього порядків, а також кореляцій, обумовлених інтерференцією в розсіянні електронів різними атомами;

-вивчення основних закономірностей впливу ближнього та дальнього упорядкування на електронні властивості бінарних сплавів в багатозонному наближенні (s-d модель).

Наукова новизна результатів:

- одержані рівняння для розрахунку енергетичного спектру електронів та

електропровідності бінарних сплавів з врахуванням статистичних кореляцій в розподілі атомів в багатозонному наближенні (модель s-d зон);

- досліджено основні закономірності впливу упорядкування на електронні властивості бінарних сплавів заміщення в багатозонному наближенні;

- виявлено відмінності електронного спектру бінарного сплаву в багатозонній s-d-моделі від аналогічного спектру в однозонному наближенні.

Практична цінність результатів:

- за допомогою одержаних рівнянь в багатозонному наближенні було розраховано густину електронних станів бінарного сплаву та досліджено вплив процесів упорядкування на електронний спектр та електропровідність;

- виявлено утворення провалів на кривій густини електронних станів бінарного сплаву при близькому упорядкуванні в багатозонній моделі;

- в багатозонній s-d-моделі, на відміну від однозонної, при упорядкуванні сплаву в енергетичному спектрі електронів виникає дві квазіщільності, які пов'язані з парціальними внесками s- і d- електронних станів;

- отримані рівняння для розрахунку густини електронних станів можуть бути застосовані для розрахунку енергетичних спектрів інших елементарних збурень, а на їх основі багатьох кінетичних властивостей сплавів;

- з появою кореляції в розташуванні атомів (ближній порядок) спостерігається аномальна поведінка електропровідності в багатозонній моделі, якщо рівень Фермі для модельного бінарного сплаву знаходиться в межах утворених провалів;

- проведено порівняння експериментальних та теоретичних значень залишкового питомого електроопору сплаву Ni-Cr для різних концентрацій компонент в багатозонному наближенні і виявлено їх добре узгодження.

На захист виносяться:

1. Багатозонна s-d-модель розрахунку густини електронних станів та електропровідності бінарного сплаву з врахуванням кореляцій в розташуванні атомів.
2. При ближньому упорядкуванні відбувається перерозподіл густини електронних станів та виникнення характерних провалів, на місці яких виникають квазіциліни при встановленні дальнього порядку.
3. Характер зміни електропровідності сплавів при впорядкуванні суттєво залежить від положення рівня Фермі відносно квазіцилін, що виникають в енергетичному спектрі електронів.

Апробація роботи:

Основні результати дисертаційної роботи доповідалися та обговорювалися на міжнародній конференції:

European research conference " Electronic Structure of Solids. Dynamics and excitations". August 27- September 1, 1994. Gausdal, Norway.

По темі дисертації опубліковано 5 робіт.

Дисертаційна робота складається з вступу, 4-х глав, висновків, списку цитованої літератури з 97 найменувань. Робота викладена на 166 сторінках, включаючи 45 рисунків та 1 таблицю.

КОРОТКИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтовано актуальність тематики проведених досліджень, показано наукову новизну і практичну цінність дисертаційної роботи, сформульовано положення, що виносяться на захист, висвітлено об'єм та структуру роботи.

У першій главі проведено огляд виконаних робіт, які стосуються досліджень електронної структури твердих тіл та дають можливість вивчення їх кінетичних властивостей. Серед багатьох методів опису електронних

властивостей сплавів найбільш часто застосовувалися метод псевдопотенціалу, метод приєднаних плоских хвиль (ППХ), метод приєданого простору. Серед сучасних методів можна виділити метод проєкційного оператора. Але найбільши: успіхів при вивченні фізичних властивостей сплавів вдалося досягти завдяки застосуванню наближення когерентного потенціалу (НКП) [1,2]. В багатьох роботах [1,3] дослідження властивостей неупорядкованих систем проводилися за допомогою теорії багатократного розсіяння, яка базується на методі функцій Гріна [4]. Згідно цій теорії гамільтоніани збуджень всіх типів в неупорядкованих кристалах (електронів, фононів, екситонів, магнонів) можна звести до одного виду. Для цього вказані гамільтоніани записують в вузловому зображенні.

Для розрахунку одно- та двочастинкової функцій Гріна в роботі використовується метод кластерного розкладу для повної T-матриці розсіяння [5]. За нульове наближення в цьому методі вибирається НКП, а потім знаходяться внески процесів розсіяння на кластерах з трьох, і т.д. атомів. Внески процесів розсіяння на кластерах з трьох і більшої кількості атомів зменшуються зі збільшенням числа атомів в кластері за деяким малим параметром γ [6]. При отриманні рівнянь для обчислення густини електронних станів та електропровідності сплавів застосовують діаграмну техніку, аналогічно [7]. Таким чином для усередненої T-матриці розсіяння в \mathbf{k} -зображенні одержимо:

$$\langle T \rangle_{\mathbf{k}}^{ij} = \sum_{(j_1 m) \neq (i 0)} (A_m^{ij_1})^{-1} (x_i x_{j_1} y_i y_{j_1} a_m^{ij_1} a_{-m}^{j_1 i} + \varepsilon_m^{ij_1}) \times \\ \times \left\{ [(x_i - y_i) + x_i y_i (x_{j_1} - y_{j_1}) a_m^{ij_1} a_{-m}^{j_1 i}] a_m^{ij_1} a_{-m}^{j_1 i} (\tau_{iB} - \tau_{iA}) \delta_{ij} + \right. \\ \left. + [1 - x_i x_{j_1} y_i y_{j_1} (a_m^{ij_1} a_{-m}^{j_1 i})^2] a_m^{ij_1} (\tau_{j_1 B} - \tau_{j_1 A}) e^{i\vec{k}\vec{r}_m} \delta_{j_1 j} \right\}, \quad (1)$$

$$\text{де } A_m^{ij} = (1 - y_i y_j a_m^{ij} a_{-m}^{ji}) (1 + x_j y_i a_m^{ij} a_{-m}^{ji}) (1 + x_i y_j a_m^{ij} a_{-m}^{ji}) \times \\ \times (1 - x_i x_j a_m^{ij} a_{-m}^{ji}), \quad a_m^{ij} \equiv a_{0m}^{ij} = (\tau_{iB} - \tau_{iA}) \tilde{G}_{0m}^{ij}.$$

Матричні елементи функції Гріна ефективного середовища визначаються виразом

$$\tilde{G}_{nm}^{ij} = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{G}_{\mathbf{k}}^{ij} e^{i\mathbf{k} \cdot (\vec{r}_n + \vec{\rho}_i - \vec{r}_m - \vec{\rho}_j)} \quad (2)$$

де матриця $\|\tilde{G}_{\mathbf{k}}^{ij}\|$ функції Гріна в \mathbf{k} -зображенні є матрицею, оберненою по відношенню до $\|(E - \sigma_i) \delta_{ij} - h_{\mathbf{k}}^{ij}\|$, $h_{\mathbf{k}}^{ij}$ - фур'є-образ інтегралу перескоку, \mathbf{r}_n - визначає початок координат n -ої елементарної комірки впорядкованого сплаву, $\vec{\rho}_i$ - положення вузла i -ої підґратки в елементарній комірці, N - число елементарних комірок. Хвильовий вектор \mathbf{k} змінюється в межах першої зони Бріллюена впорядкованого сплаву. Оскільки за нульове наближення вибрано середовище, яке характеризується когерентним потенціалом, накладається вимога, щоб внески в конфігураційно усереднену T -матрицю процесів розсіяння на кожному окремому вузлі дорівнювали нулеві, тобто

$$\langle \tau_{in} \rangle = 0, \quad \langle \tau_{in} \rangle = x_i \tau_{iA} + y_i \tau_{iB} \quad (3)$$

$$\tau_{i\lambda} = (1 - (g_{\lambda} - \sigma_i) \tilde{G}_{00}^{ii})^{-1} (g_{\lambda} - \sigma_i), \quad (\lambda = A, B)$$

Ця вимога призводить до рівняння для когерентного потенціалу i -ої підґратки

$$\sigma_i = \langle g_{in} \rangle - (g_A - \sigma_i) \tilde{G}_{00}^{ii} (g_B - \sigma_i), \quad (4)$$

$$\langle g_{in} \rangle = x_i g_A + y_i g_B.$$

За відсутності дальнього порядку ($\eta=0$) сплав має просту ґратку. В цьому випадку вирази для матричних елементів гамільтоніану та функції Гріна,

а також когерентного потенціалу не мають індексів підґраток, а вираз для конфігураційно усередненої Т-матриці розсіяння спрощується. Параметри парних міжатомних кореляцій в формулі (1) виражаються через параметри ближнього порядку Каулі [8] $\alpha_m^{ij} = \varepsilon_m / (xy)$.

