УДК 539.2

НОВЫЙ ГЛАДКИЙ НЕЛОКАЛЬНЫЙ МОДЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ПРОСТЫХ МЕТАЛЛОВ

О. В. Крисько, В. М. Силонов, Т. В. Скоробогатова, Д. П. Бокарев

(*кафедра физики твердого тела*)

E-mail: sols333@phys.msu.ru

Предложен новый гладкий нелокальный модельный потенциал простых металлов, формфактор которого свободен от нефизических осцилляций.

Модельные потенциалы широко применяются для описания физических свойств металлов [1–3]. Наиболее часто используемым является квазилокальный модельный потенциал Хейне–Абаренкова–Анималу [4, 5]. Был предложен ряд локальных модельных потенциалов [6–10]. К недостаткам большинства из этих потенциалов можно отнести наличие у их формфакторов нефизических осцилляций. Лишь у формфакторов локальных модельных потенциалов [10] отсутствуют нефизические осцилляции. Однако в работе [10] учет нелокальных эффектов не проводился.

В настоящей работе предлагается гладкий нелокальный модельный потенциал иона простого металла (ГНМП). В основе введения гладкого модельного потенциала лежат следующие положения:

1) функция, описывающая гладкий потенциал, и ее производные не должны иметь особенностей при любых r;

2) решения уравнения Шрёдингера для свободного иона с ГНМП должны совпадать с собственными значениями внешнего электрона в поле истинного потенциала иона (с экспериментальными значениями термов);

3) волновая функция внешнего электрона, получающаяся в результате решения уравнения Шрёдингера с ГНМП, должна совпадать с волновой функцией кулоновского потенциала при $r > R_a$, где R_a — радиус атома;

4) формфактор ГНМП должен иметь аналитическое выражение;

5) формфактор ГНМП не должен иметь нефизических осцилляций в обратном пространстве, которые при расчетах для металлов и сплавов обусловливают плохую сходимость характеристик, связанных с суммированием по векторам обратной решетки [11]. Этим требованиям удовлетворяет следующий потенциал:

$$V(r) = \sum_{l=0}^{\infty} U_l(r), \tag{1}$$

где

$$U_l(r) = -\frac{2Z}{r} - \left(A_l(\varepsilon) - \frac{2Z}{r}\right)\frac{1}{[1+(r/R_m)^2]^K}, \tag{2}$$

ε — энергия рассеивающегося электрона в поле свободного иона, l — орбитальное квантовое число, Z — валентность иона, r — расстояние от центра иона в прямом пространстве, R_m — параметр, характеризующий радиус модельной сферы, $A_l(\varepsilon)$ — параметр, характеризующий глубину потенциальной ямы ГНМП для каждого l, K — целочисленная степень, вариация которой позволяет переходить от ступенчатого потенциала Хейне–Абаренкова–Анималу к гладкому потенциалу. В выражении (2) можно выделить локальную, независящую от ε и l, и нелокальную, зависящую от ε и l, части. Для случая простого металла, как и в [12], положим все A_l для $l > 2$ равными $C = A_2$. Тогда (2) запишем в виде суммы локальной и нелокальной частей

$$V(r) = V_L(r) + V_{NL}(r), \tag{3}$$

где

$$V_L(r) = -\frac{2Z}{r} + \frac{2Z}{r}\frac{1}{[1+(r/R_m)^2]^K} - \frac{C}{[1+(r/R_m)^2]^K}, \tag{4}$$

$$V_{NL}(r) = -\sum_{l=0}^{2}(A_l - C)\frac{1}{[1+(r/R_m)^2]^K}P_l, \tag{5}$$

Для описания физических свойств металлов и сплавов необходим переход от атома к кристаллу. Матричный элемент ГНМП можно также представить в виде суммы локальной и нелокальной частей

$$\langle \mathbf{k}+\mathbf{q}|V_K(r,E)|\mathbf{k}\rangle = B_K(q) + F_K(\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q};E), \tag{6}$$

где

$$B_K(q) = \frac{4\pi}{\Omega}\int_0^{\infty} V_{L,K}(r)\frac{\sin qr}{qr}r^2\,dr.$$

