

ЛЬВІВСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
імені Івана Франка

На правах рукопису

ФУРМАН
Віталій Васильович



**ПСЕВДОПОТЕНЦІАЛ В ТЕОРІ РОЗСІЯННЯ.
ПЕРЕХІДНІ ТА РІДКІСНОЗЕМЕЛЬНІ МЕТАЛИ**

01:04.02 – теоретична фізика

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

ЛЬВІВ 1997

AB 36.963

Дисертацією є рукопис.
Роботу виконано на кафедрі теоретичної фізики
університету імені Івана Франка

ЛННБ України ім.В.Стефаніка



00761116 (M)

Науковий керівник: кандидат фізико-математичних наук
Якібчук Петро Миколайович

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук
Ваврух Маркіян Васильович
доктор фізико-математичних наук
Швець Валерій Тимофійович

Провідна установа: Інститут фізики конденсованих систем НАН України

Захист відбудеться "12" березня 1997 р. о 15³⁰ год на засіданні спеціалізованої Вченої Ради Д 04.04.08 при Львівському державному університеті імені Івана Франка за адресою: 290005, м. Львів, вул. Драгоманова, 50, аудиторія 1, фізичний факультет.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотечі Львівського державного університету імені Івана Франка (м. Львів, вул. Драгоманова, 5).

Автореферат розіслано "10" лютого 1997 р.

Вчений секретар
Спеціалізованої вченої ради
доктор фіз.-мат. наук, професор

Л. Блажневський Л. Ф. Блажневський

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. В теорії металів, що продовжує інтенсивно розвиватись на основі квантово-механічного підходу, центральне місце займає проблема опису різних типів взаємодій. Всі відомі до цього часу методи теоретичного дослідження металів базуються на пошуку таких потенціалів, щоб на основі розв'язку рівняння Шредингера отримати можливість описати як атомні, так і електронні властивості. Хвильова функція, що є розв'язком рівняння Шредингера, не є спостережуваною величиною. У теорії розсіяння використовуються такі спостережувані фізичні величини, як фаза хвильової функції та її амплітуда. А тому у методі фазових функцій, що має також назву методу спостережуваних величин, існує можливість ввести у розгляд замість хвильової функції іншу — фазову функцію, яка повністю описує процес розсіяння і в кожній точці має зміст зсуву фази при розсіянні на визначеній частині потенціалу. В методі фазових функцій можна замість рівняння Шредингера виділити два еквівалентних йому рівняння — одне для фази, а друге для амплітуди. Знання фазової функції, з одного боку, дає наочне представлення про спостережувані зсуви фаз при потенціальному розсіянні, а разом з тим дозволяє повністю відтворити хвильову функцію. Особливості поведінки фаз і амплітуд розсіяння для зв'язаних станів та станів неперервного спектру також пов'язані з потенціалом розсіяння.

В нерелятивістській квантовій механіці при пошуку потенціалів, що описують взаємодію електронів провідності з іонним залишком металу — псевдопотенціалів, центральною проблемою має бути вибір таких псевдопотенціалів, які би давали правильну асимптотичну поведінку хвильових функцій для різних значень енергії системи. При побудові модельного псевдопотенціалу (МП) важливо наступне: вибір апроксимаційної функції, що описує відштовхувальну взаємодію у електрон-іонній взаємодії; спосіб або методика визначення параметрів; можливість бути легко перенесеним на різні об'єкти досліджень; врахування ефектів нелокальності. Побудована на такому потенціалі матриця розсіяння може бути використана для опису і дослідження властивостей металів як у кристалічному, так і у непорядкованому стані.

Окрім того з допомогою підходу теорії розсіяння можна дослідити не тільки

ки потенціальне розсіяння, але і з успіхом застосувати його для інших видів взаємодій, що є характерні для перехідних та рідкісноземельних металів (РЗМ). Дослідженню властивостей перехідних металів та РЗМ у псевдопотенціальному підході із використанням формалізму теорії розсіяння і присвячена дана робота.

Метою дисертаційної роботи було:

Отримання критеріїв побудови та співвідношень для псевдопотенціалу на основі методу фазових функцій та теорії розсіяння, побудова апріорного нелокального МП і застосування методу МП для дослідження фізичних властивостей перехідних металів і РЗМ з урахування впливу наявних у цих металах ефектів гібридизації та спин-орбітальної взаємодії.

