

- [5] Слинкина М. В., Жуковский В. М., Зиангирова Л. Ш., Донцов Г. И., Жуковская А. С., Кочетыгов В. В. // Неорган. материалы. 1990. Т. 26. № 12. С. 2634—2637.
 [6] Окадзаки К. Технология керамических диэлектриков. М.: Энергия, 1976. 336 с.
 [7] Roubort J. L., Rothman S. J., Nan Chen, Mundy J. N. // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. N 7. P. 5489—5497.

Физико-технический институт
 им. А. Ф. Иоффе РАН
 Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию
 12 февраля 1992 г.

© Физика твердого тела, том 34, № 6, 1992
 Solid State Physics, vol. 34, N 6, 1992

РАСЧЕТ МОДУЛЕЙ ВСЕСТОРОННЕГО СЖАТИЯ α -МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ РЕЗОНАНСНОГО МОДЕЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА

В. М. Силонов, О. В. Крисько

Модули всестороннего сжатия являются одной из важных характеристик металлов [1, 2]. Их значения, найденные экспериментально, приведены в [1]. В серии работ Дадженса [3–7] был предложен и апробирован резонансный модельный потенциал (РМП) для благородных металлов. В этих работах было получено удовлетворительное совпадение результатов теоретических расчетов некоторых физических свойств с экспериментальными данными. В [8–11] теория РМП была распространена на расчет ряда электронных свойств α -металлов и их сплавов.

Данная работа посвящена развитию метода РМП. В отличие от [3–7], где использовался энергонезависящий сдвиг в модельном гамилтониане переходного металла, в данной работе рассмотрен случай энергозависящего сдвига. Это позволило расширить сферу применения РМП на переходные металлы с $z_d > 6$. Развитый формализм применен для расчета модулей всестороннего сжатия этих металлов.

В соответствии с [12] модули всестороннего сжатия B могут быть представлены в виде

$$\Omega_a B = F_0 + \Omega_a B_{bs} + \Omega_a B_{es}, \quad (1)$$

где

$$\Omega_a B_{bs} = \Omega_a^2 \frac{d^2 u_{bs}^{str}}{d\Omega_a^2}, \quad (2)$$

$$\Omega_a B_{es} = \Omega_a^2 \frac{d^2 u_{es}}{d\Omega_a^2}, \quad (3)$$

$$F_0 = \lim_{q \rightarrow 0} \left[F_{bs}(q) + \frac{4\pi z_{eff}^2}{\Omega_a q^2} \right], \quad (4)$$

B_{es} и B_{bs} — вторые производные по объему электростатической и зонной энергий металла, u_{bs}^{str} — структурно-зависящая часть зонной энергии, z_{eff} — эффективный заряд. Входящие в эти выражения члены, связанные с энергией зонной структуры, рассчитывались с помощью предложенного в работе метода энергозависящего сдвига.

В основе метода [4] лежит связь энергии одноэлектронных состояний φ с интегральной плотностью электронных состояний $N(E)$

$$\varphi(E) = \sum_{E_k < E} E_k = \Omega \int_a^E E' dN(E'), \quad (5)$$

которая выражается через функцию Ллойда

$$L(z) = \text{Sp} \ln (H(z) - z), \quad (6)$$

где z — комплексная энергия, $H(z)$ — модельный гамильтониан. Дадженсом [4] было предложено выражение

$$\varphi = \varepsilon_d^c + Nz_s E_F - \frac{1}{2\pi i} \int_{C(E_F)} L(H(z) - z) dz, \quad (7)$$

используя которое можно записать в явном виде выражение характеристической функции переходного металла. Для этого он провел замену переменных

$$z' \longrightarrow z - \Delta E_F,$$

$$v'(E) \longrightarrow v(E) - \Delta E_F.$$

Однако в случае переходных металлов более последовательным является выбор энергезависящего сдвига

$$\Delta(E) = \frac{\Delta_0}{E - \varepsilon},$$

где Δ_0 — константа, характеризующая величину сдвига. Можно показать, что в этом случае

$$\varphi = \varphi_0 + \varphi_1 + \varphi_2 + \dots,$$

где

$$\varphi_2 = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C(E_F)} \frac{1}{2} \text{Sp} \left[\frac{v'(z)}{z - H_0 - \Delta(z)} \right]^2 dz. \quad (8)$$

Используя это выражение, характеристическую функцию переходного металла запишем в виде

$$F_{bs}(q) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{v^{sc}(q) \Pi^2 [\Omega \tilde{v}_u(q, k, z)]}{\varepsilon^*(q)} + \Pi [\Omega \tilde{v}_u^2(q, k, z)] + v_{\text{dpl}}^2(q) / v^{sc}(q) \right\}, \quad (9)$$