Разбивая $V_{L,K}$ на сумму двух членов: одного, имеющего аналитический вид, и другого — в виде интеграла, берущегося лишь численно, запишем:

$$B_K(q) = \frac{4\pi Z}{\Omega q^2}[-B_{1,K}(q) + B_{2,K}(q)], \tag{7}$$

где для степени $K = 4$

$$B_{1,4}(q) = 1 + C\frac{\pi R_m X}{96Z}e^{-X}(3X + 3X^2 + X_4),$$

$$B_{2,4} = X \int_0^\infty \frac{\sin t}{(1+t^2)^4} dt, \quad X = qR_m.$$

Нелокальная часть формфактора ГНМП для случая степени $K = 4$ имеет вид

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}; E) = -\frac{4\pi R_m^3}{\Omega} \times \\ \times \sum_{l=0}^{2} [2l+1][A_l(E) - C] D_l(\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}) P_l(\cos\Theta), \tag{8}$$

где Θ — угол между векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}+\mathbf{q}$,

$$A_l(E) = A_l(E_F) + \frac{dA_l(E)}{dE}\Big|_{E=E_F} (E - E_F),$$

где E_F — энергия электрона на уровне Ферми, отсчитанная от дна зоны проводимости металла. Вводя обозначения $b = |\mathbf{k}+\mathbf{q}| \cdot R_m$, $a = |\mathbf{k}| \cdot R_m$, $R = b - a$, $S = b + a$, следующие интегралы:

$$D_l(\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}) = \frac{1}{ab} \int_0^\infty \left[\frac{j_l(at) j_l(bt)}{(1+t^2)^4} \right] t^2\, dt$$

— можно взять аналитически. Тогда

$$D_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}) = \frac{1}{ab} \left(f^0(R) - f^0(S) \right) \frac{\pi}{192},$$

$$D_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}) = \frac{1}{(ab)^2} \left[\left(f^1(S) + abf^0(S) \right) - \right. \\ \left. - \left(f^1(R) + abf^0(R) \right) \right] \frac{\pi}{192},$$

$$D_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}) = \frac{-3}{(ab)^3} \left[\left(f^2(S) + abf^1(S) \right) - \right. \\ \left. - \left(f^2(R) - abf^1(R) \right) \right] \frac{\pi}{192} + D_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}),$$

где $f^0(x) = e^{-x}(15 + 15x + 6x^2 + x^3)$, $f^1(x) = e^{-x}(105 + 105x + 45x^2 + 10x^3 + x^4)$, $f^2(x) = e^{-x}(945 + 945x + 420x^2 + 105x^3 + 15x^4 + x^5)$.

Таким образом, как видно из выражений (7) и (8), в отличие от формфакторов типа Хейне–Абаренкова–Анималу, матричные элементы ГНМП не содержат тригонометрических функций, зависящих от вектора рассеяния. Матричные элементы ГНМП с ростом вектора рассеяния убывают по экспоненциальному закону и не содержат нефизических осцилляций. Численное решение уравнения Шрёдингера с предложенным в этой работе ГНМП показало, что сформулированные в начале статьи условия соблюдаются. Методика получения параметров ГНМП с использованием спектроскопических данных свободных ионов и уравнения Шрёдингера будет приведена в следующей работе.

Литература

1. *Харрисон У.* Электронная структура и свойства твердых тел. Физика химической связи. М., 1983.
2. Достижения электронной теории металлов / Под ред. П. Цише, Г. Леманна. М., 1984.
3. *Силонов В.М.* Введение в микроскопическую теорию твердых растворов. М., 2005.
4. *Abarenkov I.V., Heine V.* // Phil. Mag. 1965. **12**. P. 529.
5. *Animalu A.O.E., Heine V.* // Phil. Mag. 1965. **12**. P. 1249.
6. *Ashcroft N.W.* // Phys. Lett. 1966. **23**. P. 48.
7. *Yamada Y.* // Phys. Stat. Sol. (b). 1980. **102**, N 2. P. 629.
8. *Moriarty J.A.* // Phys. Rev. B. 1970. **1**, N 4. P. 1363.
9. *Харрисон У.* Псевдопотенциалы в теории металлов. М., 1968.
10. *Краско Г.Л., Гурский З.А.* // Письма в ЖЭТФ. 1969. **9**, № 10. С. 596.
11. *Займан Дж.* Вычисление блоховских функций. М., 1973.
12. *Heine V., Abarenkov* I. // Phil. Mag. 1964. **9**. P. 451.

Поступила в редакцию
20.09.05