Основні завдання досліджень:

- розробка концепції поєднання теорії розсіяння (метод фазових функцій) та теорії псевдопотенціалу для побудови на основі цього МП;
- методика побудови апріорного нелокального МП з урахуванням ефектів гібридизації та спин-орбітальної взаємодії;
- врахування нелокального характеру МП при розрахунку фізичних властивостей металів;
- дослідження електронних та атомних властивостей перехідних металів та РЗМ як у кристалічному, так і в неупорядкованому стані.

Наукова новизна:

1. Вперше, ґрунтуючись на формалізмі методу фазових функцій і теорії розсіяння, знайдено та запропоновано критерії, що накладаються на структуру і спосіб побудови модельного нелокального псевдопотенціалу.

2. Запропоновано методику визначення параметрів для довільного нелокального МП на основі фазового рівняння для парціальної амплітуди розсіяння та знайдено параметри МП для $3d$ -, $4d$ -, $4f$ - та благородних металів.

4. Уточнено вираз для гібридизаційного доданку МП на основі оптичної теорії та поведінки парціальної амплітуди розсіяння.

5. Отримано співвідношення, що пов'язують фазу розсіяння на кулонівських функціях та значення величини квантового дефекту. Це дало змогу визначити формфактори МП із урахуванням спин-орбітальної взаємодії та зв'язок із значеннями енергій відповідних мультиплетів;

6. З методу фазових функцій отримано вирази для розрахунку електронних властивостей неупорядкованих металів.

7. На основі побудованого нелокального МП проведено розрахунки повної енергії зв'язку, енергії зчеплення та рівноважних атомних радіусів, парних потенціалів міжіонної взаємодії з урахуванням 3-го порядку теорії збурень за псевдопотенціалом, характеристик спін-орбітальної взаємодії, щільності станів неупорядкованих металів.

8. Проведено дослідження впливу нелокальності МП на властивості перехідних металів та РЗМ і отримано співвідношення для визначення заряду дірки збіднення та ефективної валентності при розрахунках.

Практичне значення результатів досліджень.

Розглянений в роботі підхід з формалізму теорії розсіяння узагальнює відомі способи побудови МП. Методика побудови нелокального апріорного МП дозволяє з єдиної точки зору враховувати різноманітні види взаємодій, які є характерні для перехідних металів та РЗМ. З допомогою таких МП можна досліджувати широке коло фізичних властивостей перехідних і рідкісноземельних металів як у кристалічному, так і в неупорядкованому стані. Побудований на таких засадах МП може бути легко перенесений на $5d$ - , $5f$ - метали та використаний для дослідження кінетичних властивостей перехідних металів та РЗМ і сплавів на їх основі.

Положення, що виносяться на захист:

1. Концепція побудови апріорних нелокальних МП на основі методу фазових функцій і теорії розсіяння для перехідних та рідкісноземельних металів.

2. Методика визначення параметрів нелокального МП на основі фазового рівняння для парціальної амплітуди.

3. Уточнене співвідношення для гібридаційного доданку формфактору МП.

4. Розрахунок формфакторів МП із урахуванням спін-орбітальної взаємодії, використовуючи зв'язок між квантовим дефектом та фазами розсіяння на кулонівських функціях.

5. Розрахунок електронних властивостей неупорядкованих металів методом фазових функцій.

6. Дослідження фізичних властивостей перехідних і рідкісноземельних металів за допомогою побудованого МП.

Апробація роботи. Дисертація розглянута та рекомендована до захисту заключенням кафедри теоретичної фізики Львівського державного університету імені Івана Франка. Основні положення доповідались на наступних наукових конференціях: Всесоюзний симпозіум "Электронное строение и физико-химические свойства тугоплавких соединений и сплавов". (Івано-Франківськ, 1980); Всесоюзний семінар "Микронеоднородисть і многочастинні ефекти в металічних расплавах" (Одеса, 1981); XIII Всесоюзна нарада по рентгенівській і електронній спектроскопії (Львів, 1981); V. Всесоюзна конференція по будові і властивостях металічних і шлакових розплавів (Свердловськ, Росія, 1983); I Українська конференція: "Структура і фізичні властивості непорядкованих систем" (Львів, 1993); Міжнародна конференція: "Physics in Ukraine." International Conference. Statistical Physics and Phase Transition (Київ, 1993); Міжнародна наукова конференція присвячена 150-річчю від дня народження видатного українського фізика і електротехніка Івана Пулюя (Львів, 1995).

