

ICMP-00-05U

П.М.Якібчук, С.О.Вакарчук\*

Густина станів неупорядкованих металів

\*Львівський державний університет ім. І.Я.Франка, 290000 Львів,  
вул. Університетська 1

УДК: 669-405.01

PACS: 73.61.At

### Густина станів неупорядкованих металів

П.М.Якібчук, С.О.Вакарчук

**Анотація.** Для розрахунку енергетичного спектру та густини станів електронів провідності використовується варіаційний підхід. Отримано вирази для  $E(w)$  та  $N(E)$ , які є більш загальними ніж ті, що виходять з теорії збурень. Зокрема, в частинних випадках отримуються результати теорії збурень Брилюена-Вігнера та Релея-Шредінгера. Приведені результати чисельних розрахунків густини станів різних металів

### Density state of disordered metals

P.M.Jakibchuk, I.O.Vakarchuk

**Abstract.** The approach for evaluation of energy spectrum and conduction electron's density state has been used. The expressions for  $E(k)$  and  $N(E)$  are obtained and there are more general than those yielded by means of perturbation theory. The results of last approach in form of Brilluen-Wigner and Relay-Shrodinger may be obtained in particular cases. The density state estimation for liquid metals are represented.

Подається в Журнал фізичних досліджень  
Submitted to Journal of Physical Studies

## 1. Вступ.

Топологічно непорядковані металеві системи, такі, як рідкі та аморфні метали, металеве скло інтенсивно досліджуються в останні роки у зв'язку з перспективністю їх практичного застосування. Інтерес до цих об'єктів зумовлений наявністю в них таких фізичних властивостей, якими не володіють традиційні кристалічні матеріали. Проблема опису фізичних властивостей структурно непорядкованих систем до сьогоднішнього дня залишається однією з найбільш актуальних і до кінця не розв'язаних задач теорії конденсованого стану.

Особливу зацікавленість у фізиці непорядкованих металів викликає питання про утворення на кривій густини станів "псевдозаборононої зони" [1,2]. Традиційний підхід до вивчення цієї проблеми пов'язаний з використанням формалізму методу функцій Гріна [3–6]. Зокрема, в працях Баллентайна [3,4] густина станів  $N(E)$  виражалась через спектральну функцію густини станів  $\rho(\vec{k}, E)$ , яка в свою чергу визначалась уявною частиною функції Гріна  $G(\vec{k}, E)$

$$\rho(\vec{k}, E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} Sp G(\vec{k}, E) \quad (1)$$

$$G(\vec{k}, E) = \left[ E - k^2 - \Sigma_2(\vec{k}, E) \right]^{-1} \quad (2)$$

Для знаходження сліду функції Гріна вираховувалась дійсна та уявна частина масового оператора  $\Sigma_2(\vec{k}, E)$  з використанням співвідношення Баллентайна [3]

$$R_2 \Sigma_2(\vec{k}, E) = -\frac{n}{8\pi^2 k} \int_0^\infty q |W(q)|^2 S(q) \ln \left| \frac{(q+k)^2 - F}{(q-k)^2 - F} \right| dq$$

$$\text{Im} \Sigma_2(\vec{k}, E) = -\frac{n}{8\pi k} \int_{|k-\sqrt{E}|}^{|k+\sqrt{E}|} q |W(q)|^2 S(q) dq \quad (3)$$

де:  $n$  – атомна густина;  $S(q)$  – структурний фактор;  $w(q)$  – екранований формфактор модельного потенціалу (МП);  $F = E - \Sigma_2(\vec{k}, E)$  – співвідношення Баллентайна.

Поруч з формалізмом функцій Гріна існує інший підхід до вивчення електронної структури непорядкованих металів, що базується на використанні варіаційного принципу [7].

## 2. Розрахунок густини станів.

В праці [7] за допомогою варіаційного розрахунку з використанням однопараметричної хвильової функції для енергетичного спектру електронів провідності та густини електронних станів, віднесеної до густини станів вільних електронів, отримані формули:

$$E(\vec{k}) = \hbar^2 (k^2 + \Delta_k) / 2m \quad (4)$$

$$\Delta_k = \frac{\Omega}{8\pi^2 N I_k} \int_0^\infty dq q^2 \frac{S_{ei}^2(\vec{q})}{S(\vec{q})} \left\{ q^2 - \frac{q^4 - \Delta_k^2}{4kq} \times \right.$$

$$\left. \times \ln \left| \frac{q^2 - \Delta_k + 2kq}{q^2 - \Delta_k - 2kq} \right| + \frac{\Delta_k (q^2 + \Delta_k)^2}{[(q^2 - \Delta_k)^2 - (2kq)^2]} \right\} \quad (5)$$

$$I_k = 1 + \frac{\Omega}{8\pi^2 N} \int_0^\infty dq q^2 \frac{S_{ei}^2(q)}{S(q)} \left\{ -3 + \frac{q^2 + \Delta_k}{2kq} \times \right.$$

$$\left. \times \ln \left| \frac{q^2 - \Delta_k + 2kq}{q^2 - \Delta_k - 2kq} \right| + \frac{(q^2 + \Delta_k)^2}{[(q^2 - \Delta_k)^2 - (2kq)^2]} \right\} \quad (6)$$

$$g(E) = \left\{ 1 + \frac{\Omega}{16\pi^2 N k^2 I_k} \int_0^\infty dq q^2 \frac{S_{ei}^2(q)}{S(q)} \left[ \frac{(q^2 + \Delta_k)^2}{4kq} \times \right.$$

$$\left. \times \ln \left| \frac{q^2 - \Delta_k + 2kq}{q^2 + \Delta_k - 2kq} \right| - \frac{(q^2 - \Delta_k)(q^2 + \Delta_k)^2}{[(q^2 + \Delta_k)^2 - (2kq)^2]} \right] \right\}_{B(k)=B}^{-1} \quad (7)$$