Відносні величини неврахованих внесків процесів розсіяння до $\langle T \rangle$ -матриці (1) визначаються параметрами

$$\gamma_{0m}^{ij} = \left| \sum_{((j_1 m_1) \neq (j m), (i 0))} x_{j_1} y_{j_1} (a_{m_1 m}^{j_1 j})^2 \right| \quad (5)$$

Вираз (1) для $\langle T \rangle$ -матриці розсіяння справедливий при умові малості величин γ_{0m}^{ij} , які відіграють роль малих параметрів теорії. Іншими малими параметрами є також параметри міжатомних кореляцій ε_m^{ij} . Як показують дослідження, малий параметр γ_{0m}^{ij} (5) залишається малим майже при всіх значеннях енергії за виключенням вузьких відрізків на краях спектру.

У другій главі було проведено детальне вивчення області збіжності кластерного розкладу для повної Т-матриці розсіяння, визначено границі застосування вказаного методу, можливості їх розширення та розроблено чисельний метод обчислення матричних елементів функції Гріна. Вказане розширення можна зробити, якщо застосувати самоузгоджений кластерний розклад з врахуванням ближнього та дальнього порядку. Суть цього методу полягає в узгодженні значення когерентного потенціалу при обчисленні матричних елементів функції Гріна, яке найкраще задовольняє умові збіжності кластерного розкладу. Як показано в роботі [6] застосування самоузгодженого методу розкладу Т-матриці розсіяння при обчисленні матричних елементів функції Гріна призводить до зменшення області поганої збіжності ($\gamma \rightarrow 1$), яка

дорівнює $10^{-4} - 10^{-3}$ від напівширини енергетичної зони ω на краях спектру, на 15-20% порівняно з несамоузгодженим методом.

В третій главі досліджено вплив процесів ближнього та дальнього упорядкування на густину електронних станів, і як наслідок, зміну електропровідності модельних бінарних сплавів в однозонному наближенні. Вираз для густини електронних станів без врахування процесів розсіяння на кластерах з трьох і т.д. атомів набуває вигляду [9]:

$$g(E) = -\frac{2}{\pi v} \text{Im} \left\{ \sum_i \tilde{G}_{00}^{ii} + \sum_{i,(jm)(i0)} (A_m^{ij})^{-1} (x_i x_j y_i y_j a_m^{ij} a_{-m}^{ij} + \varepsilon_m^{ij}) \times \right. \\ \times \left\{ [x_i - y_i + x_i y_i (x_j - y_j) a_m^{ij} a_{-m}^{ij}] a_m^{ij} a_{-m}^{ij} (\tau_{jB} - \tau_{iA}) (\tilde{G}^2)_{00}^{ii} + \right. \\ \left. \left. + [1 - x_i x_j y_i y_j (a_m^{ij} a_{-m}^{ij})^2] a_m^{ij} (\tau_{jB} - \tau_{iA}) (\tilde{G}^2)_{m0}^{ii} \right\} \right\}, \quad (6)$$

$$\text{де } A_m^{ij} = (1 - y_i y_j a_m^{ij} a_{-m}^{ij}) (1 + x_j y_i a_m^{ij} a_{-m}^{ij}) (1 + x_i y_j a_m^{ij} a_{-m}^{ij}) (1 - x_i x_j a_m^{ij} a_{-m}^{ij})$$

Перший доданок у виразі (6) відповідає НКП. Вираз (6) спрощується, якщо не враховувати дальній порядок:

$$g(E) = -\frac{2}{\pi} \text{Im} \left\{ \tilde{G}_{00} + xy (\tau_B - \tau_A) \times \right. \\ \left. \times \sum_{m \neq 0} \frac{(xy a_m a_{-m} + \alpha_m) [a_m (1 - xy a_m a_{-m}) (\tilde{G}^2)_{m0} + (x - y) a_m a_{-m} (\tilde{G}^2)_{00}]}{(1 - x^2 a_m a_{-m}) (1 + xy a_m a_{-m}) (1 - y^2 a_m a_{-m})} \right\} \quad (7)$$

В рівнянні (7) другий доданок відповідає за внески статистичних кореляцій в процесі багатократного розсіяння на кластерах, що складаються з двох атомів.

Обчислення матричних елементів функції Гріна, які входять до виразів (6), (7) було проведено для реальної залежності енергії електрона від хвильового вектора в межах першої зони Бріллюєна бінарних сплавів з кристалічними ґратками типу ОЦК та ГЦК.

Залежність густини електронних станів для різних значень параметру міжатомних кореляцій ε_m^{η} ГЦК сплавів наведена на рис. 1. З представленого графіку видно, що при появі ближнього упорядкування на кривій енергетичної залежності густини електронних станів виникає характерний провал, який при збільшенні ступеню ближнього порядку зростає. При встановленні дальнього порядку, коли $\eta \rightarrow 1$, в енергетичному спектрі електронів на місці провалу виникає щілина (рис. 2).

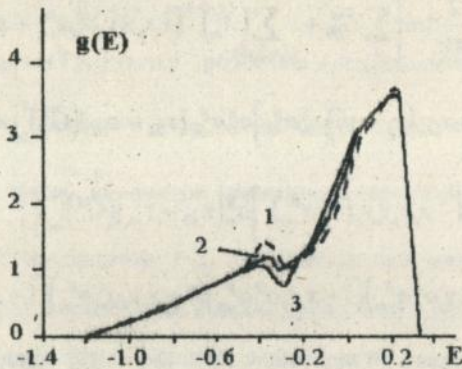


Рис. 1. Густина електронних станів неупорядкованих сплавів з ГЦК-граткою для різних значень параметру міжатомних кореляцій ε_0^{12} :
1- $\varepsilon_0^{12} = 0$; 2- $\varepsilon_0^{12} = -0.03$; 3- $\varepsilon_0^{12} = -0.05$.