Публікації. Матеріали дисертації викладені в 9 друкованих працях, наведених у переліку посилань.

Особистий внесок автора у проведених дослідженнях.

Автору належить: основний внесок у розробку концепції поєднання методу фазових функцій і досягнень теорії розсіяння до побудови априорних нелокальних МП для перехідних та рідкісноземельних металів; отримання методики визначення параметрів нелокального МП на основі фазового рівняння парціальної амплітуди; уточнення співвідношення для гібридизаційного доданку формфактору МП та урахування внеску спин-орбітальної взаємодії; знаходження співвідношень по розрахунку величини квантового дефекту через фазу розсіяння на кулонівських функціях; дослідження електронних властивостей непорядкованих металів на основі методу фазових функцій, а розрахунок фізичних властивостей перехідних і рідкісноземельних металів з допомогою МП на паритетних умовах із співавторами публікацій.

Об'єкт та методи досліджень. Доцільність пошуку нових методів дослідження перехідних і рідкісноземельних металів зумовлена недостатнім теоретичним описом усіх особливостей вказаних об'єктів.

Оскільки мікроскопічне дослідження властивостей перехідних і рідкісноземельних металів залишається невирішеною проблемою, то побудова нелокаль-

ного модельного псевдопотенціалу з урахуванням ефектів гібридизації та спин-орбітальної взаємодії є актуальною задачею, як в теоретичному так і в практичному відношенні. Тому в дисертації розроблена концепція поєднання теорії розсіяння та методу псевдопотенціалу і на основі методу фазових функцій визначено критерії побудови модельних псевдопотенціалів. Робота виконувалась на кафедрі теоретичної фізики Львівського державного університету імені Івана Франка.

Структура та об'єм дисертації. Дисертаційна робота складається з вступу, п'яти розділів, закінчення та переліку посилань. Загальний об'єм дисертації становить 136 сторінок, таблиць — 12, рисунків — 22, список літератури включає 138 найменувань.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтовано та визначено актуальність теми досліджень, підходи та методи розв'язання проблеми, мету роботи, її наукову новизну та практичну цінність, сформульовано положення, що виносяться на захист, представлено інформацію про апробацію роботи, публікації автора, структуру та обсяг дисертації.

У першому розділі висвітлено сучасний стан теорії перехідних та рідкісноземельних металів. Розглянуто особливості та труднощі побудови МП перехідних та рідкісноземельних металів, а також область застосування нелокальних МП для розрахунків їх властивостей. Подано аналітичний огляд праць, що висвітлюють стан досліджень фізичних властивостей перехідних металів і РЗМ з допомогою псевдопотенціалів.

Другий розділ є основним і присвячений теоретичному дослідженню псевдопотенціалу в методі фазових функцій. Запропоновано концепцію побудови псевдопотенціалів на основі формалізму методу фазових функцій і теорії розсіяння. Отримано рівняння, що пов'язує парціальну амплітуду розсіяння і парціальну компоненту нелокального МП:

$$(\mathbf{k} + \mathbf{q}| f_l(E) | \mathbf{k}) = -\frac{4\pi}{\Omega} \left(\frac{V(q)}{\varepsilon^*(q)} + w_l(|\mathbf{k}|, |\mathbf{k} + \mathbf{q}|) + \left(1 - \frac{\varphi(q)}{\varepsilon^*(q)}\right) g(q) \right) + \quad (1)$$

$$+ \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{dq'}{2E - q'^2} \left(\frac{V(q')}{\varepsilon^*(q')} + w_l(|\mathbf{k}|, |q'|) + \left(1 - \frac{\varphi(q')}{\varepsilon^*(q')}\right) g(q') \right) \langle q' | f_l(E) | \mathbf{k} \rangle.$$

Для парціальної складової псевдопотенціалу з умови існування зв'язаних станів отримано рівняння:

$$\frac{d\zeta_l(k_{nl}, r)}{dr} = -\frac{2W_l(r)}{k_{nl}} (\cos \zeta_l(k_{nl}, r) i_l(k_{nl}r) + \sin \zeta_l(k_{nl}, r) \frac{2}{\pi} k_l(k_{nl}r))^2, \quad (2)$$

$$\zeta_l(k_{nl}, \infty) = (2n+1) \frac{\pi}{2}, \quad (3)$$

що дозволяють оцінити кількість зв'язаних станів для l -компоненти МП $W_l(r)$.