Тут  $S_{ei}(\vec{q})$  – електрон-іонний структурний фактор

$$S_{ei}(q) = \frac{N}{V} \int \exp(iqR) [F_{ei}(R) - 1] dR \quad (8)$$

де  $F_{ei}(R)$  – парна функція розподілу, яка описує електрон-іонну кореляцію в системі,  $N$  – число іонів;  $V$  – об'єм металу. Необхідно підкреслити ту обставину, що електрон-іонна взаємодія входить в теорію саме через функцію  $S_{ei}(\vec{q})$ . У випадку, коли формфактор екранованого електрон-іонного псевдопотенціалу  $W(q)$  є малою величиною, структурний фактор в нульовому наближенні має вигляд [7]

$$S_{ei}(q) = -\frac{2N}{V} w(q) S(q) / \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \quad (9)$$

Інтегральні рівняння (4)-(7) є більш загальними, ніж результати класичної теорії збурень. Останні отримуються в граничних випадках при умові малості формфактора екранованого псевдопотенціалу. Зокрема, результат теорії збурень Релея-Шредінгера отримується, якщо  $I_k$  в (5) замінити на одиницю і  $\Delta_k$  в правій частині рівнянь (4) і (7) покласти рівним нулю:

$$E^{\text{P-Ш}}(k) = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{V \hbar^2}{16\pi^2 N} \times \int_0^\infty dq q^2 \frac{S_{ei}(q)}{S(q)} \left\{ q^2 - \frac{q^3}{4k} \ln \left| \frac{q+2k}{q-2k} \right| \right\} \quad (10)$$

Результат теорії збурень Бриллюена-Вігнера отримується, якщо виконується та ж умова ( $I_k = 1$ ), а величина  $\Delta_k$  зберігається лише під знаком логарифма:

$$E^{\text{B-B}}(k) = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{V \hbar^2}{16\pi^2 N} \times \int_0^\infty dq q^2 \frac{S_{ei}(q)}{S(q)} \left\{ q^2 - \frac{q^3}{4k} \ln \left| \frac{q^2 - \Delta_k + 2kq}{q^2 - \Delta_k - 2kq} \right| \right\} \quad (11)$$

$$g^{\text{B-B}} = \left\{ 1 + \frac{V \hbar^2}{16\pi^2 N k^2} \int_0^\infty dq q^2 \frac{S_{ei}(q)}{S(q)} \times \left[ \frac{q^3}{4k} \ln \left| \frac{q^2 - \Delta_k + 2kq}{q^2 - \Delta_k - 2kq} \right| - \frac{q^4}{q^2 - 4k^2} \right] \right\}_{B(k)=B}^{-1} \quad (12)$$

Для ілюстрації цього підходу на рисунках 1-10 крім вільноелектронного наближення для  $N_0(E)$  (криві 1) приведені криві  $N(E) - g(E)N_0(E)$ , отримані в наближеннях теорії збурень Релея-Шредінгера (криві 2) та Бриллюена-Вігнера (криві 3), а також розрахунок у повній теорії за формулами (4)-(7) (криві 4) для ряду неупорядкованих простих металів.

При чисельному розрахунку  $N(E)$  використовувались теоретичні структурні фактори моделі твердих куль Ашкрофта-Лекнера [8].

Електрон-іонна взаємодія описувалась нелокальним модельним потенціалом вигляду [7].

$$\varpi(r) = -\frac{z}{r} + \sum_{i=0}^{l_0} \exp \left\{ -\frac{r}{R_i} \right\} \left( A_i + \frac{z}{r} \right) P_i \quad (13)$$

Тут  $P_l$  – проєкційний оператор;  $A_l$  і  $R_l$  – параметри МП (їх значення приведені в [9]). Підсумовування в (13) проводиться лише за тими значеннями орбітального квантового числа  $l$ , для яких існують зв'язані стани іонного залишку.

Як видно з рисунків, в області значень енергій порядку енергії Фермі ( $E \sim E_F$ ) результати розрахунку густини станів, отримані як з використанням обидвох наближень теорії збурень, так і повної теорії помітно відрізняються від результатів вільноелектронної теорії. Необхідно зазначити, що для більшості розглянутих металів криві  $N(E)$ , розраховані в рамках теорії збурення Релея-Шредінгера та Бриллюена-Вігнера розміщуються значно нижче за криву  $N(E)$ , отриману в повній теорії, хоча між собою вони відрізняються мало.