Рівняння для обчислення електропровідності модельного бінарного сплаву при енергії Фермі μ має вигляд [9]:

$$\sigma_{\alpha\alpha} = -\frac{e^2 \eta}{2\pi v \Omega_0} \operatorname{Re} \sum_l \left\{ \left[g_{\alpha}(\tilde{G} - \tilde{G}^+) g_{\alpha}(\tilde{G} - \tilde{G}^+) \right]_{00}^{\eta} + \right. \\ \left. + \sum_{(jm) \neq (i0)} (A_m^{\eta})^{-1} (x_i x_j y_i y_j a_m^{\eta} a_{-m}^{\eta} + \varepsilon_m^{\eta}) \times \right.$$

$$\begin{aligned}
& \times \left\{ 2 \left[(x, -y,) + x, y, (x, -y,) a_n^y a_n^x \right] a_n^y a_n^x \times (\tau_{nB} - \tau_{nA}) \left[\tilde{G} \vartheta_n (\tilde{G} - \tilde{G}^*) \vartheta_n \tilde{G} \right]_{0n}^y \right. \\
& + \left. \left[1 - x, x, y, y, (a_n^y a_n^x)^2 \right] 2 a_n^x (\tau_{nB} - \tau_{nA}) \times \left[\tilde{G} \vartheta_n (\tilde{G} - \tilde{G}^*) \vartheta_n \tilde{G} \right]_{0n}^y - \right. \\
& - (\tau_{nB} - \tau_{nA}) (\tau_{nB} - \tau_{nA}) \times \left. \left[\tilde{G} \vartheta_n \tilde{G} \right]_{0n}^y \left[\tilde{G} \vartheta_n \tilde{G} \right]_{0n}^y \right\} + 4 \sum_{(j_m) \neq (0)} \operatorname{Re} \left(A_m^y \right)^{-1} \times \\
& \times \left(x, x, y, y, a_n^y a_n^x + \varepsilon_n^y \right) \left[1 - x, x, y, y, (a_n^y a_n^x)^2 \right] \times a_n^y / (a_n^y + a_n^{y*}) \times \\
& \times (\tau_{nB} - \tau_{nA})^* (\tau_{nB} - \tau_{nA}) \left. \left[\tilde{G} \vartheta_n \tilde{G} \right]_{0n}^y \times \left[\tilde{G}^* \vartheta_n \tilde{G} \right]_{0n}^y \right\}_{E=\mu} \quad (8)
\end{aligned}$$

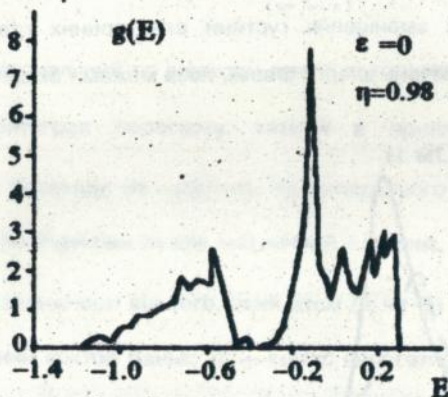


Рис. 2. Густина електронних станів в порядкуваного бінарного спливу з ГЦК-ґраткою.

Величини A_m^y такі самі як і в виразі (6). За відсутності дальнього порядку вираз для електропровідності спрощується, за рахунок зникнення залежності (8) від індексів підґраток. Значення μ знаходилося з виразу

$$2z = \int_{-\infty}^{\mu} g(E) dE, \quad (9)$$

в якому z - електронна концентрація.

На рис. 3 представлена залежність питомого електроопору, величина якого обернена до електропровідності (ρ), від значення енергії Фермі для модельного бінарного сплаву з кристалічною ґраткою типу ГЦК. Концентрація компонент А та В відповідає стехіометричному складу- $y=0.25$; $x=0.75$. Параметр розсіяння $\delta = -0.5$. Значення параметру ближнього порядку приймає два значення 0 та -0.02 . Значення електроопору залежить від значення енергії Фермі μ . Тому, якщо для сплаву з певною величиною Z значення μ потрапляє в інтервал $[-0.6, -0.2]$ можна спостерігати збільшення електроопору при упорядкуванні (суцільна крива). Область аномальної поведінки на рис. 3 утворюється за рахунок зменшення густини електронних станів для ГЦК сплавів на рис. 1. Для значень енергії Фермі, поза межами вказаного

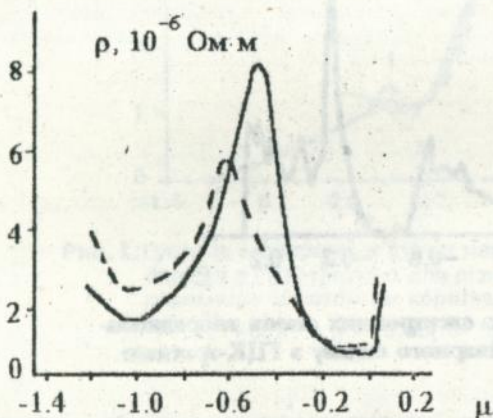


Рис. 3. Залежність залишкового питомого електроопору неупорядкованого сплаву з ГЦК-ґраткою від значення енергії Фермі.

провалу, поведінка електроопору є нормальною, тобто при упорядкуванні електроопір сплаву зменшується. При дальньому упорядкуванні в енергетичному спектрі виникає щілина (рис. 2). В ідеальному випадку це

призводить до збільшення електроопору модельного сплаву на декілька порядків, тобто відбувається зміна властивостей від металічних до діелектричних.

В четвертій главі розвинута багатозонна s - d модель розрахунку електронних властивостей бінарних сплавів. Гамільтоніан, що описує в багатозонній s - d -моделі сильного зв'язку одноелектронні стани бінарного сплаву, представимо у вигляді:

$$H = \sum_{\alpha\beta, (in)} |\alpha in\rangle v_{in}^{\alpha\beta} \langle\beta in| + \sum_{\substack{\alpha\beta, (in) \\ (jm) \neq (in)}} |\alpha in\rangle h_{injm}^{\alpha\beta} \langle\beta jm|, \quad (10)$$

де $h_{injm}^{\alpha\beta}$ — недіагональний по індексам вузлів ґратки (in) матричний елемент гамільтоніану (інтеграл перескоку, котрий в прийнятому тут наближенні діагонального безладдя не залежить від випадкового розподілу атомів; $v_{in}^{\alpha\beta}$ — діагональний по індексам вузлів матричний елемент, який приймає значення $v_A^{\alpha\beta}$ или $v_B^{\alpha\beta}$ в залежності від того, який атом (А чи В) знаходиться в (in) вузлі; $|\alpha in\rangle$ — власний вектор Ваньє; α — індекс енергетичної зони; l — номер підґратки; n — номер вузла підґратки. Для кристалів кубічної симетрії індекси α, β приймають значення $\alpha = (s, t, e)$, де індекс s позначає стан s -зони, а індекси t, e — відповідно стани з трьох- і двохкратно виродженими значеннями енергії d -зони [1]. Для даних кристалів матриці $v_{A(B)}$ мають вигляд

$$v_{A(B)} = \begin{pmatrix} v_{A(B)}^{ss} & v_{A(B)}^{st} & \dots & v_{A(B)}^{se} \\ v_{A(B)}^{ts} & v_{A(B)}^{tt} & \dots & v_{A(B)}^{te} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{A(B)}^{es} & v_{A(B)}^{et} & \dots & v_{A(B)}^{ee} \end{pmatrix} \quad (11)$$

Матричні елементи функції Гріна ефективного середовища визначаються виразом

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{nm}^{\alpha\beta} &= \langle \alpha | n | \tilde{G} | \beta | j m \rangle = \\ &= N^{-1} \sum_k \tilde{G}_k^{\alpha\beta} \exp\{i\vec{k}(\vec{r}_n + \vec{\rho}_i - \vec{r}_m - \vec{\rho}_j)\} \quad (12) \end{aligned}$$

де величини $\tilde{G}_k^{\alpha\beta}$, визначаються функцією Гріна в k -представленні, які є елементами матриці $\| (z\delta_{\alpha\beta} - \sigma_i^{\alpha\beta})\delta_{ij} - h_k^{\alpha\beta} \|^{-1}$. Густина електронних станів, що припадає на один атом, дорівнює [10]:

$$g(E) = -\frac{2}{N\pi V} \text{Im} \sum_k \text{Sp} \langle G \rangle_k^{\alpha\alpha} = -\frac{2}{N\pi V} \text{Im} \sum_{\alpha k} \langle G \rangle_k^{\alpha, \alpha_i} \quad (13)$$