Оскільки такого типу задачі виникають при побудові апріорних МП, коли для визначення параметрів використовують енергії спостережуваних спектроскопічних термів E_{nl} , то це рівняння однозначно визначає критерій вибору псевдопотенціалу. Функція $\zeta_l(k, r)$ має характерні асимптотики при малих r та при $r \rightarrow \infty$, які є справедливими для довільного МП. Параметри МП слід визначати так, щоб для кожної l -компоненти існував лише один зв'язаний стан. Враховуючи особливості енергетичної залежності амплітуди розсіяння для квазістаціонарних станів, отримано уточнений вираз для гібридизаційного доданку МП в SOPW-базисі:

$$\langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | W^{\text{гібр.}} | \mathbf{k} \rangle = 4 \sum_{d_m} \frac{\langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | \Delta | d_m \rangle \langle d_m | \Delta | \mathbf{k} \rangle \gamma_{d_m}(k)}{4(E_{d_m} - E)^2 + (\gamma_{d_m}(k))^2}. \quad (4)$$

Запропоновано метод знаходження середини та країв $d(f)$ — зон в перехідних металах та РЗМ з поведінки псевдохвильових функцій $\Psi_{d(f)}$ та знайдено їх відповідні значення. На основі дослідження впливу некулонівської частини МП на зміщення енергетичного рівня отримано вирази для величини квантового дефекту із фазових рівнянь з кулонівськими функціями:

$$\frac{d}{dr} \text{tg} \gamma_l(k, r) = -\frac{2w_l(r)}{k} (F_l(kr, \eta) + \text{tg} \gamma_l(k, r) G_l(kr, \eta))^2, \quad (5)$$

$$\sigma_{nl}^{(1)} = \frac{1}{\pi} \text{arctg} \left\{ \text{tg} \{ \gamma_l(k, \infty) \} (\sqrt{2\varepsilon_{nl}}/z)^{2l+1} \prod_{j=-l}^l \{ z/\sqrt{2\varepsilon_{nl}} + j \} \right\}, \quad (6)$$

$$\Delta \varepsilon_{nl} = \frac{z^2}{n^2} - z^2 / \left\{ 1 + \frac{1}{n\pi} \text{arctg} \left\{ \text{tg} \{ \gamma_l(k, \infty) \} (\sqrt{2\varepsilon_{nl}}/z)^{2l+1} \prod_{j=-l}^l \{ z/\sqrt{2\varepsilon_{nl}} + j \} \right\} \right\}^2.$$

З методу фазових функцій і на основі поведінки амплітуди розсіяння отримано співвідношення по урахуванню спин-орбітальної взаємодії у модельному псевдопотенціалі та вираз для формфактору МП:

$$\langle \mathbf{k}' | W^{\text{пот}} | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | W | \mathbf{k} \rangle^{(0)} + \sum_{l=0}^{L_0} (2l+1) M_l^{(1)} \frac{\partial}{\partial \mu_l} \{ \langle \mathbf{k}' | W_l^{\text{пот}} | \mathbf{k} \rangle P_l(\cos(\theta)) \}, \quad (7)$$

$$\langle k' | W^{SO} | k \rangle = - \sum_{l=1}^{l_0} (2l+1) M_l^{(2)} \left[\frac{\partial}{\partial \mu_l} \{ \langle k' | W_l^{pot} | k \rangle \} \right] \frac{\partial}{\partial \theta} P_l(\cos(\theta)), \quad (8)$$

де μ_l – параметр псевдопотенціалу.

В третьому розділі для ілюстрації отриманих критеріїв на основі теорії розсіяння побудовано екранований нелокальний МП перехідних і рідкісноземельних металів у COPW-базисі:

$$\langle k + q | \bar{W} | k \rangle = \frac{V_{d(f)}^*(q)}{\varepsilon_{d(f)}^*(q)} + \langle k + q | \bar{W}^{(0)} | k \rangle + \left\{ 1 - \frac{\varphi(q)}{\varepsilon_{d(f)}^*(q)} \right\} g(q) \quad (9)$$

з неекранованим формфактором

$$\begin{aligned} \langle k | \bar{W}^{(0)} | k + q \rangle = & \langle k | W^{ion} | k + q \rangle + \langle k | W^{SO} | k + q \rangle + \\ & + \langle k | W_{\text{вал}}^{(0)} | k + q \rangle + \langle k | W^{16} | k + q \rangle, \end{aligned}$$

де в якості іонного псевдопотенціалу використано модельний псевдопотенціал

$$W^{ion}(r) = -\frac{Z}{r} + \sum_{l=0}^{l_0} (A_l + \frac{z}{r}) e^{-\frac{r}{r_l}} \hat{P}_l, \quad (10)$$

а внесок спін-орбітальної взаємодії відтворюють доданки (7, 8). Ефекти гібридизації враховані через $\langle k | W_{\text{вал}}^{(0)} | k + q \rangle > i \langle k | W^{16} | k + q \rangle$.

Отримано вираз для екрануючої функції $g(q)$ перехідних та рідкісноземельних металів та статичної діелектричної функції $\varepsilon_{d(f)}^*(q)$ з урахуванням обмінно-кореляційних ефектів.

Запропоновано новий узагальнений метод визначення параметрів для довільного модельного псевдопотенціалу та вперше знайдено параметри (10) для 4-d, благородних та рідкісноземельних металів (див. Таблиці 1, 2).

Іон	R_0	A_0	R_1	A_1	R_2	A_2
Rh^{+3}	0.575	6.565	0.505	7.470	0.645	5.467
Y^{+3}	0.815	4.072	0.795	4.747	0.857	4.396
Zr^{+4}	0.757	6.630	0.747	6.726	0.675	7.457
Mo^{+6}	0.635	11.883	0.618	12.198	0.487	15.482
Cu^{+1}	0.375	3.347	0.569	2.210	0.958	1.283
Ag^{+1}	0.387	3.235	0.581	2.163	0.885	1.401
Au^{+1}	0.249	4.996	0.578	2.176	0.701	1.789
Pd^{+2}	0.535	4.705	0.395	6.354	0.737	3.397
Pt^{+2}	0.465	5.408	0.297	8.402	0.765	3.271

Таблиця 1. Параметри модельного псевдопотенціалу перехідних металів.

Ion	R_0	A_0	R_1	A_1	R_2	A_2	R_3	A_3
<i>La</i>	0.945	3.816	0.928	3.889	0.833	4.571		
<i>Ce</i>	1.455	2.368	0.905	3.991	0.806	4.727	0.635	6.091
<i>Pr</i>	1.645	2.166	0.885	4.082	0.781	4.875	0.613	6.313
<i>Eu</i>	0.838	4.338	0.818	4.638	0.715	5.328	0.505	7.663
<i>Gd</i>	0.825	4.410	0.805	4.529	0.703	5.419	0.493	7.849
<i>Tb</i>	0.817	4.413	0.825	4.413	0.690	4.369	0.486	5.517
<i>Ho</i>	0.795	4.456	0.769	4.702	0.667	5.712	0.465	8.322
<i>Er</i>	0.787	4.577	0.757	4.776	0.656	5.807	0.456	8.486
<i>Tm</i>	0.777	4.636	0.805	4.462	0.645	5.906	0.447	8.657
<i>Yb</i>	0.767	4.696	0.737	4.906	0.635	5.995	0.438	8.835
<i>Lu</i>	0.757	4.759	0.728	4.965	0.626	4.965	0.428	6.084

Таблиця 2. Параметри модельного псевдопотенціалу іонів РЗМ ($z = 3$).