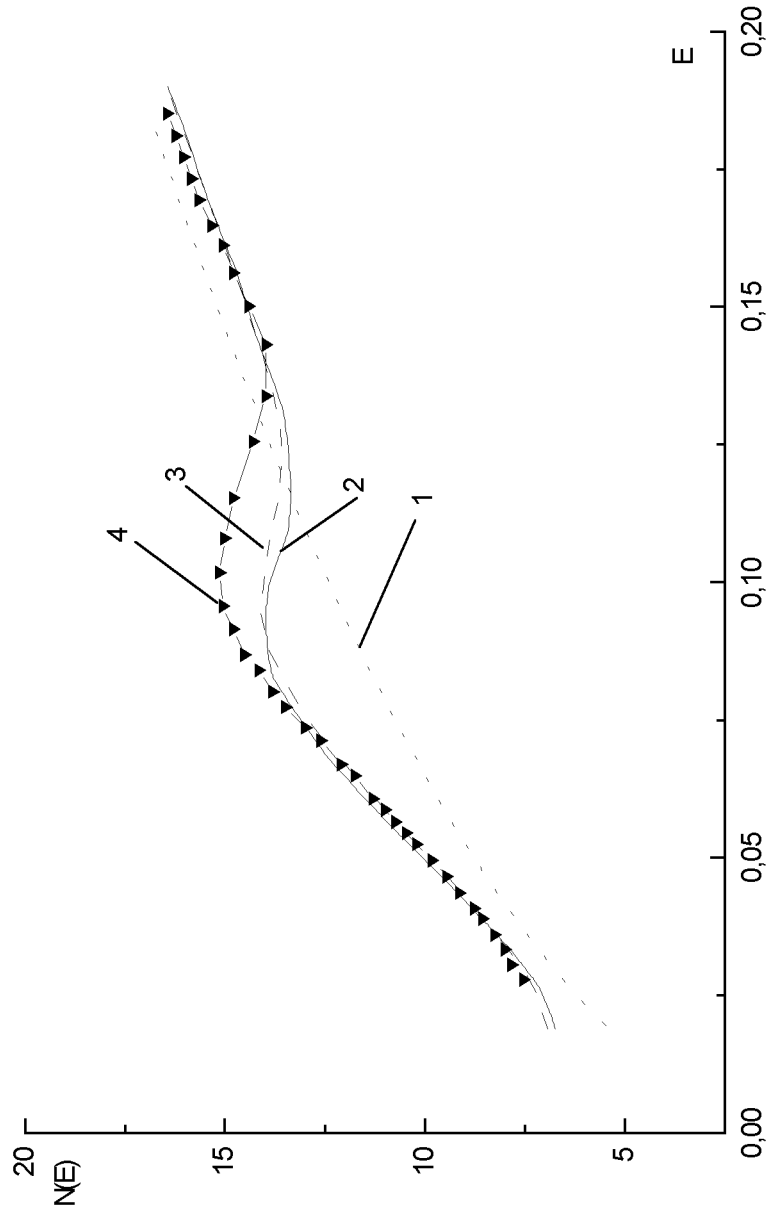


Рис. 1. Густина електронних станів для Na

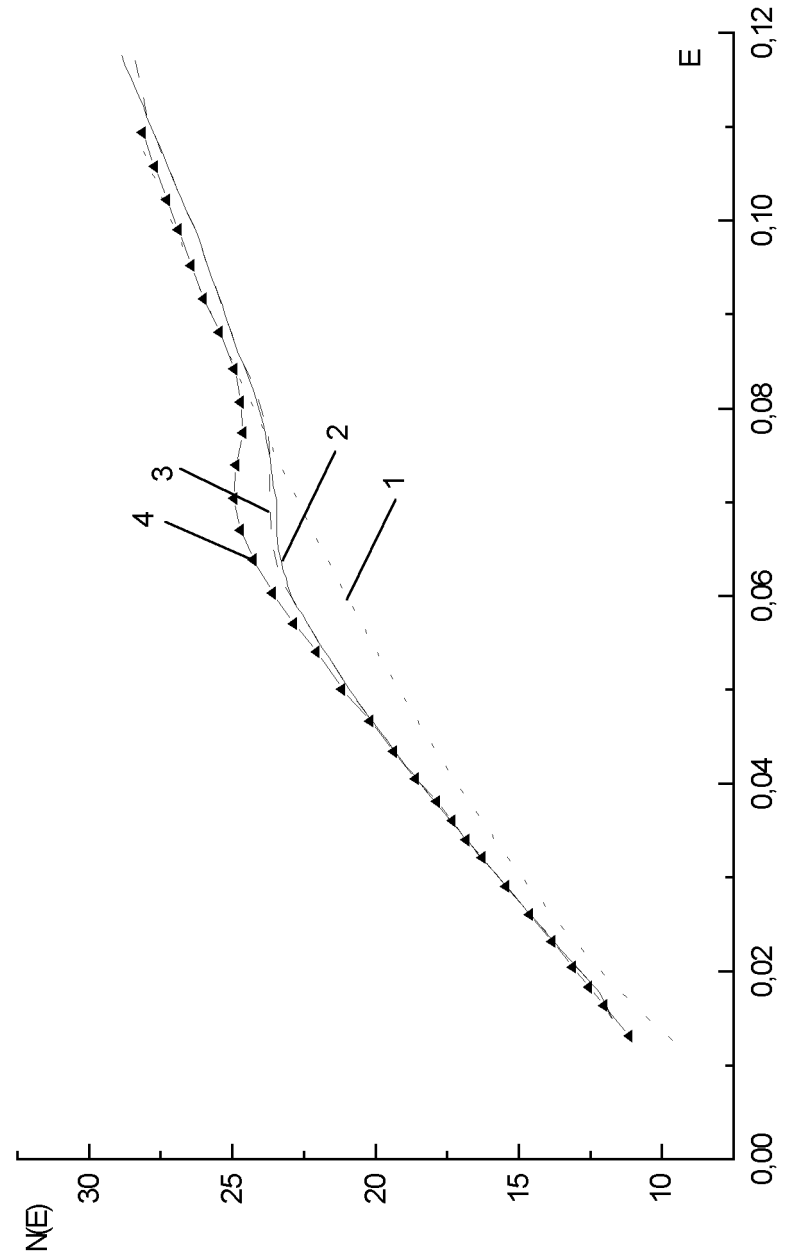


Рис. 2. Густина електронних станів для K

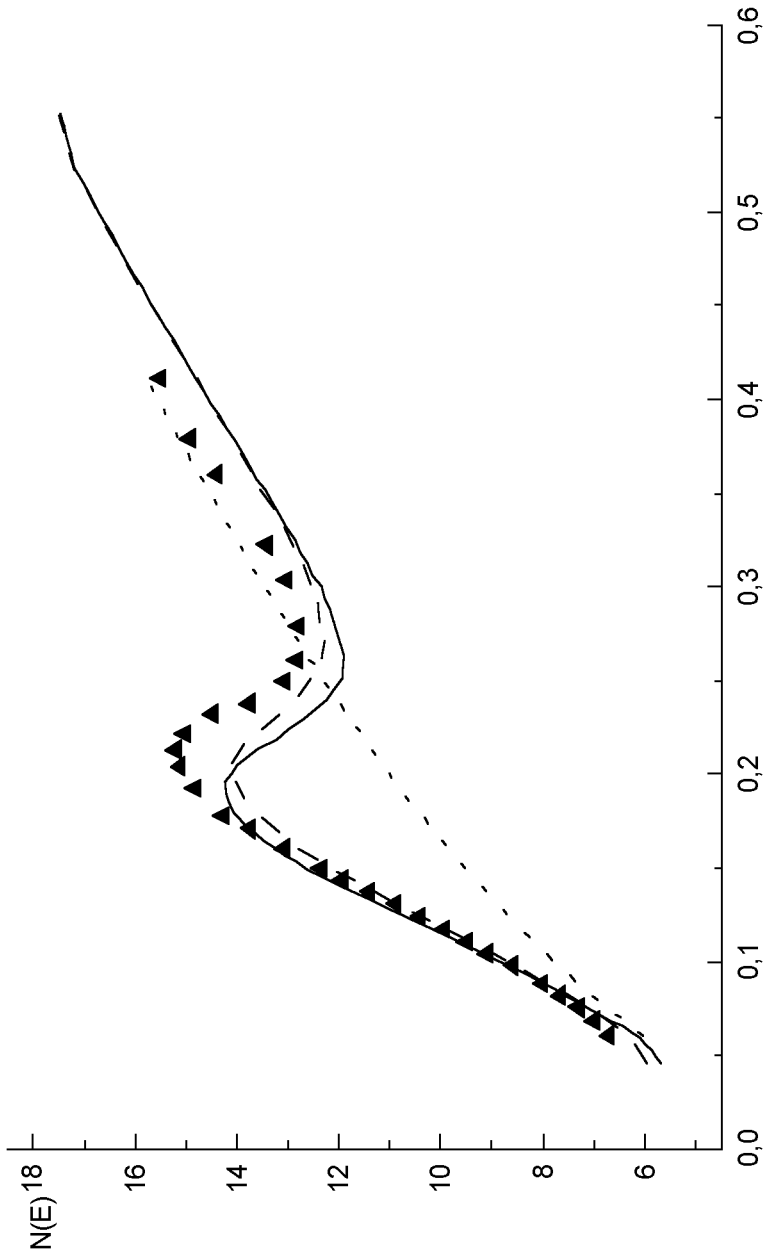


Рис. 3. Густина електронних станів для Mg

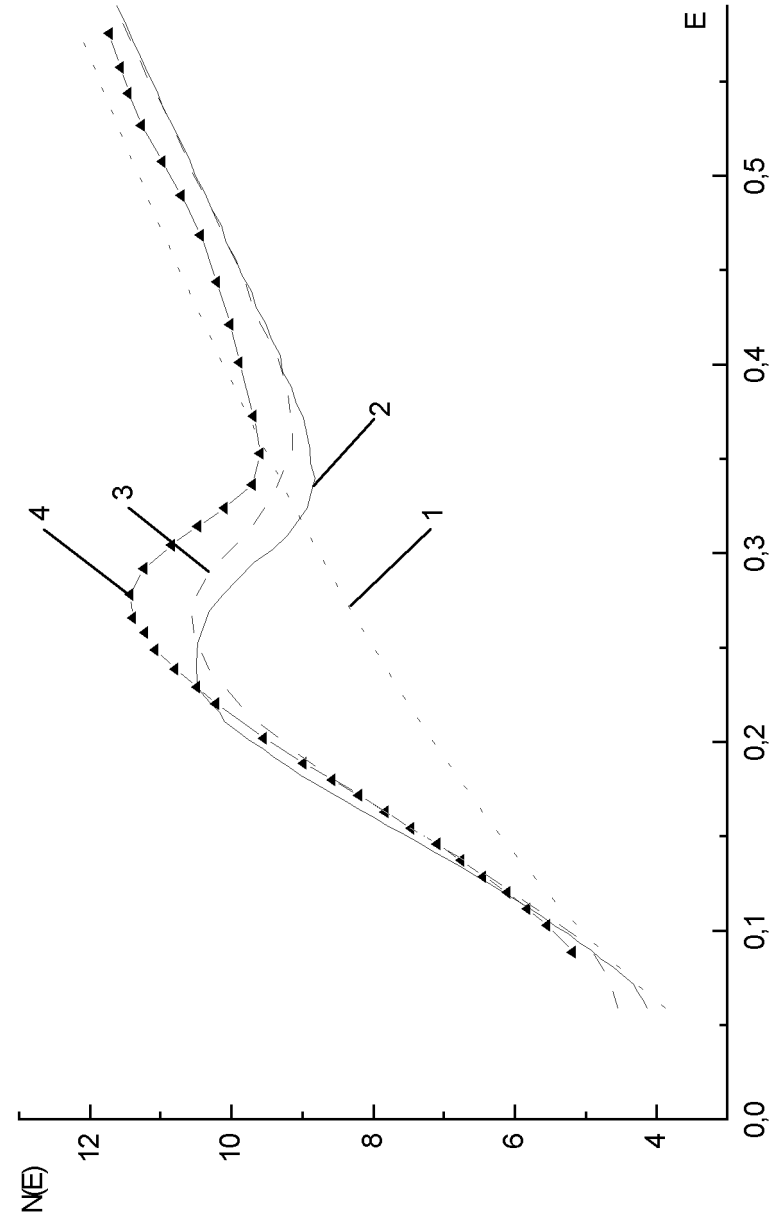


Рис. 4. Густина електронних станів для Zn

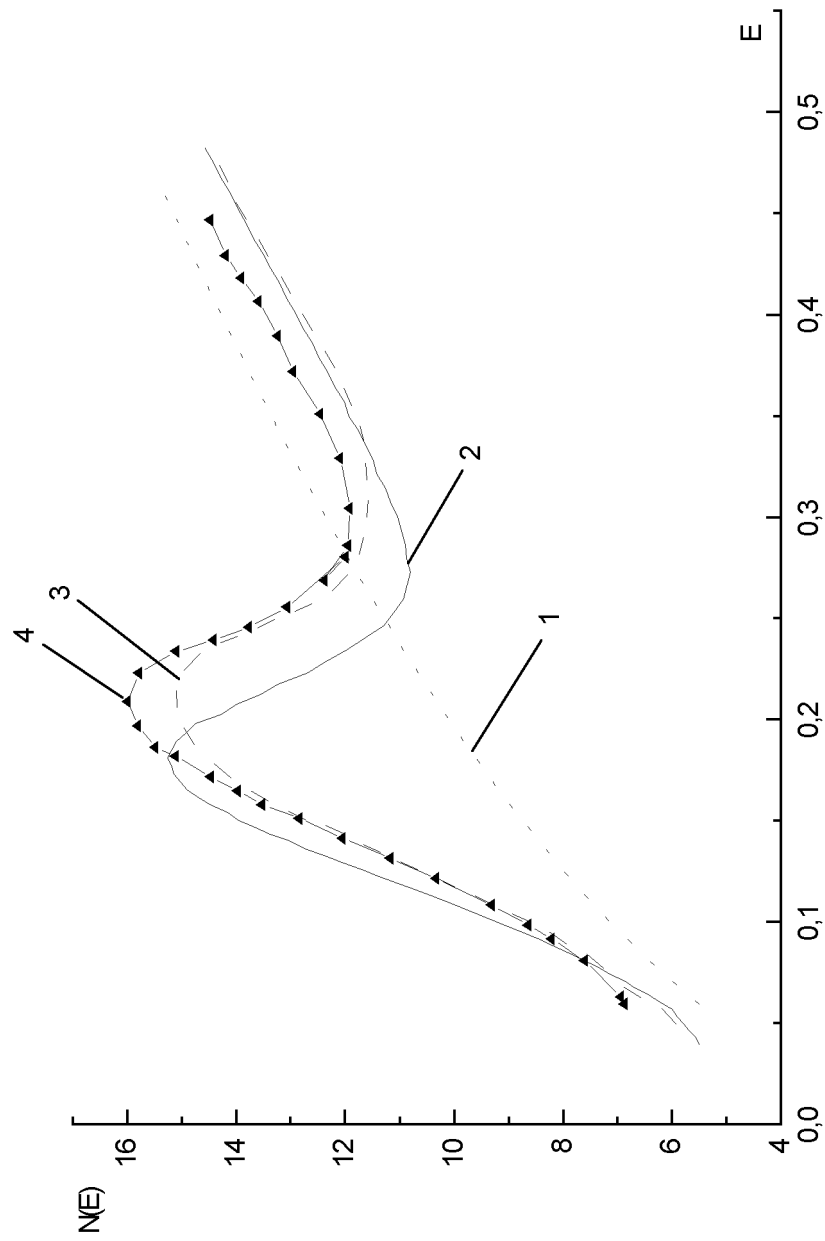


Рис. 5. Густина електронних станів для Cd