где

$$\Pi \left[\Omega \frac{u(q, k)}{z - \varepsilon_r} \right] = 4 \sum_{k > k_F} \frac{1}{E_k^0 - E_{k'}^0} \frac{u(q, k)}{E_k^+ - \varepsilon_d} f_{k'}', \quad (10)$$

$$\Pi \left[\Omega \left(\frac{u(q, k)}{z - \varepsilon_r} \right)' \right] = 4 \sum_{k > k_F} \frac{1}{E_k^0 - E_{k'}^0} \left[\frac{u(q, k)}{E_k^+ - \varepsilon_d} \right] f_{k'}', \quad (11)$$

$$f_{k'}' = (E_k^+ - \varepsilon_d) / F(E_k^0, \varepsilon_d), \quad (12)$$

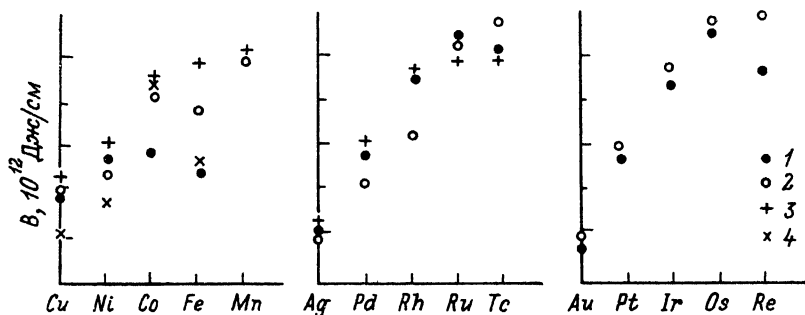
$$E_k^+ = \frac{1}{2} [E_k^0 + \varepsilon_d + F(E_k^0, \varepsilon_d)], \quad (13)$$

$$F(E_k^0, \varepsilon_d) = \sqrt{(E_k^0 - \varepsilon_d)^2 + 4\Delta_{\text{eff}}}, \quad (14)$$

$$\Delta E_{\text{eff}} = (E_F - E_F^0) (E_F - E_d^0). \quad (15)$$

Расчет характеристической функции $F_{bS}(q)$ может быть проведен приближенно аналогично [13] с последующей нормировкой на точное значение при $q=0$.

Результаты расчета модулей всестороннего сжатия и экспериментальные значения [1] приведены на рисунке. Там же приведены данные расчетов из первых принципов [2] и методом РМП [14] для 3 d - и 4 d -металлов. Видно, что наблюдается удовлетворительное согласие результатов наших расчетов с экспериментальными данными. Исключением является расхождение в случае марганца. Для 3 d - и 4 d -металлов наши результаты согласуются с расчетами [2, 14]. Также видно, что для 5 d -металлов результаты наших расчетов находятся в лучшем согласии с экспериментальными данными, чем для 3 d - и 4 d -металлов. Отметим, что теоретические расчеты модулей всестороннего сжатия для 5 d -металлов ранее не проводились. Результаты данной работы в совокупности с ранее проведенными расчетами ряда атомных и электронных свойств переходных металлов свидетельствуют о реалистичности метода резонансного модельного потенциала.



Упругие модули всестороннего сжатия d -металлов.

1 — эксперимент [1], 2 — наши расчеты, 3 — расчеты из первых принципов [2], 4 — расчеты методом РМП [14].

- [1] Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978.
- [2] Moruzzi V. L., Janak J. F., Williams A. R. Calculated electronic properties of metals. N. Y.: Pergamon Press, 1978. 188 p.
- [3] Dagens L. // J. Phys. C: Solid State Phys. 1975. V. 8. P. L581.
- [4] Dagens L. // J. Phys. F: Metal Phys. 1976. V. 6. N 10. P. 1801.
- [5] Dagens L. // J. Phys. F: Metal Phys. 1977. V. 7. N 7. P. 1167.
- [6] Dagens L. // J. Phys. F: Metal Phys. 1972. V. 8. N 2. P. L21.
- [7] Lam N. Q., Dagens L. // J. Phys. F: Metal Phys. 1973. V. 16. P. 1373.
- [8] Силонов В. М., Крисько О. В., Кацнельсон А. А. // Металлофизика. 1988. Т. 10. № 2. С. 12.
- [9] Силонов В. М., Крисько О. В., Кацнельсон А. А. // Металлофизика. 1990. Т. 12. № 3. С. 7.
- [10] Силонов В. М., Крисько О. В., Кацнельсон А. А. // Вестник МГУ. Сер. физика, астрономия. 1990. Т. 31. № 1. С. 81.
- [11] Кацнельсон А. А., Крисько О. В., Силонов В. М., Скоробогатова Т. В. // Металлофизика. 1988. Т. 10. № 3. С. 103.
- [12] Wallace D. P. // Phys. Rev. 1969. V. 182. P. 778.
- [13] Силонов В. М., Крисько О. В., Кацнельсон А. А. // Препринт МГУ. 1986. № 4.
- [14] Юрьев А. А. // Тез. научных сообщений V Всес. конф. по строению и свойствам металлических и шлаковых расплавов. УНЦ АН СССР, 1983. С. 175.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило в Редакцию
1 октября 1991 г.
В окончательной редакции
19 февраля 1992 г.