У четвертому розділі проведено розрахунок атомних властивостей перехідних металів та РЗМ. Для урахування нелокальності МП в розрахунках фізичних властивостей металів отримано вирази для розрахунку величини згрядку дірки збіднення

$$z_{dpt} = \frac{3}{2E_f^0 z} \left[\frac{1}{k_f} \left\{ \int_0^{k_f} \langle k | \bar{W}^{(0)} | k \rangle dk + \int_{k_f}^{k_{D(R_s)}} \langle k | \bar{W}^{(0)} | k \rangle \sin^2 \frac{\beta(k)}{2} dk \right\} - \langle k_f | \bar{W}^{(0)} | k_f \rangle \right] \quad (11)$$

та ефективної валентності $z^* = z + z_{dpt}$. Розраховано параметри спин-орбітальної взаємодії $4f$ -оболонки РЗМ та величини зміщення енергетичного рівня некулонівською частиною МП (10). Врахування поправок квантових дефектів дозволяє оцінити внесок спин-орбітальної взаємодії у формфактори МП, визначити сталу спин-орбітальної взаємодії і радіальні інтеграли для $4f$ -оболонки РЗМ, а результати розрахунку з використанням МП (10) для іонів РЗМ ($z = 3$) краще узгоджуються з експериментальними даними, ніж результати розрахунку за методом Хартрі-Фока, оскільки псевдохвильова функція відповідає компоненті МП. Визначені формфактори, які враховують ефекти гібридації та спин-орбітальну взаємодію, використовувались для розрахунку повної енергії зв'язку та рівноважних атомних радіусів перехідних металів та РЗМ в другому порядку теорії збурень за псевдопотенціалом і парних потенціалів міжіонної взаємодії з урахуванням третього порядку. Результати розрахунків повної енергії зв'язку та рівноважних атомних радіусів деяких перехідних ме-

талів та РЗМ (див. Таблиці 3, 4) добре узгоджуються з експериментальними даними. Порівняння отриманих значень енергії зчеплення (Рис. 1) для 3d перехідних металів (крива 3) вказує на краще співпадіння з експериментальними даними (крива 1), ніж з відповідними розрахунками для потенціалу Анімалу (крива 2) і в наближенні сфери Фермі (крива 4). Краще узгоджуються з експериментом і результати для 4d металів (Рис. 2, крива 3).

Значення енергії зчеплення (Рис. 3, крива 3) для 4f металів із врахуванням внеску спін-орбітальної взаємодії ближчі до експериментальних (крива 1), ніж розрахунки без цього внеску (крива 2).

Іон	Енергія зв'язку (Ry /атом)		Рівноважний атомний радіус (а.о.е)	
	Розрахунок	Експеримент	Розрахунок	Експеримент
Rh^{+3}	4.373	4.554	2.820	2.810
Y^{+3}	3.194	3.163	3.745	3.760
Zr^{+4}	6.172	6.239	3.357	3.348
Cu^{+1}	0.809	0.827	2.664	2.670
Ag^{+1}	0.762	0.775	2.988	3.019
Au^{+1}	0.915	0.943	2.967	3.012
Pd^{+2}	2.310	2.344	2.784	2.874
Pt^{+2}	2.390	2.454	2.834	2.899

Таблиця 3. Повна енергія зв'язку та рівноважні атомні радіуси перехідних металів.

Іон	Енергія зв'язку (Ry /атом)		Рівноважний атомний радіус (а.о.е)	
	Розрахунок	Експеримент	Розрахунок	Експеримент
Ce	3.279	3.085	3.731	3.811
Pr	3.175	3.083	3.738	3.804
Eu	3.256	3.187	4.038	4.286
Gd	3.328	3.190	3.653	3.764
Er	3.389	3.324	3.541	3.668
Lu	3.372	3.380	3.472	3.622

Таблиця 4. Повна енергія зв'язку та рівноважні атомні радіуси рідкісноземельних металів.

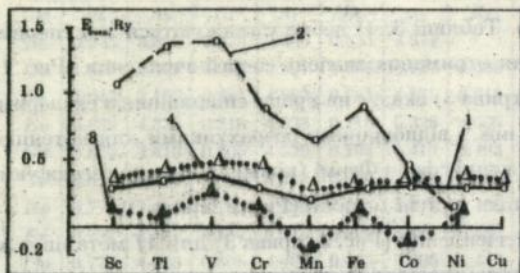


Рис. 1: Енергія зчеплення 3d перехідних металів.

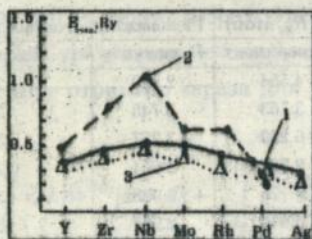


Рис. 2: Енергія зчеплення 4d перехідних металів.