Вираз (13) для усередненої функції Гріна справедливий при умові малості

величини
$$\gamma_{i0jm}^{\alpha\alpha} = \gamma_{i0jm}^{(1)\alpha\alpha} \times \left| 1 + \sum_{\beta \neq \alpha} (v_B^{\alpha\beta} - v_A^{\alpha\beta})(v_B^{\beta\alpha} - v_A^{\beta\alpha})(v_B^{\alpha\alpha} - v_A^{\alpha\alpha})^{-2} \right|,$$
 які

відіграють роль малих параметрів теорії. Величини $\gamma_{i0jm}^{\alpha\alpha}$ є малими при умові

малості параметрів
$$\gamma_{i0jm}^{(1)\alpha\alpha} = \left| \sum_{(j_1, m_1) \neq (i), (i0)} x_{j_1} y_{j_1} (a_{m, m}^{\alpha\alpha j_1 j})^2 \right|$$
 однозонної моделі і па-

раметрів s - d -гібридизації $(v_B^{\alpha\beta} - v_A^{\alpha\beta})(v_B^{\alpha\alpha} - v_A^{\alpha\alpha})^{-1} < 1$. Як було показано рані-

ше, параметри $\gamma_{i0jm}^{(1)\alpha\alpha}$ можуть бути малими в широкій області зміни характерис-

тик сплаву, включаючи концентрацію компонентів. Вираз для $\gamma_{i0jm}^{\alpha\alpha}$ одержано

за умови $h_{i0jm}^{\alpha\beta} < v_{Bin}^{\alpha\beta} - v_{Lin}^{\alpha\beta}$ при $\alpha \neq \beta$. Малими параметрами теорії є

також параметри міжатомних кореляцій ϵ_n^{β} .

Об'єктом досліджень було обрано модельний бінарний сплав з ОЦК-граткою. Енергетичний спектр чистого кристалу розглядався в наближенні найближчих сусідів. Значення параметрів модельного сплаву були близькими до сплавів на основі благородних металів. На рис. 4 крива з індексом «s» зображує парціальну густину s-станів, крива з індексом «d» — парціальну густину d-станів, а крива з індексом «tot» — загальну густину станів.

Результат розрахунку впливу процесів упорядкування на електронну структуру досліджуваного сплаву представлений на рис. 5. Крива 1 на рис. 5 зображує густину електронних станів повністю неупорядкованого сплаву ($\varepsilon_1 = 0$), крива 2 — сплаву з ближнім порядком ($\varepsilon_1 = -0,08$). Для порівняння кривою 3 на рис. 5 зображена густина електронних станів сплаву з ближнім порядком ($\varepsilon_1 = -0,08$), обчислена в однозонному наближенні.

На відміну від однозонної моделі, на кривій енергетичної залежності густини електронних станів при упорядкуванні сплаву виникають два характерні провали (рис. 5). Вони обумовлені внеском парціальних густин електронних s- і d-станів. По аналогії з ефектами, що мали місце в однозонній моделі (рис. 2), при встановленні дальнього порядку на кривій густини електронних станів в областях вказаних провалів утворюються дві квазіщільнини. Розрахунки

електропровідності сплавів в багатозонній s-d-моделі було проведено згідно рівнянь, які були отримані при знаходженні двочастинкової функції Гріна. Конфігураційне усереднення матричних елементів при обчисленні двочастинкової функції Гріна проведено аналогічно методу, узагальненому в монографії [11]. Враховуючи залежність матриці потенціальної енергії (11) від індексу зони в виразі для гамільтоніану (10) в багатозонному наближенні, в моделі діагонального безладдя для електропровідності отримаємо вираз:

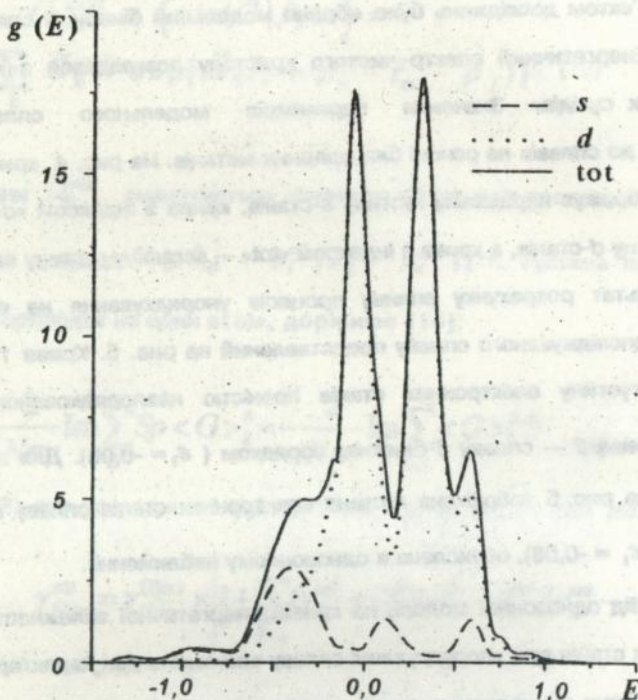


Рис. 4. Густина електронних станів неупорядкованого бінарного сплаву з ОЦК - ґраткою (модель s-d зони).

$$\begin{aligned}
 \sigma_{\mu\mu}(0) = & -\frac{e^2\eta}{2\pi\nu\Omega_0} Sp^{-} \operatorname{Re} \sum_i \left\{ \sum_{\varphi, \varphi' = \pm} (2\delta_{\varphi\varphi'} - 1) [v_{\mu} K(E^{\varphi}, v_{\mu}, E^{\varphi'})]_{00}^{\mu} + \right. \\
 & + \sum_{(jm) \neq (j_0)} [(x_i x_j + \varepsilon_{0m}^{ij}) K_{i0jm}^{(2)AA}(v_{\mu}, v_{\mu}) + (x_i y_j - \varepsilon_{0m}^{ij}) K_{i0jm}^{(2)AB}(v_{\mu}, v_{\mu}) + \\
 & + (y_i x_j - \varepsilon_{0m}^{ij}) K_{i0jm}^{(2)BA}(v_{\mu}, v_{\mu}) + (y_i y_j + \varepsilon_{0m}^{ij}) K_{i0jm}^{(2)BB}(v_{\mu}, v_{\mu})] \left. \right\} \Big|_{E=\mu}
 \end{aligned} \quad (14)$$

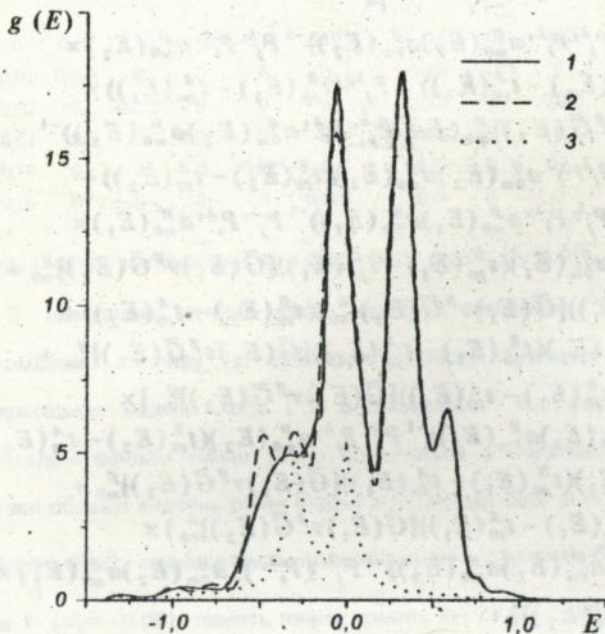


Рис. 5. Густина електронних станів модельного бінарного сплаву з ОЦК - ґраткою, що упорядковується.

В цьому виразі введені такі позначення: $Sp'' = \sum_{\alpha} \dots$, $\alpha = (s, t, e)$, s - індекс s -зони, індекси t та e - відповідно стани трьох- та двохкратно виродженим значенням енергії d -зони.

$$K_{i0jm}^{(2)\lambda_1\lambda_2}(v_{\mu}, v_{\nu}) = 4 \left[(\tilde{K}(E_+, v_{\mu}, E_+) - \tilde{K}(E_+, v_{\mu}, E_-)) v_{\nu} \tilde{G}(E_+) \right]_{00}^{\mu} \times \\ \times T_{di0jm}^{\lambda_1\lambda_2}(E_+) + 4 \left[(\tilde{K}(E_+, v_{\mu}, E_+) - \tilde{K}(E_+, v_{\mu}, E_-)) v_{\nu} \tilde{G}(E_+) \right]_{0m}^{\nu} \times \\ \times T_{n_j m i 0}^{\lambda_2\lambda_1}(E_+) + 2 \tilde{K}_{0m}^{\nu}(E_+, v_{\mu}, E_+) M_{n_j m i 0}^{\lambda_2\lambda_1}(E^+, v_{\mu}, E^+) - \\ - 2 \tilde{K}_{0m}^{\nu}(E_-, v_{\mu}, E_+) M_{n_j m i 0}^{\lambda_2\lambda_1}(E^+, v_{\mu}, E^-)$$

де $M_{n_j m i 0}^{\lambda_1\lambda_2}(E_1, v_{\beta}, E_2) = P_j^{\lambda_1} P_i^{\lambda_2} (t_{jm}^B(E_1) - t_{jm}^A(E_1)) \\ [\tilde{G}(E_1) v^{\beta} \tilde{G}(E_2)]_{m0}^{ji} (t_{i0}^B(E_2) - t_{i0}^A(E_2)) + \\ + P_j^{\lambda_1} (t_{jm}^B(E_1) - t_{jm}^A(E_1)) [\tilde{G}(E_1) v^{\beta} \tilde{G}(E_2)]_{mm}^{\mu} \times$

$$\begin{aligned}
& \times (I - P_j^A P_i^A a_{m0}^{\mu} (E_2) a_{0m}^y (E_2))^{-1} P_j^A P_i^A a_{m0}^{\mu} (E_2) \times \\
& \times (t_{i0}^B (E_2) - t_{i0}^A (E_2)) + P_j^A (t_{jm}^B (E_1) - t_{jm}^A (E_1)) \times \\
& \times [\tilde{G} (E_1) v^{\beta} \tilde{G} (E_2)]_{m0}^{\mu} (I - P_j^A P_i^A a_{0m}^y (E_2) a_{m0}^{\mu} (E_2))^{-1} \times \\
& P_j^A (P_i^A)^2 a_{0m}^y (E_2) a_{m0}^{\mu} (E_2) (t_{i0}^B (E_2) - t_{i0}^A (E_2)) + \\
& + (I - P_j^A P_i^A a_{m0}^{\mu} (E_1) a_{0m}^y (E_1))^{-1} P_j^A P_i^A a_{m0}^{\mu} (E_1) \times \\
& \times [P_i^A (P_j^A a_{0m}^y (E_1) (t_{jm}^B (E_1) - t_{jm}^A (E_1)) [\tilde{G} (E_1) v^{\beta} \tilde{G} (E_2)]_{m0}^{\mu} + \\
& + (t_{i0}^B (E_1) - t_{i0}^A (E_1)) [\tilde{G} (E_1) v^{\beta} \tilde{G} (E_2)]_{00}^{\mu} (t_{i0}^B (E_2) - t_{i0}^A (E_2)) + \\
& + (P_j^A a_{0m}^y (E_1) (t_{jm}^B (E_1) - t_{jm}^A (E_1)) [\tilde{G} (E_1) v^{\beta} \tilde{G} (E_2)]_{mm}^{\mu} + \\
& + (t_{i0}^B (E_1) - t_{i0}^A (E_1)) [\tilde{G} (E_1) v^{\beta} \tilde{G} (E_2)]_{0m}^{\mu}] \times \\
& \times (I - P_j^A P_i^A a_{m0}^{\mu} (E_1) a_{0m}^y (E_1))^{-1} P_j^A P_i^A a_{m0}^{\mu} (E_2) (t_{i0}^B (E_2) - t_{i0}^A (E_2)) + \\
& + (P_j^A a_{0m}^y (E_1) (t_{jm}^B (E_1) - t_{jm}^A (E_1)) [\tilde{G} (E_1) v^{\beta} \tilde{G} (E_2)]_{m0}^{\mu} + \\
& + (t_{i0}^B (E_1) - t_{i0}^A (E_1)) [\tilde{G} (E_1) v^{\beta} \tilde{G} (E_2)]_{00}^{\mu}] \times \\
& \times (I - P_j^A P_i^A a_{0m}^y (E_2) a_{m0}^{\mu} (E_2))^{-1} P_j^A (P_i^A)^2 a_{0m}^y (E_2) a_{m0}^{\mu} (E_2) \times \\
& \times (t_{i0}^B (E_2) - t_{i0}^A (E_2))].
\end{aligned}$$

$$\lambda_1, \lambda_2 = A, B; \quad P_i^A = -y_i, \quad P_i^B = x_i;$$

$$T_{d i 0 j m}^{\lambda_1 \lambda_2} = (I - P_i^{\lambda_1} P_j^{\lambda_2} a_{0m}^y a_{m0}^{\mu})^{-1} (P_i^{\lambda_1})^2 P_j^{\lambda_2} a_{0m}^y a_{m0}^{\mu} (t_{i0}^B - t_{i0}^A).$$

$$T_{n j m i 0}^{\lambda_1 \lambda_2} = (I - P_i^{\lambda_1} P_j^{\lambda_2} a_{m0}^{\mu} a_{0m}^y)^{-1} P_j^{\lambda_1} P_i^{\lambda_2} a_{m0}^{\mu} (t_{i0}^B - t_{i0}^A).$$

Результати розрахунку електропровідності за формулою (14) модельного бінарного сплаву з ОЦК-граткою для різних значень параметру мікроматричних кореляцій ϵ_{0m}^y в багатозонному наближенні наведені на рис. 6. Модельний бінарний сплав по своїм параметрам вибирався близьким до сплавів на основі перехідних металів. Значення матричних елементів $V_{A(B)}^{\alpha\beta}$ матриці (11), які характеризують ступінь s-d-гібридизації дорівнювали:

$$V_A = \begin{vmatrix} 0 & 0,02 & 0,02 & 0,02 & 0,19 & 0,19 \\ 0,02 & 0,025 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0,02 & 0 & 0,025 & 0 & 0 & 0 \\ 0,02 & 0 & 0 & 0,025 & 0 & 0 \\ 0,19 & 0 & 0 & 0 & 0,025 & 0 \\ 0,19 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0,025 \end{vmatrix} \quad V_B = \begin{vmatrix} -0,6 & 0,02 & 0,02 & 0,02 & 0,19 & 0,19 \\ 0,02 & -0,075 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0,02 & 0 & -0,075 & 0 & 0 & 0 \\ 0,02 & 0 & 0 & -0,075 & 0 & 0 \\ 0,19 & 0 & 0 & 0 & -0,075 & 0 \\ 0,19 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0,075 \end{vmatrix}$$

Співвідношення напівширин s та d зон було рівне: $W_s = 6W_d$.

З наведених даних можна зробити висновок, що основні якісні закономірності впливу на електропровідність бінарних сплавів процесів упорядкування мають місце і в багатозонній s - d моделі. Але кількісно вищезгадані ефекти більш точно описуються в багатозонному наближенні. Існує дві області значень рівня Фермі з центрами біля $\mu = -0.03$ та $\mu = -0.3$, де значення $\sigma(\mu)$ зменшуються при збільшенні ступеню ближнього порядку: крива 1- ($\varepsilon_1 = -0.08$) лежить нижче кривих 2- ($\varepsilon_1 = -0.05$) та 3- ($\varepsilon_1 = 0.0$). В першій області основний вклад дає d зона, а в другій s зона. Видно, що для даних значень рівня Фермі відбувається зменшення електропровідності. Області значень μ зменшення електропровідності відповідають зміні густини електронних станів при ближньому упорядкуванні.

Порівняння експериментальних даних концентраційних залежностей електроопору у впорядкованому та невпорядкованому станах з теоретичними розрахунками в багатозонній моделі було проведене для сплавів Ni-Cr. Матричні елементи гамільтоніану сплаву s і d зон були розраховані в X_α наближенні методу самоузгодженого поля. Атомні потенціали і одновузлові хвильові функції сплаву розраховувались в наближенні ізольованих атомів.

Як показують розрахунки, для сплавів з концентрацією Cr від $y=0,1$ до $y=0,3$ рівень Фермі знаходиться в області провалу, що виникає на кривих густини електронних станів та електропровідності з упорядкуванням. На рис.7

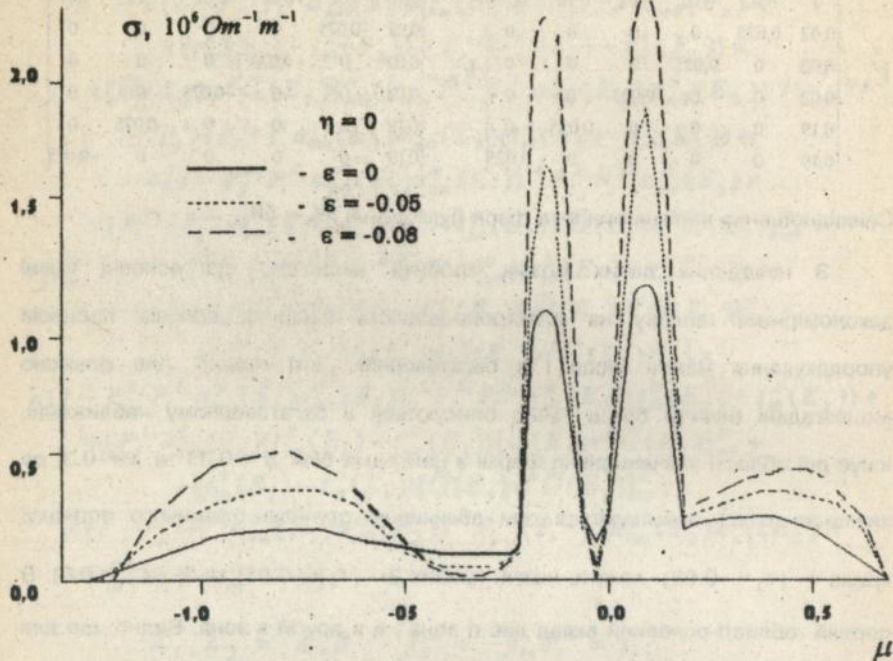


Рис. 6. Залежність електропровідності σ бінарного сплаву, що упорядковується, від рівня Фермі μ в багатозонній моделі.

представлено результат розрахунку електропровідності для сплаву Ni-Cr стехіометричного складу ($y=0.25$), що впорядковується. Значення параметру міжатомних кореляцій $\epsilon_{01} = -0,05625$. Вертикальною пунктирною лінією на рис. 7 показано положення розрахункового значення рівня Фермі при низьких температурах даного сплаву, що обчислене з рівняння:

$$z_A + z_B = \int_{-\infty}^{\mu} g(E) dE \quad (15)$$

де Z_A, Z_B - електронні концентрації А та В компонентів сплаву в v та d зонах,

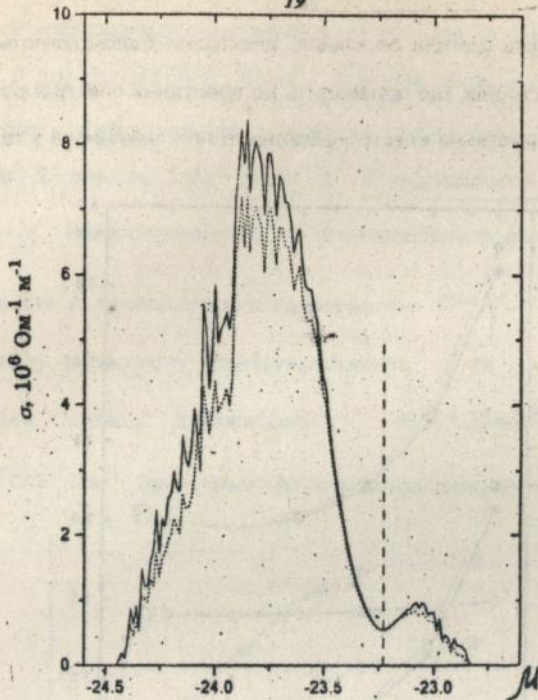


Рис. 7. Залежність електропровідності $\sigma = \sigma_s + \sigma_d$ від значення рівня Фермі μ сплаву Ni-Cr, що впорядковується.

$g(E)$ - густина електронних станів в розрахунку на один атом та два значення проєкції спіну (13). При збільшенні концентрації домішки положення рівня Фермі по відношенню до зони провалу зміщується праворуч. При $y > 0,3$ рівень Фермі виходить за межі провалу. Видно, що зменшення значень електропровідності при упорядкуванні для даного сплаву відбувається на рівні Фермі (вертикальна пунктирна лінія). На рис. 8 показано результат розрахунків внеску s та d зон в сумарну електропровідність сплавів Ni-Cr для різних значень y . Пунктирні криві відповідають електропровідності для неупорядкованих сплавів, суцільні - сплавам з ближнім порядком. Для s і d зон даних сплавів $V_B - V_A > 0$. Тому при зменшенні концентрації В-компоненти (Cr),

зменшується кількість центрів розсіяння, електрони делокалізуються, зростає час релаксації електронів, що призводить до зростання електропровідності для обох зон. Ефекти зростання електропровідності при зменшенні y та зменшення

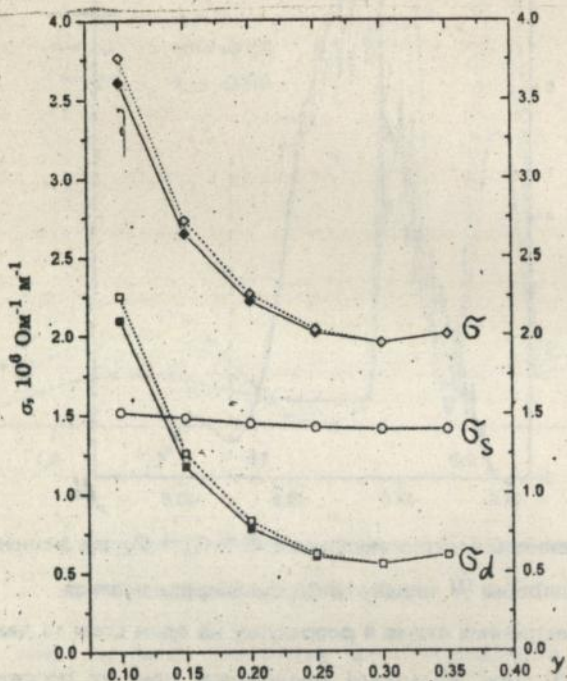


Рис. 8. Концентраційні залежності електропровідностей σ_s, σ_d та $\sigma = \sigma_s + \sigma_d$ сплаву Ni-Cr, що впорядковується.

електопровідності при упорядкуванні суттєво менші для s зони ніж для d . Це пояснюється малою різницею $(V_b - V_a > 0)$ матричних елементів s зони А і В компонент. Для сплавів Ni-Cr з концентрацією Cr більше $y=0,3$ ефект зменшення електропровідності з упорядкуванням відсутній, тому що рівень Фермі для даних концентрацій компонентів виходить за межі провалу в енергетичному спектрі.

На рис. 9 зображена концентраційна залежність залишкового питомого електроопору ρ для сплавів Ni-Cr. Криві 1, 2 відповідають експериментальним значенням для деформованих (невпорядкованих)-1 та відпалених (впорядкованих)-2 зразків [12]. Криві 3, 4 відповідають розрахунковим значенням $\rho = \frac{1}{\sigma}$ невідпорядкованого та впорядкованого сплаву, відповідно.

Електропровідність σ обчислювалась за формулою: $\sigma = \sigma_s + \sigma_d$. Абсолютні значення вкладу в загальну електропровідність s та d зон для сплаву стехіометричного складу дорівнювали $\sigma_s = 1,35 \cdot 10^6 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$ та $\sigma_d = 0,62 \cdot 10^6 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$. Ефект зменшення електропровідності при

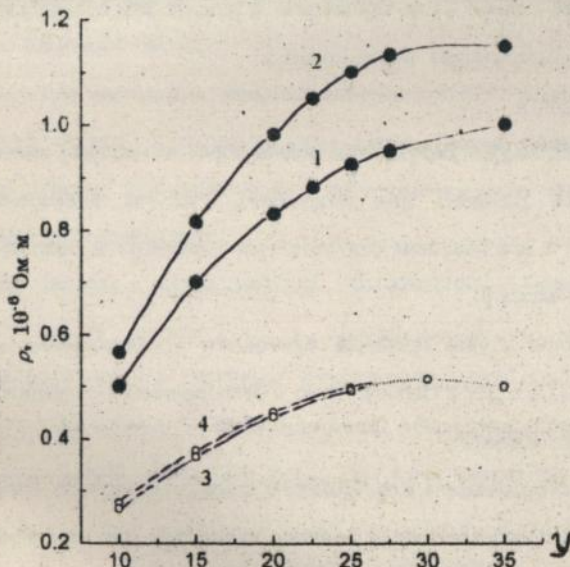


Рис. 9. Концентраційні залежності залишкових питомих опорів сплавів Ni-Cr: експериментальні значення (1- невідпорядковані, 2 - впорядковані); теоретичні значення $\rho = \frac{1}{\sigma}$ (3- невідпорядковані, 4- впорядковані).

впорядкуванні сплаву з $y=0,1-0,15$ для розрахункових значень складає приблизно 8% та 14% - для експериментальних. При цьому точність методу розрахунку дорівнювала 0,1% [11]. Аналізуючи результати представлені на рис. 9, можна прийти до висновку, що багатозонна s-d модель якісно добре описує експериментальні дані збільшення залишкового питомого електроопору при упорядкуванні. Як видно хід експериментальних та теоретичних концентраційних залежностей залишкового питомого електроопору подібний. Відмінності абсолютних значень залишкового питомого електроопору та величини ефекту пов'язані з тим, що в представленій багатозонній моделі не враховуються статистичні спотворення кристалічної ґратки. Потрібно відмітити, що обчислення було проведено в моделі діагонального безладдя, яка не враховує недіагональні члени матриць.

Висновки

На основі отриманих результатів можна зробити наступні висновки:

1. Отримані рівняння для розрахунку густини електронних станів бінарного сплаву з врахуванням статистичних кореляцій в розподілі атомів в багатозонній s-d- моделі.
2. Досліджено вплив процесів ближнього упорядкування на густину електронних станів сплаву з ОЦК-ґраткою в багатозонній s-d-моделі і виявлено появу характерних провалів.
3. Виявлено відмінності електронного спектру бінарного сплаву з ГЦК-ґраткою для моделі s-d-зони від аналогічного спектру для однозонної моделі, які зумовлені парціальними внесками s- та d- електронних станів.
4. Показано, що при встановленні дальнього порядку на місці провалів в енергетичному спектрі бінарних сплавів виникає щільна, що приводить до перерозподілу густини електронних станів.

6. Одержані рівняння для розрахунку електропровідності сплавів в багатозонному наближенні з врахуванням кореляцій в розташуванні атомів.

7. Розглянуто особливості в поведінці залишкового питомого електроопору сплавів з ГЦК- граткою при ближньому упорядкуванні.

8. Зміна електропровідності при упорядкуванні сплавів, які описуються багатозонною s-d-моделлю, залежить від положення рівня Фермі по відношенню до квазіщілин, які при цьому виникають.

9. Якщо рівень Фермі знаходиться в області провалу, який виникає на кривій густини електронних станів при ближньому упорядкуванні, електропровідність сплаву зменшується. Електропровідність сплаву збільшується при ближньому упорядкуванні, якщо рівень Фермі знаходиться поза межами вказаного провалу.

10. Виявлено аномалії в поведінці електропровідності модельних сплавів в багатозонній моделі. У випадку, коли рівень Фермі попадає в область енергетичної щілини, яка виникає при встановленні дальнього порядку, має місце перехід метал-діелектрик.

11. В рамках запропонованої багатозонної моделі проведено порівняльний аналіз теоретичних та експериментальних концентраційних залежностей залишкового питомого електроопору для сплаву Ni-Cr при наявності та відсутності упорядкування. Спостерігається задовільне узгодження результатів чисельного розрахунку з експериментальними даними.

СПИСОК ЦИТОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ.

1. Эренрейх Г., Шварц Л. Электронная структура сплавов. М.: Мир, 1979. 200 с.
2. Aiyer R.N., Elliott R.J., Krumhansl J.A., Leath P.L. Pair effects and self-consistent corrections in disordered alloys//Phys. Rev. 1969.V.181.N 3.P.1006-1014.

3. Егорушкин В.Е., Кульменьтьев А.И., Савушкин Е.В., Кононенко А.Б., Алышев С.В. Электроны и фононы в неупорядоченных сплавах. Новосибирск: Наука, 1989. 272 с.
4. Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Физматгиз, 1962. 444 с.
5. Los' V.F., Repetsky S.P. A theory for the electrical conductivity of an ordered alloy // J.Phys.: Condens. Matter. 1994. V.6. P.1-24.
6. Лось В.Ф., Репецкий С.П., Каленик А.А., Годлевский К.П. Самоогласованное двухузельное приближение в теории электронных спектров сплавов //Металлофизика. 1992. Т.14. N 11. С.3-13
7. Edwards S.F. A new method for the evaluation of electric conductivity in metals//Phil.Mag.1958.V.3.N 33.P.1020-1031.
8. Иверонова В.И., Кацнельсон А.А. Ближний порядок в твердых растворах. М.: Наука, 1977. 366 с.
9. Лось В.Ф., Макара В.А., Репецкий С.П., Каленик А.А. Изменение энергетического спектра электронов и аномальное поведение электропроводности сплавов при упорядочении// Металлофизика. 1992. Т.15 .N6. С.33-42
10. В.Ф. Лось, С.П. Репецкий, А.А. Каленик, Е.Г. Лень. Выход за рамки однозонного приближения с учетом рассеяния на кластерах. Металлофизика и новейшие технологии. 1994. Т. 16, №12, с. 33-40.
11. В.Ф. Лось, С.П. Репецкий. Методы теории неупорядоченных систем. Электронные свойства сплавов. Киев: Наукова думка. 1995, 174 с.
12. Мельникова Н.А. Исследование восстановления электросопротивления в сплавах никель-хром//Дисс. канд. физ. - мат. наук. Киев, 1977. 184 с.

СПИСОК РОБІТ, ОПУБЛІКОВАНИХ ПО ТЕМІ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Лось В. Ф., Репецкий С. П., Каленик А. А., Годлевский К. П. Само-согласованное двухузельное приближение в теории электронных спектров сплавов //Металлофизика. 1992. Т.14. N 11. С.3-13
2. Лось В. Ф., Макара В. А., Репецкий С. П., Каленик А. А. Изменение энергетического спектра электронов и аномальное поведение электропроводности сплавов при упорядочении// Металлофизика. 1992. Т.15 N6. С.33-42
3. V. F. Los', V. A. Makara, S. P. Repetsky, A. A. Kalenik, K. P. Godlevsky. Change of electronic spectrum and anomalous behaviour of alloys electrical conductivity during ordering. European research conference " Electronic Structure of Solids. Dynamics and excitations". August 27- September 1, 1994. Gausdal, Norway.
4. В. Ф. Лось, С. П. Репецкий, А. А. Каленик, Е. Г. Лень. Выход за рамки однозонного приближения с учетом рассеяния на кластерах. Металлофизика и новейшие технологии. 1994. Т. 16, №12, с. 33-40.
5. V.F. Los', S.P. Repetskii, A.A. Kalenik, and E.G. Len'. Extension of the One-Band Approximation with of Scattering on Clusters. Phys. Metals, Vol. 14 (12), 1995, pp 1310-1322.

The multiband s-d model of calculating the electronic properties of alloys.

The method of calculating the electronic energy spectrum and electrical conductivity of alloy was developed with account of statistic interatomic short-range and long-range correlation. The method is based on the cluster decomposition of the complete scattering T-matrix. The electronic energy spectrum and electrical conductivity of alloy was described in terms of the

multiband s-d model. The influence of short-range order on the electronic energy spectrum and electrical conductivity of alloy was analysed.

Многозонная s-d модель расчета электронных свойств сплавов.

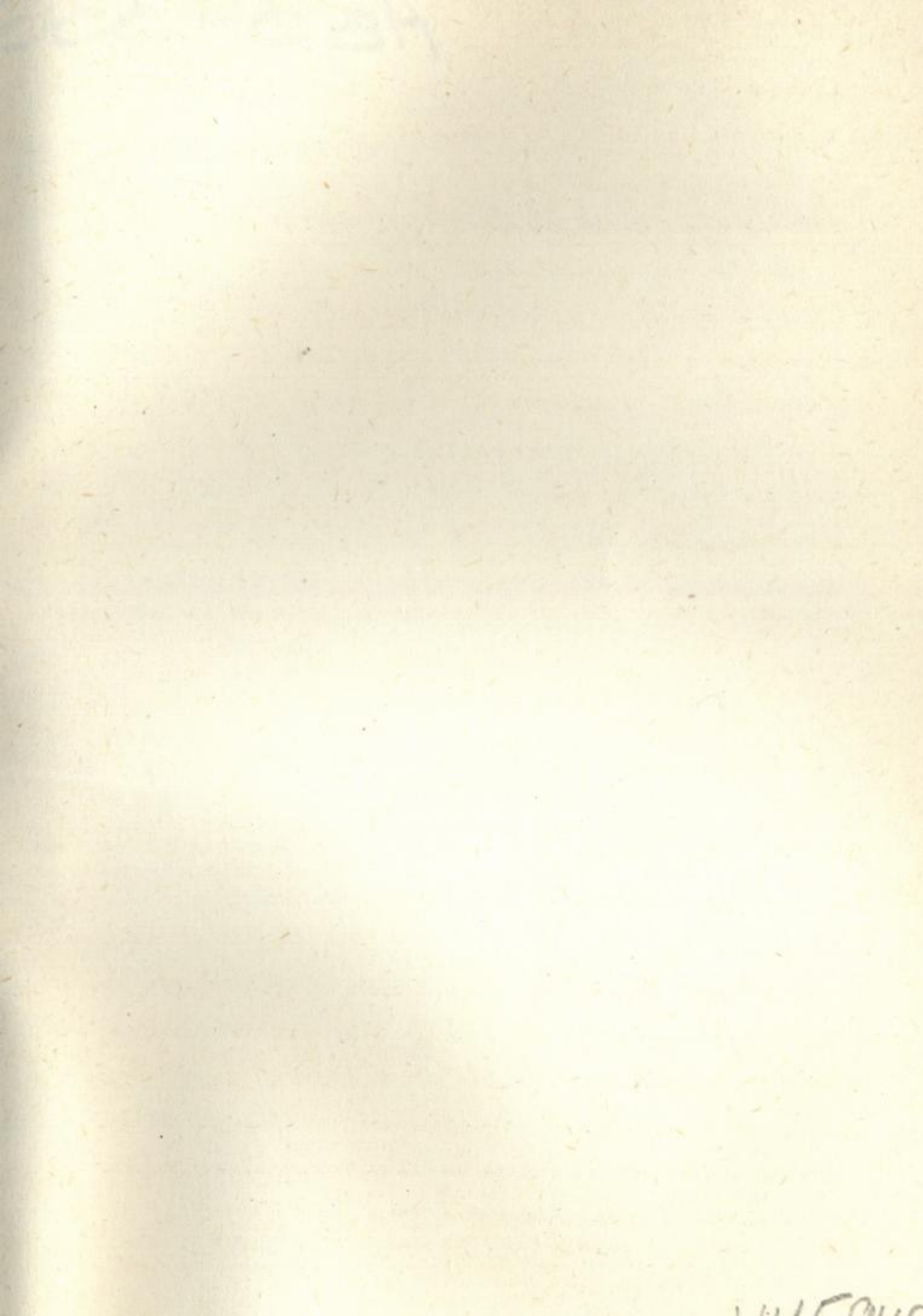
Развит метод расчета энергетического спектра электронов и электропроводности сплава с учетом статистических межатомных корреляций при ближнем и дальнем упорядочении. Метод базируется на кластерном разложении полной T-матрицы рассеяния. Энергетический спектр электронов и электропроводности сплава описаны в многозонной s-d модели. Исследовано влияния ближнего упорядочения на энергетический спектр электронов и электропроводности сплава.

Ключові слова: багатозонна s-d модель, сплав, енергетичний спектр, електропровідність, упорядкування, характерний провал, аномальна поведінка.

АННОТАЦІЯ

- а) Каленик Олександр Олександрович.
 б) Багатозонна s-d модель розрахунку електронних властивостей сплавів.
 в) Рукопис.
 г) 01.04.07 - фізика твердого тіла.
 д) Київський державний університет ім. Тараса Шевченка.
 е) Київ, 1995 рік.
 д) Запропонована багатозонна модель розрахунку енергетичного спектру електронів та електропровідності з врахуванням міжатомних статистичних кореляцій. Досліджено вплив ближнього упорядкування на густину електронних станів та електропровідність модельних бінарних сплавів в багатозонному наближенні. Встановлено залежність поведінки електропровідності сплаву від зміни густини електронних станів на рівні Фермі.

Підл. до друку ^{14.03.96}
 Ум. друк. арк. 1,75 р. Формат 60x84/16. Друк офс. Папір друк.
 Тираж 100 Зам. 411



AB 34.336

AB 34.336