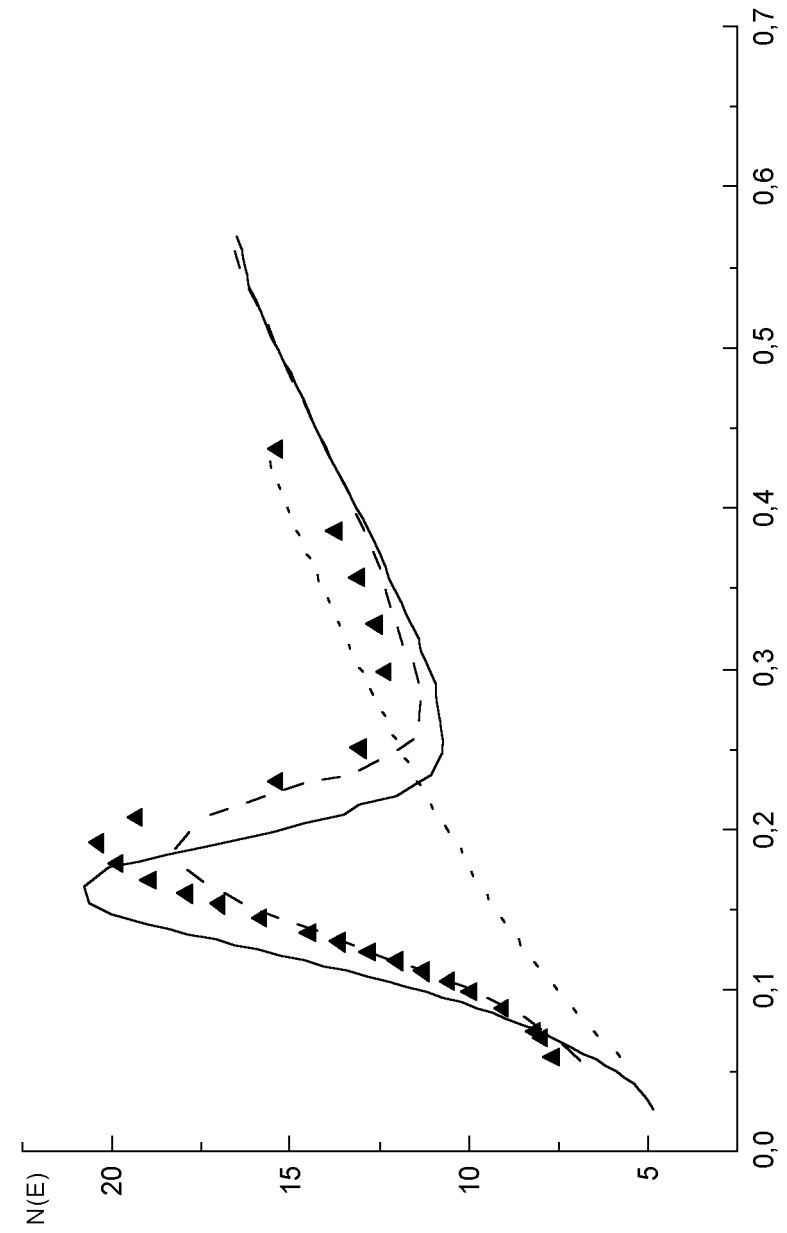


Рис. 6. Густина електронних станів для Hg

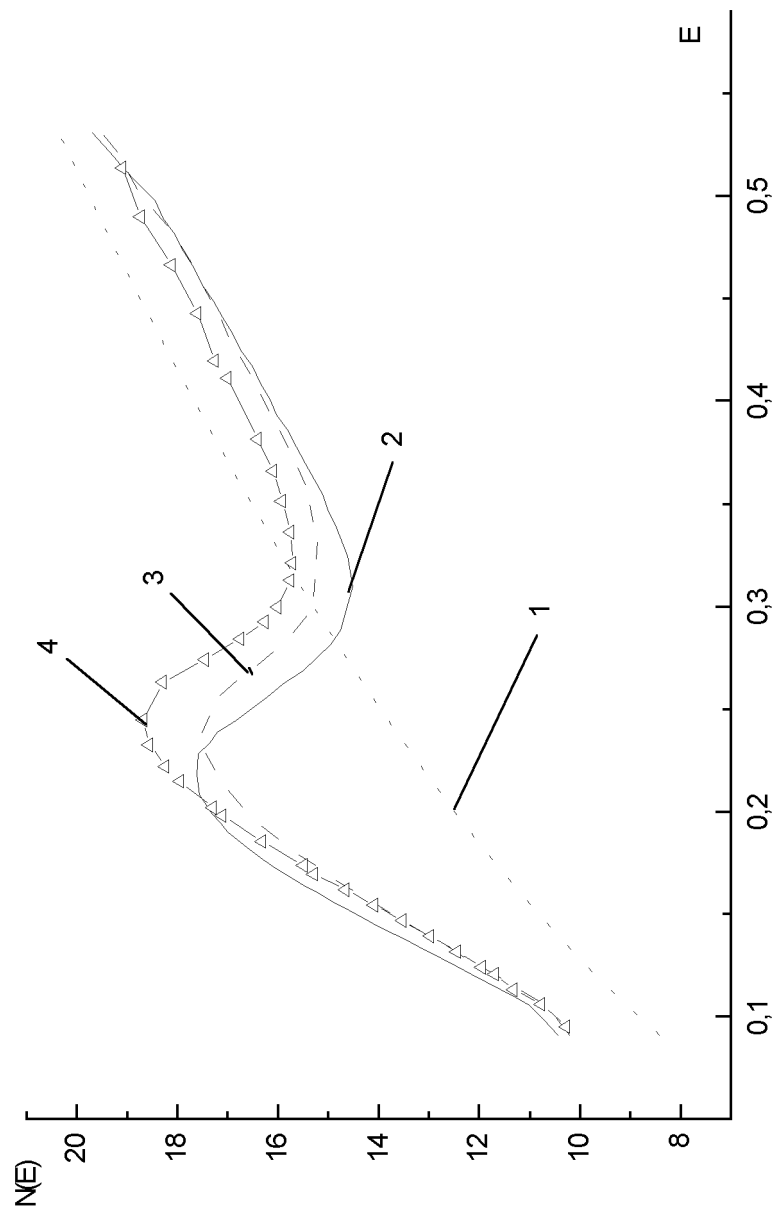


Рис. 7. Густина електронних станів для In

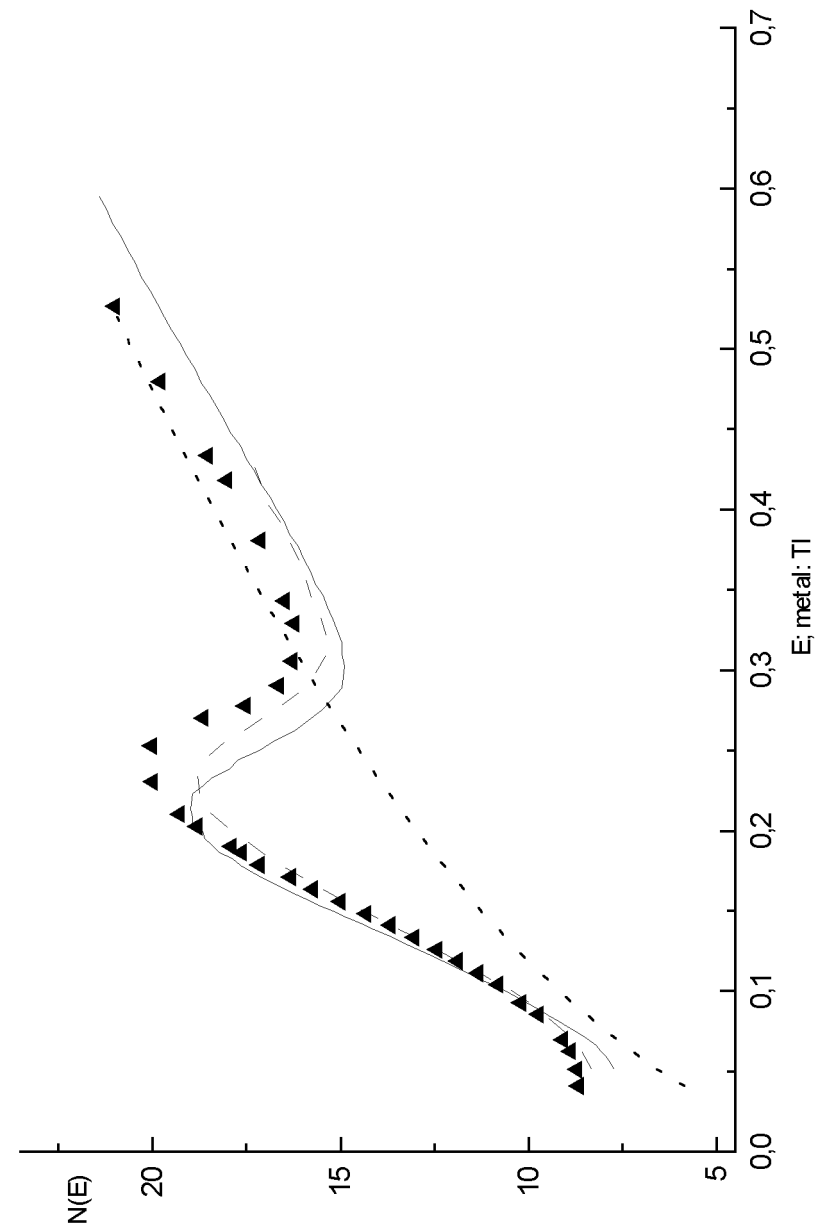


Рис. 8. Густина електронних станів для Tl

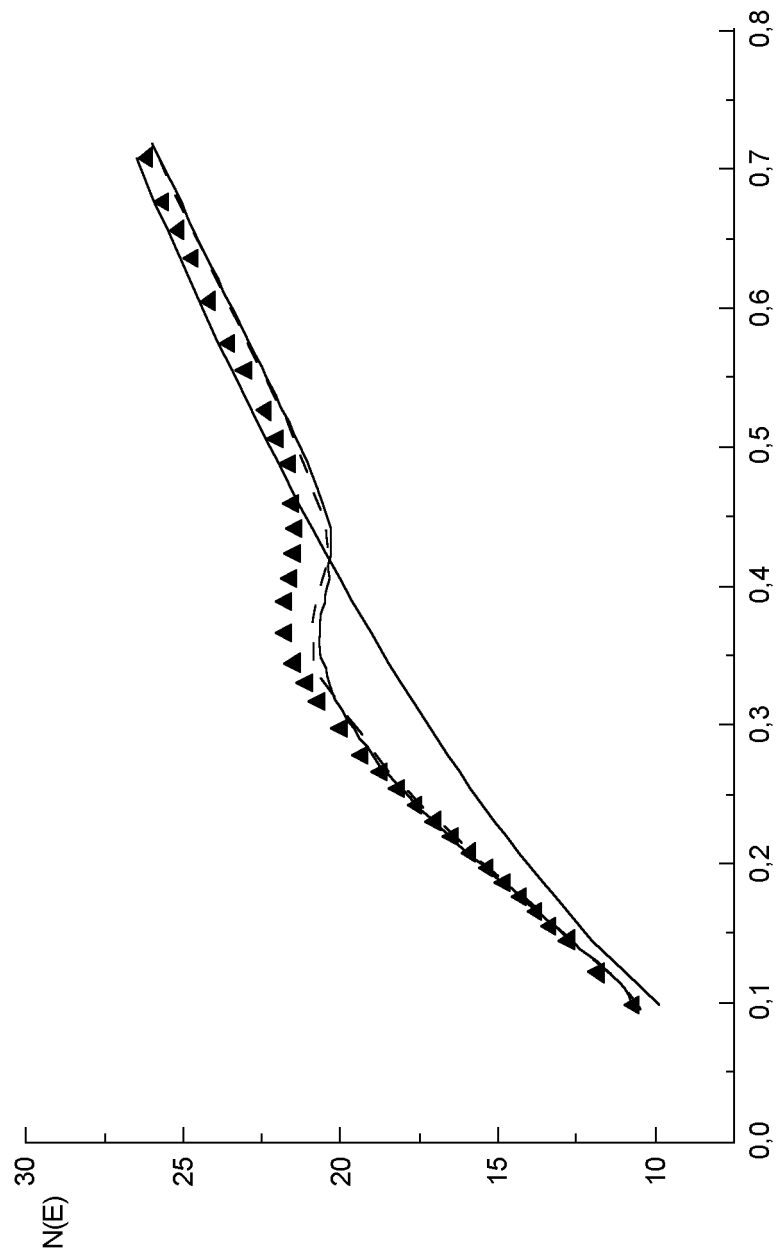


Рис. 9. Густина електронних станів для Rb

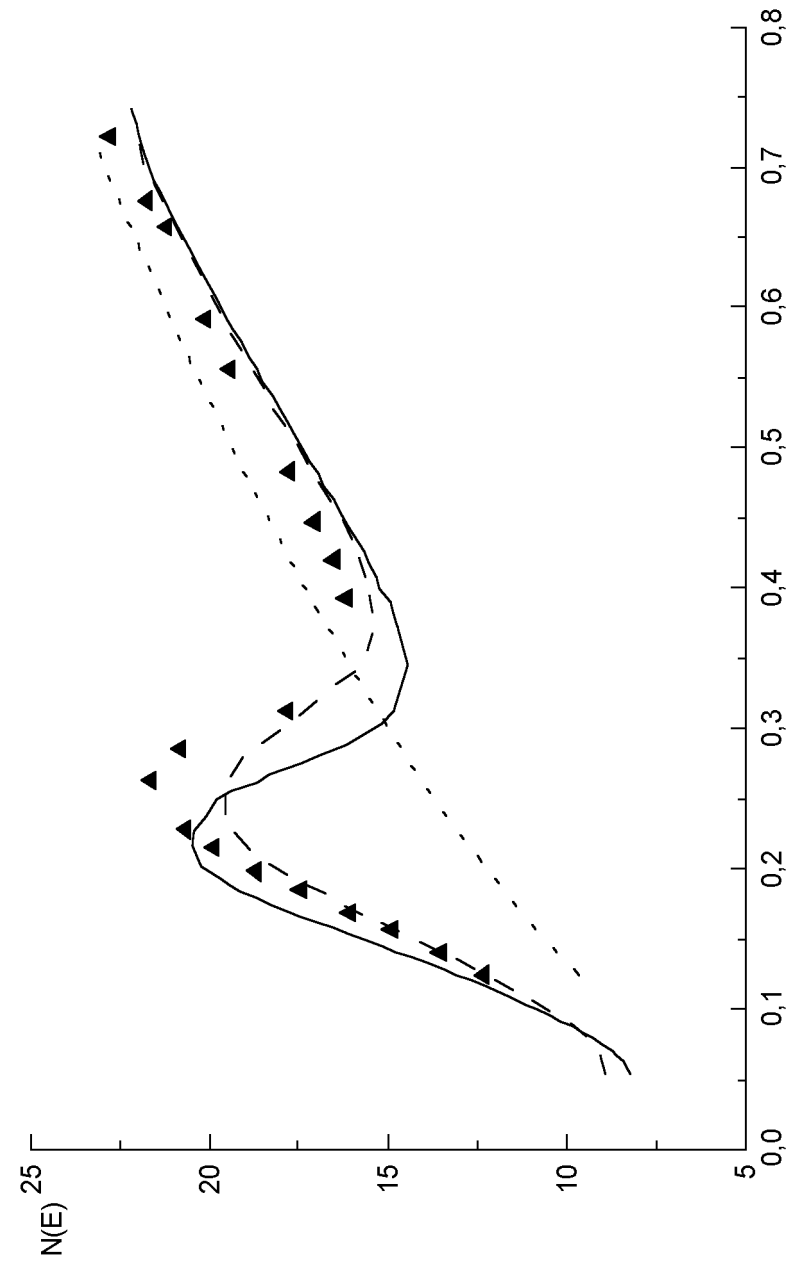