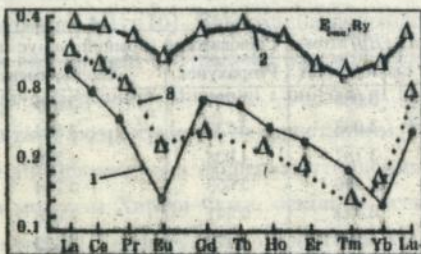


Рис. 3: Енергія зчеплення рідкісноземельних металів.

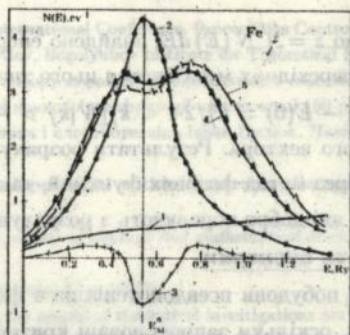


Рис. 4. Щільність станів неперіодичного Fe.

У п'ятому розділі на основі методу фазових функцій досліджено електронні характеристики неперіодичаних перехідних металів та РЗМ.

Отримано вираз для розрахунку щільності станів неперіодичаного перехідного металу через фази розсіяння

$$N(E) = \frac{2}{\pi} \sum_{l=0}^{l_a} (2l+1) \frac{d}{dE} \{\delta_l(E)\} \quad (12)$$

шляхом розв'язку системи диференціальних рівнянь для фази розсіяння і її похідної за енергією:

$$\begin{cases} \frac{d\delta_l(E, r)}{dr} = -\frac{2W_l^{mct}(r)}{\sqrt{2E}} (\cos[\delta_l(E, r)]j_l(kr) - \sin[\delta_l(E, r)]n_l(kr))^2 \\ \frac{d}{dr} \left[\frac{d}{dE} \{\delta_l(E, r)\} \right] = -\frac{1}{2E} \frac{d\delta_l(E, r)}{dr} - \frac{4W_l^{mct}(r)}{\sqrt{E}} \frac{d}{dE} \{\delta_l(E, r)\} \times \\ \times (\sin[\delta_l(E, r)]j_l(kr) + \cos[\delta_l(E, r)]n_l(kr)) (\cos[\delta_l(E, r)]j_l(kr) - \sin[\delta_l(E, r)]n_l(kr)) \end{cases}$$

В наближенні одновузлової T -матриці з псевдопотенціалом враховано особливості перехідних металів при розрахунку енергетичного спектру та щільності станів. Результати розрахунків щільності станів для Fe приведено на Рис. 4. Крива 1 ілюструє внесок потенціального доданку щільності станів ($\times 20$), а внеску ефектів $s-d$ та $d-d$ взаємодії відповідають криві 2 і 3, які визначені із співвідношень для наближення одновузлової T -матриці, оскільки відділити внесок кожного типу взаємодії неможливо. Аналіз розрахунку як на основі теорії розсіяння (крива 4), так і по теорії збурень за псевдопотенціалом (крива 5) вказує на близькість отриманих результатів.

З врахуванням того, що $z = \int_0^{E_f} N(E) dE$, знайдено енергію Фермі і складові щільності станів, рідких перехідних металів для цього значення енергії.

А з умови того, що $E_f - E(0) = k_f^2/2 + \langle k_f | W | k_f \rangle - \langle 0 | W | 0 \rangle$ отримано значення фермієвського вектора. Результати розрахунку щільності станів свідчать, що підхід як через метод фазових функцій, так і за теорією збурень дають близькі значення, які добре корелюють з розрахунками інших авторів.

Основні результати та висновки

Розглянутий підхід до побудови псевдопотенціалів з формалізму теорії розсіяння є узагальнюючим, оскільки запропоновані критерії, що накладаються на структуру модельного нелокального псевдопотенціалу, придатні для довільного псевдопотенціалу і можуть бути використані для першопринципних псевдопотенціалів — ультра-м'яких та зберігаючих норму. Результати розрахунку фізичних властивостей свідчать на те, що побудовані так псевдопотенціали можуть бути поширені на інші об'єкти досліджень.

Список робіт, опублікованих за матеріалами дисертації:

Основні результати досліджень, викладених в дисертації, були представлені на 3 міжнародних конференціях, а також опубліковані в таких працях:

1. В.В. Фурман, П.М. Якібчук. Псевдопотенціал в методі фазових функцій. Структура модельного псевдопотенціалу перехідних та рідкісноземельних металів. //Журнал фізичних досліджень, 1996, 1, N1, с.134-147с.
2. В.В. Фурман, П.М. Якібчук, С.О. Вакарчук. Врахування впливу нелокальності псевдопотенціалу у розрахунках фізичних властивостей металів. //Вісник Львівського університету. Серія фізична. Фізика середовищ з керованими властивостями, вип. 27, 1995, с.6-11.
3. Вакарчук С.О., П.М. Якібчук, В.В. Фурман, М.І. Жовтанецький. Дослідження нелокальності модельного псевдопотенціалу. //Вісник Львівського університету. Серія фізична. Проблеми фізики конденсованого стану, вип. 20, 1986, с.3-10.
4. М.І. Жовтанецький, П.М. Якібчук, В.В. Фурман. Розрахунок формфакторів модельного псевдопотенціалу перехідних металів у повній нелокальній теорії. //Вісник Львівського університету. Серія фізична. Проблема фізики твердого тіла, вип. 19, 1985, с.3-10.
5. Я.Й. Дутчак, В.В. Фурман, П.М. Якібчук, Г.І. Варляк, В.І. Кушаба. Про методику визначення параметрів модельного псевдопотенціалу. Вісник Львівського університету. Серія фізична. Фізика металів, вип. 18, 1984, с.5-10.
6. Якібчук П.Н., Вакарчук С.А., Фурман В.В., Моторшок І.І. Модельный псевдопотенциал редкоземельных металлов. //Препринт ИТФ АН УССР - 87-132Р, Киев, 1987, 12 с.
7. Вакарчук С.А., Якібчук П.Н., Фурман В.В. Электроный спектр и плотность состояний неупорядоченных металлов. //Физика многочастичных систем. АН УССР, 1989, вип.15, с.27-33.
8. Vakarchuk S.A., Yakibehuk P.M., Furman V.V. Electron spectrum and density state for disordered

metals. Physics in Ukraine. //International Conference. Proceedings Contributed Papers. Statistical Physics and Phase Transition. Kiev, Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, 1993, p.175-178.
9. В.В. Фурман. Оптимізація вибору параметрів нелокального модельного псевдопотенціалу. //Тези доповідей Міжнародної наукової конференції присвяченої 150-річчю від дня народження видатного українського фізика і електротехніка Івана Пулюя. Львів, 1995, с.90.

Fourman V. V. The pseudopotential within scattering theory. Transition and rare-earth metals

Thesis for conferring on Ph. degree of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.02 - theoretical physics.

L'viv Ivan Franko State University, L'viv, 1997

9 scientific works containing the results of theoretical investigations are defended. The criterions of construction of model pseudopotentials for transition and rare-earth metals and their formfactors on the base of the phase functions formalism, that takes into account effects of hybridization and spin-orbit coupling, have been suggested; the methods of finding of the parameters have been proposed; the equations for density of states for disordered metals have been derived for the first time.


Фурман В. В. Псевдопотенциал в теории рассеяния. Переходные и редкоземельные металлы

Автореферат диссертации на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 - теоретическая физика.

Львовский государственный университет имени Ивана Франко, Львов, 1997.

К защите представлены результаты исследований, изложенные в 9 научных статьях. На основании метода фазовых функций впервые предложены: критерии построения модельных псевдопотенциалов переходных и редкоземельных металлов и их формфакторов с учетом гибридизации и спин-орбитального взаимодействия; методика нахождения параметров модельного нелокального псевдопотенциала; уравнения для плотности состояний неупорядоченного металла.

Ключові слова: теорія розсіяння, амплітуда, фаза, псевдопотенціал, нелокальність, гібридизація, спин-орбітальна взаємодія.



АВ 36.963

Підлясло до друку 29.01.97. Формат 60x84/16. Папір друк. М1.
Друк офсетн. Умова. друк. арк. 1,25. Обл.-вид. арк. 1,25.
Умова. сарб. відб. 1,3. Тираж 100. Зам. 29.
Машинно-офсетна лабораторія Львівського державного університету
ім. Івана Франка. 29С602 Львів, вул. Університетська, 1.