Рис. 10. Густина електронних станів для Sn



## Література

1. Дж.Займан. Модели беспорядка. - Мир, 1982.-591 с.
2. Металлические стекла. Атомная структура и динамика, электронная структура, магнитные свойства./ Под ред. Г. Бека и Г. Гюнтеродта.- М.: Мир, 1986.-454 с.
3. Ballentine L.E. Calculation of the electronic structure of liquid metals// Can. Journal of Physics. v.4, N11, p.2533-2551.
4. Chan T., Ballentine L.E. The energy distribution of states in a liquid metals// Physics and Chemistry of liquid. 1971, v.2, p.165-175.
5. С.А.Вакарчук, П.М.Якибчук, В.В.Фурман. Электронный спектр и плотность состояний неупорядоченных металлов.// В сб.: Физика многочастичных систем. Киев: Наукова думка.-1989, вып.15.-с.27-33.
6. П.М.Якібчук. Електронні стани у неупорядкованих металах./ Вісник Львів.ун-ту. Сер.фіз., вип.25."Питання теоретичної та експериментальної фізики." - Львів: Вища школа.-1992.-с.88-99.
7. С.А.Вакарчук, П.М.Якибчук. Вариационный расчет энергетического спектра и плотности состояний жидких и аморфных металлов.// УФЖ.-1984.-29,N8.-1272-1274.
8. N.V.Ashcroft, J.Zekner. Structure and resistivity of liquid metals. // Phys.Rev.-1965.-145, N1.-P.83-90.
9. Я.Й.Дутчак, П.М.Якібчук, М.І.Жовтанецький. Енергія зв'язку і рівноважні атомні радіуси неперехідних металів в методі модельного псевдопотенціалу. //УФЖ.-1976.-21, N1.-с.34-39.

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Петро Миколайович Якібчук  
Світлана Олександрівна Вакарчук

ГУСТИНА СТАНІВ НЕВПОРЯДКОВАНИХ МЕТАЛІВ

Роботу отримано 11 липня 2000 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії металів і сплавів

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені