

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/>)

Юрій Кирилович Рудацький  
Григорій Володимирович Понеділок  
Мирослава Іванівна Клапчук

ВПЛИВ СТРУКТУРНОГО БЕЗЛАДУ НА ЗАРЯДОВІ ТА МАГНІТНІ  
СТАНИ ДОМШКИ

Роботу отримано 26 жовтня 2006 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії нерівноважних процесів в рідинах і плазмі

Виготовлено при ІФКС НАН України  
© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ  
ФІЗИКИ  
КОНДЕНСОВАНИХ  
СИСТЕМ

ICMP-06-19U

Ю.К. Рудацький\*, Г.В. Понеділок\*, М.І. Клапчук\*

ВПЛИВ СТРУКТУРНОГО БЕЗЛАДУ НА ЗАРЯДОВИЙ ТА  
МАГНІТНИЙ СТАНИ ДОМШКИ

\*Інститут прикладної математики та фундаментальних наук, Національний університет "Львівська політехніка", вул. Ст. Бандери 12, 79013, Львів, Україна

ЛЬВІВ

УДК: 538.915

PACS: 71.23. -k, 71.23. An, 72.15. Rn

### Вплив структурного безладу на зарядовий та магнітний стани домішки

Ю.К. Рудаєвський, Г.В. Понеділок, М.І. Клапчук

**Анотація.** Досліджується зарядовий та магнітний стани домішки, розчиненої в аморфному металічному сплаві. Гамільтоніан системи є узагальненням моделі Андерсона, де додатково враховано процеси пружного і непружного розсіяння електронів провідності на іонах металу та на зарядженій домішці. Пропонується метод розрахунку конфігураційно засереднених одноелектронних функцій Гріна в наближення Хартрі-Фока. Отримана система самоузгоджених рівнянь для розрахунку зарядового та спин-поляризованого стану домішки. Подано якісний аналіз впливу структурної неупорядкованості металеві матриці на спостережувані величини. Показано, що структурний безлад середовища приводить до додаткового розширення та зсуву віртуального енергетичного рівня домішки, зменшуючи магнітний момент домішки.

### Structural disorder influence on charged and magnetic impurity states

Yu.K. Rudavskii, G.V. Ponedilok, M.I. Klapchuk

**Abstract.** Charged and magnetic states of impurity dissolved in amorphous metallic alloy are investigated. Hamiltonian of system is generalization of Anderson impurity model and includes additionally the process of elastic and non-elastic conductive electrons scattering on ions of metal and on charged impurity. Configurational averaged one-particle Green's functions are obtained within the Hartree-Fock approximation. The system of self-consistent equations for the calculation of the electronic spectrum, the charged and the spin-polarized impurity states are given. Qualitative analysis of the influence of the metallic host structural disorder on observed values is given. Additional shift and broadening of virtual impurity level is caused by structural disorder of impurity environment.

© Інститут фізики конденсованих систем 2006  
Institute for Condensed Matter Physics 2006

Атоми рідини, з якими взаємодіє домішка, створюють для цієї домішки складне потенціальне поле, яке носить випадковий характер. Детальний розгляд цього поля є надзвичайно складною задачею. Але наявність великого параметра  $N$  – числа взаємодіючих атомів рідини дозволяє зробити це поле випадковим, провести його усереднення і визначити поведінку сольватованої домішки від усереднених параметрів рідини. Такий статистичний підхід передбачає конфігураційне засереднення за координатами  $\{\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N\}$  іонної підсистеми сплаву:

$$\overline{(\dots)} = \int_V d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_N P(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) (\dots), \quad (1)$$

де  $P(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N)$  – багаточастинкові функції розподілу. Виконання конфігураційного засереднення і є основною трудностю теорії, оскільки експериментально відомі лише парні функції розподілу, а всі розщеплення функцій вищого порядку  $P(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N)$  через парні є суто модельними. Різні варіанти таких розщеплень розглянуті в роботах [1–5].

Більшість із запропонованих до цього моменту методів [7] знаходження усередненої функції Гріна, близькі наближенню когерентного потенціалу [9], і базуються на розщепленні функцій Гріна вищого порядку. Для аморфних систем використовується прості методи обриву ланцюжка рівнянь [10]. Зокрема метод Тяблікова [11]. Для неупорядкованих аморфних систем у рівняння для усередненої за структурою функції Гріна першого порядку входять матричні елементи ефективного нелокального псевдопотенціала, які також залежать від структури. З'являється новий ланцюг рівнянь, зумовлених структурою. Взагалі для строгого врахування взаємодій у аморфній структурі отримують подвійний ланцюжок рівнянь, зумовлений і взаємодією і структурою. У роботі [10] проведено огляд і класифікацію опублікованих робіт за способом структурного засереднення функцій Гріна.

Зокрема Канейоші [5] провів систематичне дослідження ланцюжка рівнянь, зумовлених структурою, ввівши структурний фактор і виразивши функції розподілу через експериментально вимірюваний структурний фактор. У раніших роботах, серед яких можна назвати роботи Едвардса [1] і Фарізо Займана [12], використано метод функцій Гріна. У роботі [14] усереднення функцій Гріна проводиться з допомогою засереднення за кумулянтами.

Інтенсивне вивчення структурно неупорядкованих систем проводилось у 70-их роках, було розвинуто ряд наближених методів для

врахування ближнього порядку [2, 4, 13]. Навіть у рамках одноелектронного наближення, обчислення енергетичного спектру неупорядкованої системи є важкою задачею. Одним з найуспішніших методів “середнього поля” є метод когерентного потенціалу, який був вперше застосований до сплавів заміщення. У роботі [4] цей метод поширено для вивчення впливу ближнього порядку в рідких металах. Проводиться порівняння з альтернативними методами, запропонованими для рідких металів, які описують електронні властивості рідин з трьох вихідних положень: розсіюючого потенціала індивідуальних іонів, їх середньої густини, та радіальної (двочастинкової) функції розподілу. В цьому сенсі ці методи подібні до квазікристалічного наближення Лакса і Займана.

Вплив структурного безладу середовища на густину станів та інші фізичні характеристики рідких металів, аморфних тіл, легованих напівпровідників в модифікованій апроксимації сильного зв'язку, оцінка поведінки мікроскопічного атомного розподілу з спостережуваних даних макроскопічних властивостей структурно неупорядкованих систем проводиться в [3]. При цьому структурні кореляційні функції виражаються через радіальну функцію розподілу  $g(R_{nm})$ .

Порівняння методів ЛКАО, когерентного потенціалу, квазікристалічного наближення та самоузгодженого наближення Шварца і Еренрейха при вивченні електронної структури неупорядкованих систем проведено в [2]. Співставлення ефективності методів когерентного потенціалу (CPA) і апроксимації Бете-Паєрлса (BPA) для бінарного сплаву заміщення обговорюється в роботі [13].

Ще один напрям робіт ґрунтується на розвиненні теорії збурень за флуктуаціями атомної густини  $\rho_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{1 \leq j \leq N} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}$ ,  $\mathbf{k} \neq 0$ .

Цей метод, який давно і досить успішно використовується у теорії рідкого стану [8, 15, 16], також дозволяє звести багаточасткові кореляції до двохчастинкових, однак наближення, що робляться при цьому, цілком контрольовані. Діаграмна техніка, яка виникає при цьому приводить до стандартних фейнманівських рядів, що допускають самоузгоджений розв'язок. У зв'язку з цим, даний метод здатний забезпечувати достатню точність результатів.

Шляхом експериментальних досліджень встановлено, що неупорядковане оточення атома впливає на його мікростани, наприклад, середній магнітний момент домішки в аморфному середовищі менший, ніж в кристалі (для деяких феромагнітних кристалічних та аморфних сплавів результати експериментальних робіт приведено в монографії Хандриха К., Кобе С. [10] та пізніших публікаціях). Метою цієї роботи є дослідження впливу структурного безладу

аморфного середовища на зарядовий та магнітний стани домішки.

У розділі 1 обговорюється мікроскопічна модель, яка описує стан домішки в розплаві лужного металу. Гамільтоніан задачі базується на головних засадах моделі Андерсона [21], додатково включено внутрішнє локальне поле, яке діє на електрон із сторони іонів металу і домішкового атома. Якісна і кількісна оцінка модельних параметрів гамільтоніана, дослідження меж застосовності запропонованої моделі до опису конкретних систем детально обговорюється в роботі [17]. Виникнення зарядового і спін-поляризованого станів домішки трактується як процес гібридизації вільних і локалізованих електронних станів під дією поляризаційного потенціалу домішки [18].

У розділі 2-3 розраховуються одноелектронні функції Гріна [22] із застосуванням до вищих функцій Гріна наближення середнього поля для замикання ланцюжка рівнянь. Введено фур'є-компоненти флуктуацій атомної густини у силовому полі, створеному домішковим атомом. Конфігураційне засереднення функцій Гріна проводиться за багаточастковими структурними атомними функціями розподілу термодинамічно рівноважної рідкометалевої матриці. Отримано систему трансцендентних рівнянь самоузгодження, з яких розраховується ефективний заряд та магнітний момент ізольованої домішки. Проаналізовано вплив локального оточення домішки на її зарядовий та магнітний стани. Показано зменшення магнітного моменту домішки, зумовлене структурними флуктуаціями.

## 1. Модель системи “аморфний металічний сплав + магнітна домішка”

Розглянемо окремий домішковий атом перехідного елемента в аморфному простому металі. Опис структурно неупорядкованого металу будемо здійснювати в рамках електрон-іонної моделі, яка для лужних металів дає задовільні результати розрахунків електронних, структурних та термодинамічних властивостей.

Нехай  $\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N$  – координати атомів аморфного металу, які приймають довільні випадкові значення в об'ємі  $V$ . Домішковий атом має координату  $\mathbf{R}_0$ . Повний гамільтоніан моделі в координатному зображенні виберемо таким:

$$\hat{H} = H_{cl} + \hat{H}_{el-i} + \hat{H}_{el-el}. \quad (2)$$

Оператор енергії електрон-іонної взаємодії записується в такій формі

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{el-i}} = & -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{1 \leq i \leq N} \Delta_i + \sum_{1 \leq i \leq N} \sum_{1 \leq j \leq N} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|) + \\ & + \sum_{1 \leq i \leq N} V_0(|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_0|). \end{aligned} \quad (3)$$

Тут  $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$  – координати електронів металевої підсистеми, кількість яких через одновалентність лужних елементів співпадає з числом атомів металу. Припускається, що електрони валентної оболонки домішки залишаються локалізованими на домішці і не гібридизуються із станами електронів провідності. Псевдопотенціали  $V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|)$  та  $V_0(|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_0|)$  описують розсіяння електронів на іонах металу та домішці відповідно.

Останній доданок в гамільтоніані (2) – енергія попарної міжелектронної взаємодії

$$\hat{H}_{\text{el-el}} = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \neq j \leq N} \Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \neq j \leq N} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (4)$$

Неоператорна частина  $H_{\text{cl}}$  описує енергію класичної міжіонної взаємодії, роль якої в нашій моделі зводиться до формування структури рідкометалевої системи з домішкою, яка задається модельними багаточастинковими функціями розподілу.

Як базис для розкладу польових електронних операторів під час переходу до зображення вторинного квантування використовуються плоскі хвилі  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = V^{-1/2} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$  та локалізована на домішці  $s$ -орбіталь

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{\pi r_p^3}} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_0|}{r_p}\right). \quad (5)$$

Тут  $r_p$  – параметр, що певним чином може бути виражений через ефективний розмір електронегативного іона. Хвильовий вектор  $\mathbf{k}$  набуває значень з квазінеперервного простору імпульсного  $\Lambda$ , породженого періодичними граничними умовами на протилежних гранях куба об'єму  $V = l^3$ .

У зображенні вторинного квантування оператор (2) з врахуванням лише певного класу кулонівських міжелектронних взаємодій записується у вигляді

$$\hat{H} = H_{\text{cl}} + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=\pm 1} E_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\sigma=\pm 1} E_0 d_{0\sigma}^+ d_{0\sigma}$$

$$\begin{aligned} & + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{\sigma=\pm 1} \left( V_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma} + V_{\mathbf{q}}^{(0)} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma} \right) + \sum_{\sigma=\pm 1} U_0 \hat{n}_{0\sigma} \hat{n}_{0,-\sigma} \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=\pm 1} \left( W_{\mathbf{k},0} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ d_{0\sigma} + W_{\mathbf{k},0}^* d_{0\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma} \right) + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{\sigma, \sigma'=\pm 1} P_{\mathbf{q},0} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma} \hat{n}_{0\sigma'} \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma \neq \sigma'} \left( U_{\mathbf{k},0} \hat{n}_{\sigma'} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ d_{0\sigma} + U_{\mathbf{k},0}^* d_{0\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma} \hat{n}_{0\sigma'} \right). \end{aligned} \quad (6)$$

Тут  $a_{\mathbf{k}\sigma}$  ( $a_{\mathbf{k}\sigma}^+$ ) та  $d_{0\sigma}$  ( $d_{0\sigma}^+$ ) – ферміївські оператори знищення (народження) електронів у станах  $\{\mathbf{k}, \sigma\}$  і  $\{\psi_0, \sigma\}$ , де  $\sigma = \pm 1$  – квантове спінове число, яке приймає два значення, що відповідають двом можливим орієнтаціям електронного спіна відносно осі квантування. Величина  $E_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$  – спектр енергії електронів в станах  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , а  $E_0$  – енергія локалізованого електронного стану  $\psi_0(\mathbf{r})$ . Величина  $\hat{n}_{0\sigma} = d_{0\sigma}^+ d_{0\sigma}$  – оператор числа електронів з проекцією спіна  $\sigma$ , які локалізовані на домішковому атомі.

Матричні елементи  $V_{\mathbf{q}}$  та  $V_{\mathbf{q}}^{(0)}$  характеризують процеси пружнього розсіяння електронів на іонах металу і домішці:

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{1}{N} \sum_{1 \leq j \leq N} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} v(q), \quad V_{\mathbf{q}}^{(0)} = e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_0} v_0(q). \quad (7)$$

Процеси непружнього розсіяння електронів, зумовлені їх переходом з локалізованого на домішці стану в делокалізований стан  $\mathbf{k}$  і навпаки, характеризуються матричним елементом

$$W_{\mathbf{k},0} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_V e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left( -\frac{\hbar^2 \Delta_{\mathbf{r}}}{2m} + V_{\text{LF}}(\mathbf{r}) \right) \psi_0(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (8)$$

Тут

$$V_{\text{LF}}(\mathbf{r}) = \sum_{1 \leq j \leq N} V(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_j|) + V_0(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_0|) \quad (9)$$

– потенціал внутрішнього локального поля, яке діє на електрон, що знаходиться в точці  $\mathbf{r} \in V$  з сторони іонів металу і домішкового атома.

Доданок  $\sum_{\sigma=\pm 1} U_0 \hat{n}_{0\sigma} \hat{n}_{0,-\sigma}$  в гамільтоніані (6) походить від оператора кулонівської взаємодії електронів і описує хаббардівське відштовхування електронів інтенсивності  $U_0$ , що локалізовані на домішковому атомі.

Інші доданки в гамільтоніані (6) описують процеси пружнього і непружнього розсіяння електронів на зарядженій домішці. Матричні

елементи, що характеризують інтенсивність процесів останніх двох типів мають вигляд

$$U_{\mathbf{k},0} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_V e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \tilde{\Phi}(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (10)$$

$$P_{\mathbf{k},0} = \frac{1}{V} \int_V e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \tilde{\Phi}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (11)$$

Величина

$$\tilde{\Phi}(\mathbf{r}) = \int_V \Phi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) |\psi_0(\mathbf{r}')|^2 d\mathbf{r}',$$

яка входить у формули (10)-(11), має зміст потенціальної енергії електрона в полі, яке створюється локалізованим на орбіталі  $\psi_0(\mathbf{r})$  електроном.

Матричні елементи  $W_{\mathbf{k},0}$ ,  $U_{\mathbf{k},0}$  та  $P_{\mathbf{k},0}$  оператора Гамільтона (6) зручно записати в іншому вигляді, виділивши явно структурні множники:

$$U_{\mathbf{k},0} = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_0} u_k, \quad P_{\mathbf{k},0} = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_0} p_k, \\ W_{\mathbf{k},0} = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_0} w_k.$$

Функції модуля хвильового вектора

$$u_k = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_V e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \tilde{\Phi}(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \\ p_k = \frac{1}{V} \int_V e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \tilde{\Phi}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \\ w_k = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_V e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left( -\frac{\hbar^2 \Delta_{\mathbf{r}}}{2m} + V_{\text{LF}}(\mathbf{r}) \right) \psi_0(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

вже не залежать від вузлового індекса і розраховуються в системі координат, зв'язаній з домішковим атомом. Їх аналітичний вигляд знайдено в [20].

## 2. Одноелектронні функції Гріна. Наближення середнього поля

Розглянемо квадратну матрицю, елементами якої є одноелектронні функції Гріна

$$\mathbf{G}(\omega) = \begin{pmatrix} G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\sigma}(\omega) & M_{\mathbf{k},0}^{\sigma}(\omega) \\ M_{0,\mathbf{k}'}^{\sigma}(\omega) & L_{0,0}^{\sigma}(\omega) \end{pmatrix} \equiv \\ \equiv \begin{pmatrix} \langle\langle a_{\mathbf{k}\sigma} | a_{\mathbf{k}'\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle_{\omega} & \langle\langle a_{\mathbf{k}\sigma} | d_{0\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle_{\omega} \\ \langle\langle d_{0\sigma} | a_{\mathbf{k}'\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle_{\omega} & \langle\langle d_{0\sigma} | d_{0\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle_{\omega} \end{pmatrix}. \quad (12)$$

У попередніх роботах [17–20] отримано рівняння руху для кожної компоненти матричної функції Гріна (12).

Для замикання ланцюжка рівнянь проведено розщеплення вищих функцій Гріна, що відповідають наближенню середнього поля і будуть коректними, якщо ефекти гібридизації локалізованих та делокалізованих станів у певному сенсі є малими. Фізичний зміст і межі застосовності таких наближень до моделей Хаббарда та Андерсона детально обговорювались в роботах [23, 27].

Отримано замкнену систему алгебраїчних рівнянь

$$(\omega - E_k) G_{\mathbf{k},\mathbf{q}}^{\sigma}(\omega) = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{p}} \Lambda_{\mathbf{k}-\mathbf{p}} G_{\mathbf{p},\mathbf{q}}^{\sigma}(\omega) + \Omega_k^{\sigma} M_{0,\mathbf{q}}^{\sigma}(\omega), \quad (13)$$

$$(\omega - E_{0,\sigma}) M_{0,\mathbf{q}}^{\sigma}(\omega) = \sum_{\mathbf{p}} \Omega_p^{*\sigma} G_{\mathbf{p},\mathbf{q}}^{\sigma}(\omega), \quad (14)$$

$$(\omega - E_k) M_{\mathbf{k},0}^{\sigma}(\omega) = \sum_{\mathbf{q}} \Lambda_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} M_{\mathbf{q},0}^{\sigma}(\omega) + \Omega_k^{\sigma} L_{0,0}^{\sigma}(\omega), \quad (15)$$

$$(\omega - E_{0,\sigma}) L_{0,0}^{\sigma}(\omega) = 1 + \sum_{\mathbf{k}} \Omega_k^{*\sigma} M_{\mathbf{k},0}^{\sigma}(\omega). \quad (16)$$

У рівняннях (13)-(16) запроваджені такі позначення

$$\Lambda_{\mathbf{q}} = \sum_{\alpha=1}^2 V_{\mathbf{q}}^{(\alpha)} = \\ = \frac{1}{N} \sum_{1 \leq j \leq N} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} v(|\mathbf{q}|) + \tilde{v}_0(|\mathbf{q}|). \quad (17)$$

Фур'є-компоненти ефективного псевдопотенціалу домішки

$$\tilde{v}_0(q) = v_0(q) + p_q \langle \hat{n}_0 \rangle =$$

$$= \frac{1}{V} \int_V e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \left[ V_0(r) + \langle \hat{n}_0 \rangle \int_V d\mathbf{r}' |\psi_0(\mathbf{r}')|^2 \Phi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \right] d\mathbf{r}$$

включають хартрі-фоківський потенціал, що створюється зарядом  $\langle \hat{n}_0 \rangle = \sum_{\sigma} \langle \hat{n}_{0\sigma} \rangle$  домішки.

Аналогічно матричні елементи  $\Omega_q^\sigma$  можна зобразити у вигляді  $\Omega_q^\sigma = [u_q \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle + w_q]$ , або

$$\Omega_q^\sigma = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_V e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \left[ -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + \tilde{V}_{\text{CF}}^\sigma(\mathbf{r}) \right] \psi_0(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (18)$$

де тепер ефективний потенціал внутрішнього локального поля

$$\tilde{V}_{\text{LF}}^\sigma(\mathbf{r}) = V_{\text{LF}}(\mathbf{r}) + \langle \hat{n}_{0,-\sigma} \rangle \int_V d\mathbf{r}' |\psi_0(\mathbf{r}')|^2 \Phi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|).$$

Останній доданок в цій формулі має зміст хартрі-фоківського потенціала, який створюється локалізованим на домішці  $\mathbf{R}_0 \equiv 0$  електроном, що має проекцію спіна протилежну значенню спіна електрона, який здійснює переходи “локалізований стан - зона провідності”.

З системи рівнянь (15,16) вираз для локаторної функції Гріна

$$L_{0,0}^\sigma(\omega) = \frac{1}{\omega - E_{0,\sigma} - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \Omega_{\mathbf{k}}^\sigma \Lambda_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}(\omega) \Omega_{\mathbf{q}}^{*\sigma}}, \quad (19)$$

де введено нескінченний ряд за недіагональними матрицями  $\Lambda_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$

$$\Lambda_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}(\omega) = \frac{\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}}{\omega - E_{\mathbf{k}} - \Lambda_0} + \frac{\Lambda_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}{(\omega - E_{\mathbf{k}} - \Lambda_0)(\omega - E_{\mathbf{q}} - \Lambda_0)} + \sum_{\mathbf{p}} \frac{\Lambda_{\mathbf{k}-\mathbf{p}} \Lambda_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}}{(\omega - E_{\mathbf{k}} - \Lambda_0)(\omega - E_{\mathbf{p}} - \Lambda_0)(\omega - E_{\mathbf{q}} - \Lambda_0)} + \dots \quad (20)$$

Постійна величина  $\Lambda_0 = v(0) + v_0(0) - 2\pi \langle \hat{n}_0 \rangle e^2 r_p^2 / V$ . Питання збіжності подібних рядів обговорювалося в роботі [28].

Недіагональні функції Гріна  $M_{0,\mathbf{k}}^\sigma(\omega)$ ,  $M_{\mathbf{k},0}^\sigma(\omega)$  та пропагаторна функція Гріна  $G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^\sigma(\omega)$  представляється замкнутим виразом через локаторну функцію  $L_{0,0}^\sigma(\omega)$ :

$$M_{0,\mathbf{k}}^\sigma(\omega) = \sum_{\mathbf{q}} L_{0,0}^\sigma(\omega) \Omega_{\mathbf{q}}^{*\sigma} \Lambda_{\mathbf{q},\mathbf{k}}(\omega), \quad M_{\mathbf{k},0}^\sigma(\omega) = (M_{0,\mathbf{k}}^\sigma(\omega))^*, \quad (21)$$

$$G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^\sigma(\omega) = \Lambda_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\omega) + \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{p}} \Lambda_{\mathbf{k},\mathbf{q}}(\omega) \Omega_{\mathbf{q}}^\sigma L_{0,0}^\sigma(\omega) \Omega_{\mathbf{p}}^{*\sigma} \Lambda_{\mathbf{p},\mathbf{k}'}(\omega). \quad (22)$$

Перенормовані значення енергії зв'язаного стану на домішковому атомі

$$E_{0,\sigma} = E_0 + U_0 \langle \hat{n}_{0,-\sigma} \rangle + \sum_{\mathbf{k}} \left[ U_{\mathbf{k},0} \langle a_{\mathbf{k},-\sigma}^+ d_{0,-\sigma} \rangle + U_{\mathbf{k},0}^* \langle d_{0,-\sigma}^+ a_{\mathbf{k},-\sigma} \rangle \right] + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{\sigma'} P_{\mathbf{q},0} \langle a_{\mathbf{k},\sigma'}^+ a_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma'} \rangle. \quad (23)$$

Основна задача наступного розділу – знаходження одноелектронних функцій Гріна, засереднених за рівноважним розподілом іонної підсистеми металічного розплаву.

### 3. Конфігураційно засереднені функції Гріна

Розрахунок конфігураційно засередненої локаторної функції Гріна  $L_{0,0}^\sigma(\omega)$  проведемо за такою схемою. Почнемо з рівняння (19). Тут масовий оператор описує кореляцію квазічастинок, яка виникає, як ефективна взаємодія через неупорядкований фон. Вибираючи конкретне наближення для (20) можна знайти кореляційні поправки. З цього нескінченного ряду збережемо лише перший доданок  $\Lambda_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ , знехтувавши кореляцією вищого порядку. В термінах загальноприйнятих позначень

$$\rho_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{1 \leq j \leq N} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}, \quad \mathbf{k} \neq 0$$

для фур'є-компонент флуктуацій атомної густини, матричні елементи

$$\Lambda_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} = \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} v(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|) + \tilde{v}_0(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|).$$

Вклад флуктуацій густини у фізичні властивості буде визначатися першим доданком.

Отримано наступний вираз для конфігураційно засередненої локаторної функції Гріна:

$$\overline{L_{0,0}^\sigma(E)} = \frac{1}{E - E_\sigma - \Sigma_0(k)} \times$$

$$\times \left[ 1 + \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{q} \\ (\mathbf{k} \neq \mathbf{q})}} \frac{\Omega_k^\sigma (\Omega_q^\sigma)^* \overline{\Lambda_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}}{(E-E_k-\Lambda_0)(E-E_q-\Lambda_0)(E-E_\sigma-\Sigma_0(k))} + \dots \right] \quad (24)$$

де  $\Sigma_0(k) = \sum_{\mathbf{k}} |\Omega_k^\sigma|^2 / (E-E_k-\Lambda_0)$  – власноенергетична частина, полюс функції у наближенні ефективного середовища.

Введемо  $\overline{\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}} = n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ , де  $n(\mathbf{r}) = 1/V \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ . Враховуючи лише бінарну функцію розподілу домішка-розчинник  $n(r)$ , яку можна взяти з експерименту або вибрати в модельному вигляді, та знехтувавши кореляційними функціями вищих порядків, отримуємо остаточно вираз для усередненої локаторної функції Гріна:

$$\overline{L_{0,0}^\sigma(\omega)} = \left[ \omega - E_\sigma - \Sigma_0(k) - \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{q} \\ (\mathbf{k} \neq \mathbf{q})}} \frac{\Omega_k^\sigma \Omega_q^\sigma [n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} v(|\mathbf{k}-\mathbf{q}|) + \tilde{v}_0(|\mathbf{k}-\mathbf{q}|)]}{(E-E_k-\Lambda_0)(E-E_q-\Lambda_0)} \right]^{-1} \quad (25)$$

Для густини станів  $\rho_0^\sigma(E)$  локалізованих на домішці електронів із спіном  $\sigma$ , необхідно обчислити суму за хвильовими векторами в знаменнику функції (25). Для цього використовується співвідношення

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\Omega_k|^2}{E-E_k-\Lambda_0+i\varepsilon} = \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\Omega_k|^2}{E-E_k-\Lambda_0} - i\pi \sum_{\mathbf{k}} |\Omega_k|^2 \delta(E-E_k-\Lambda_0), \quad (26)$$

де символ  $\mathcal{P}$  означає інтеграл в сенсі головного значення. Введемо такі позначення:

$$\Delta^\sigma(E) = \pi \sum_{\mathbf{k}} |\Omega_k|^2 \delta(E-E_k-\Lambda_0); \quad (27)$$

$$\Lambda^\sigma(E) = \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}} |\Omega_k|^2 / (E-E_k-\Lambda_0) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int dE' \Delta(E') / (E-E'). \quad (28)$$

Величина  $\Lambda(E)$  зумовлює ефективне зміщення енергії локалізованого стану домішки,  $\Delta(E)$  – розмиття локалізованого рівня за рахунок процесів гібридизації та кулонівської взаємодії.

Для спрощення викладок припустимо, що матричні елементи  $(\Omega^\sigma)^2$  розсіяння електронів провідності є сталими поза зоною [24], вирази для  $\Delta^\sigma(E)$ ,  $\Lambda^\sigma(E)$  матимуть наступний вигляд:

$$\Delta^\sigma(E) = \pi (\Omega^\sigma)^2 \rho_0(E). \quad (29)$$

$$\Lambda^\sigma(E) = (\Omega^\sigma)^2 \rho_0(E) g(E), \quad (30)$$

Тут

$$\rho_0(E) = \frac{m^{3/2}}{2\sqrt{2}\hbar^3\pi^2} \sqrt{E}$$

– густина станів вільного електронного газу, а

$$g(E) = \ln \left| \frac{\sqrt{E_F/E} + 1}{\sqrt{E_F/E} - 1} \right| - 2\sqrt{E_F/E}. \quad (31)$$

У подвійній сумі за хвильовими векторами  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{q}$  додамо і віднімемо доданок  $\mathbf{k} = \mathbf{q}$ . Використаємо також наступне співвідношення:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\Omega_k^\sigma|^2}{(E-E_k-\Lambda_0+i\varepsilon)^2} = -\frac{d\Lambda^\sigma(E)}{dE} + i\frac{d\Delta^\sigma(E)}{dE}. \quad (32)$$

Аналогічно за теорією лишків отримуємо в подвійній сумі

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \frac{\Omega_k^\sigma \Omega_q^{*\sigma} [n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} v(|\mathbf{k}-\mathbf{q}|) + \tilde{v}_0(|\mathbf{k}-\mathbf{q}|)]}{(E-E_k-\Lambda_0)(E-E_q-\Lambda_0)} = \\ & = \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\Omega_k^\sigma|^2 \Lambda^\sigma(k, E)}{E-E_k-\Lambda_0} - i\pi \sum_{\mathbf{k}} |\Omega_k^\sigma|^2 \Lambda^\sigma(k, E) \delta(E-E_k-\Lambda_0) - \\ & - i\mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\Omega_k^\sigma|^2 \Delta^\sigma(k, E)}{E-E_k-\Lambda_0} - \pi \sum_{\mathbf{k}} |\Omega_k^\sigma|^2 \Delta^\sigma(k, E) \delta(E-E_k-\Lambda_0), \quad (33) \end{aligned}$$

де позначено

$$\Lambda^\sigma(k, E) = \mathcal{P} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Omega_q^{*\sigma}}{E-E_q-\Lambda_0} f(|\mathbf{k}-\mathbf{q}|), \quad (34)$$

$$\Delta^\sigma(k, E) = \pi \sum_{\mathbf{q}} \Omega_q^{*\sigma} f(|\mathbf{k}-\mathbf{q}|) \delta(E-E_q-\Lambda_0), \quad (35)$$

$$f(|\mathbf{k}-\mathbf{q}|) = [n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} v(|\mathbf{k}-\mathbf{q}|) + \tilde{v}_0(|\mathbf{k}-\mathbf{q}|)].$$

Остаточно, усереднена за конфігураціями функція Гріна локалізованих на домішці електронів

$$\overline{L_{0,0}^\sigma} = \frac{1}{E - E_{0,\sigma} - \tilde{\Lambda}^\sigma(E) + i\tilde{\Delta}^\sigma(E)}, \quad (36)$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{\Lambda}^\sigma(E) &= \Lambda^\sigma(E) + \frac{d\Lambda^\sigma(E)}{dE}f(0) + \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\Omega_{\mathbf{k}}^\sigma|^2 \Lambda^\sigma(k, E)}{E - E_{\mathbf{k}} - \Lambda_0} \\ &\quad - \pi \sum_{\mathbf{k}} |\Omega_{\mathbf{k}}^\sigma|^2 \Delta^\sigma(k, E) \delta(E - E_{\mathbf{k}} - \Lambda_0); \end{aligned} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}^\sigma(E) &= \Delta^\sigma(E) + \frac{d\Delta^\sigma(E)}{dE}f(0) + \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\Omega_{\mathbf{k}}^\sigma|^2 \Delta^\sigma(k, E)}{E - E_{\mathbf{k}} - \Lambda_0} \\ &\quad + \pi \sum_{\mathbf{k}} |\Omega_{\mathbf{k}}^\sigma|^2 \Lambda^\sigma(k, E) \delta(E - E_{\mathbf{k}} - \Lambda_0) \end{aligned} \quad (38)$$

– зміщення і ширина локалізованого рівня тепер містять крім вкладів від взаємодії також вклад від структурної неупорядкованості металевої матриці.

Для абсолютного нуля температури число локалізованих на домішці електронів

$$\langle n_{0\sigma} \rangle = \langle d_{0\sigma}^+ d_{0\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{E_F} \overline{\rho_0^\sigma(E)} dE, \quad (39)$$

де

$$\overline{\rho_0^\sigma(E)} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \overline{L_{0,0}^\sigma(E + i\varepsilon)}, \quad \varepsilon \rightarrow 0 \quad (40)$$

– густина електронних локалізованих станів з величиною спіна  $\sigma$ .

$$\overline{\rho_0^\sigma(E)} = \frac{1}{\pi} \frac{\tilde{\Delta}^\sigma(E)}{(E - E_{0,\sigma} - \tilde{\Lambda}^\sigma(E))^2 + (\tilde{\Delta}^\sigma(E))^2}. \quad (41)$$

Після нескладних перетворень можна представити (37)-(38):

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}^\sigma(E) &= \pi[(\Omega^\sigma)^2 + 2\tilde{F}\rho_0(E)g(E)]\rho_0(E) + \pi(\Omega^\sigma)^2 f(0) \frac{d\rho_0(E)}{dE}; \\ \tilde{\Lambda}^\sigma(E) &= (\Omega^\sigma)^2 g(E)\rho_0(E) + (\Omega^\sigma)^2 f(0) \frac{dg(E)\rho_0(E)}{dE} \\ &\quad + \tilde{F}\rho_0(E)g(E)^2 - \pi^2 \tilde{F}\rho_0(E)^2. \end{aligned}$$

Тут позначено

$$\langle F \rangle = \frac{\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \Omega_{\mathbf{k}}^\sigma \Omega_{\mathbf{q}}^\sigma f(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|) \delta(E - E_{\mathbf{q}} - \Lambda_0) \delta(E - E_{\mathbf{k}} - \Lambda_0)}{1/V^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \delta(E - E_{\mathbf{q}} - \Lambda_0) \delta(E - E_{\mathbf{k}} - \Lambda_0)}$$

– середнє значення матричних елементів  $\Omega_{\mathbf{k}}^\sigma \Omega_{\mathbf{q}}^\sigma f(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|)$  на рівні Фермі.

#### 4. Обговорення результатів

У статті [19] обговорюється вибір псевдопотенціала Ашкрофта з екрануючою функцією Хартрі для опису рідкого металу:

$$v(r) = \begin{cases} 0 & r \leq r_c, \\ -Ze^2/r & r > r_c, \end{cases} \quad (42)$$

тут  $r_c$  - ефективний радіус іона натрію,  $Z$ - заряд іона. Фур'є-зображення:

$$v(q) = -\frac{4\pi Ze^2}{\Omega q^2} \cos(qr_c). \quad (43)$$

Параметри потенціала для рідкого натрію  $r_c^{Na} = 1.66$  а.о.=0.0878 нм. Екрануюча функція електронів провідності [26]:

$$\varepsilon(q) = 1 + \frac{4\pi Z}{\Omega q^2} \left(\frac{2}{3} E_F\right)^{-1} \lambda\left(\frac{q}{2k_F}\right) [1 - f(q)],$$

$$\lambda(y) = \frac{1}{2} + \frac{1 - y^2}{4y} \ln \left| \frac{1 + y}{1 - y} \right|,$$

$$f(q) = \frac{1/2q^2}{q^2 + 2k_F/(1 + 0.01574(\Omega/Z)^{1/3})}, \quad (44)$$

де  $k_F = (3\pi^2 Z/\Omega)^{1/3} = 0.4786$  а.о.<sup>-1</sup>. Атомний об'єм рідкого натрію  $\Omega = 270$  а. о.

Модельний псевдопотенціал взаємодії електронів з зарядженою домішкою [19]:

$$\tilde{v}_0(q) = \frac{8\pi A}{q} \arctg(qr_p) - \frac{4\alpha\pi^2}{r_p} e^{-qr_p} +$$

$$\langle \tilde{n} \rangle \frac{8\pi}{q^2} \left[ 1 - \frac{q^2 r_p^2}{(4 + q^2 r_p^2)} \left( 1 + \frac{4}{4 + q^2 r_p^2} \right) \right].$$



$$n_q = 1 + 3\eta/(qr_c)^3(qr^* \cos(qr^*) - \sin(qr^*)),$$

де  $r^* = r_c + r_p$ .

Маючи явні вирази для змодельованих потенціалів та кореляційної функції домішка-метал, можна оцінити введені в попередньому параграфі середні значення  $\Omega^\sigma$ ,  $\langle F \rangle$ . Усереднені значення  $w, u$  приведено в попередній роботі [20]. Тут при розрахунках оцінимо ці значення на рівні енергії Фермі.  $(w)^2 \approx E^2/(E\gamma + 1)^4$ , де  $\gamma = 2mr_p^2/\hbar^2$ , а  $z = u/w$  – параметр, що характеризує відношення потенціалів.

Щоб обчислити подвійну суму за хвильовими векторами у виразі  $\langle F \rangle$ , уведемо функцію  $K(k, q)$ , яка містить інтегрування за кутами у сферичній системі координат:

$$K(k, q) = 2 \int_0^\pi \sin \theta f(\sqrt{k^2 + q^2 - 2kq \cos \theta}) d\theta.$$

Переходячи від суми за хвильовими векторами до інтегралу  $\sum_{\mathbf{k}} = V/(2\pi)^3 \int_0^\infty k^2 dk \int_0^{2\pi} d\varphi$ , отримаємо засереднене значення  $\langle F \rangle$ , що характеризує вклад від структури. Введемо параметр  $\delta = \langle F \rangle \rho_0 g / (\Omega^2)$ , який характеризує міру безладу, причому  $0 < \delta \ll 1$ . Введемо також параметр, що характеризує зсув енергетичного рівня  $h = \Lambda^\sigma / \Delta^\sigma$ .

Знерозмірений параметр  $x = (E_F - E_0)/U_0$ . Якщо  $x=0$  незаповнений локалізований стан знаходиться точно на рівні Фермі,  $x=1$  означає, що рівень Фермі відповідає енергії  $E_0 + U_0$ . Для магнетизму сприятливий випадок  $x=1/2$ , коли рівні  $E_0$  і  $E_0 + U_0$  симетричні відносно енергії Фермі  $E_F$ . Введемо параметр  $y = U_0/\Delta$ . Малі значення параметра  $y$  відповідають немагнітному випадку, при великих  $y$  кореляція велика, локалізація зменшується.

На рис. 1 приведені значення магнітного моменту домішки  $m/m_0$ ,  $m = \langle n_+ - n_- \rangle$ . Тут  $m_0 = 0.849\mu_B$  при  $\delta = 0$  (квазікристалічний випадок). Показано зменшення магнітного моменту при зростанні параметра  $\delta$ . Зменшує область існування магнітних станів і зсув енергетичного рівня за рахунок взаємодії електронів провідності з домішкою. Параметри  $x, y, z$  характеризують випадок, сприятливий для магнетизму:  $E_0 < E_F < E_0 + U_0$ .

У випадку, показаному на рис.2, коли  $x=0.2$ , магнітний момент домішки швидше спадає до нульового значення.

Із системи рівнянь для середніх термодинамічних чисел заповнення локалізованого рівня (39) можна знайти  $m = \langle n_+ \rangle - \langle n_- \rangle$ , як функцію магнітного момента. Умова існування магнітних станів до-

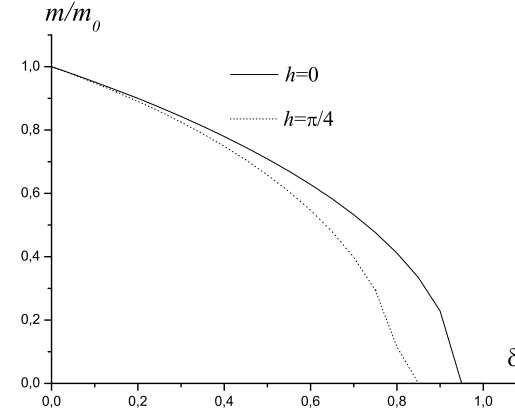


Рис. 1. Залежність магнітного моменту домішки від параметра  $\delta$  при  $y=10$ ,  $x=0.5$ ,  $z=0.1$ .

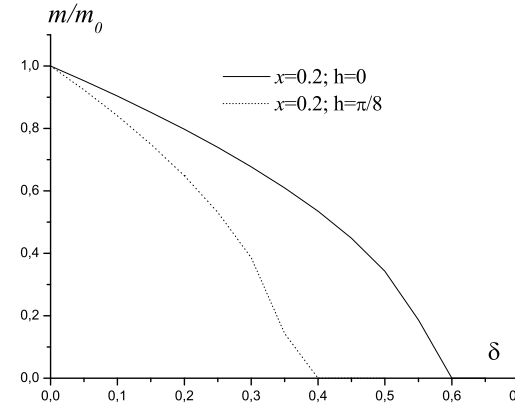


Рис. 2. Залежність магнітного моменту домішки від параметра  $\delta$  при  $y=10$ ,  $x=0.2$ ,  $z=0.1$ ,  $h = \pi/8$ .

мішки знаходиться з співвідношення

$$\left(\frac{\partial f(m)}{\partial m}\right)_{m=0} > 1.$$

В результаті отримуємо вираз

$$\rho(E_F)U_0 > \frac{1}{1 - 2z(\text{ctg}(\pi n) + y(n - x))},$$

який у частковому випадку  $z=0$ ,  $\delta=0$  переходить у відомий критерій моделі Андерсона існування магнітного стану домішки:  $\rho(E_F)U_0 > 1$ .

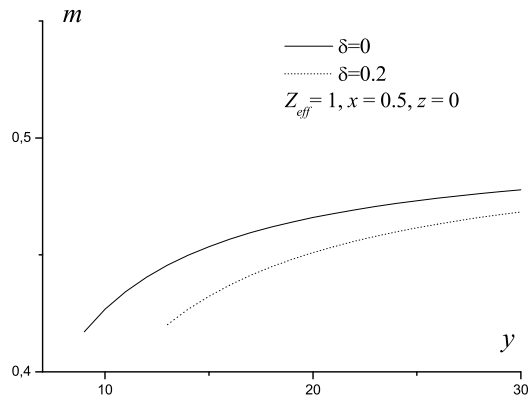


Рис. 3. Залежність магнітного моменту домішки від параметра  $y=U_0/\Delta$  при  $Z_{eff}=1$ .

На рис. 3 представлено зміну магнітного моменту домішки при збільшенні параметра кулонівського відштовхування  $y = U_0/\Delta$  при сталих значеннях ефективного заряду. Наступний рис. 4 – фазова діаграма переходу з немагнітного стану домішки у магнітний. Як видно з рисунка, область існування магнітних станів домішки у неупорядкованому середовищі зменшується порівняно з квазікристалічним випадком. Цей відомий експериментальний факт в теорії аморфних речовин детально обговорюється в монографії [10] та пізніших публікаціях.

Отже, запропонована узагальнена модель дає можливість розрахувати мікроскопічні характеристики домішкового стану в рідкому

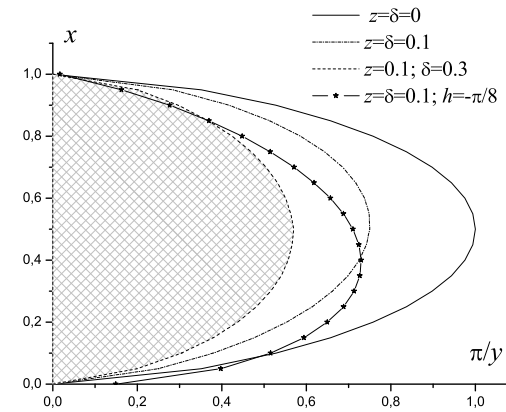


Рис. 4. Фазова діаграма переходу з немагнітного стану домішки у магнітний

аморфному металі і проаналізувати вплив структурної неупорядкованості на спостережувані величини.

В рамках методу двочасових запізнюючих функцій Гріна, застосувавши схему розщеплення Хартрі-Фока, отримано систему рівнянь самоузгодження для середніх термодинамічних чисел заповнення. Розраховано залежність магнітного моменту домішки від структурного параметра. Структурна неупорядкованість металевої матриці веде до розмиття домішкового рівня, і відповідно, зменшує магнітний момент домішки. Приведено фазову діаграму переходу з немагнітного у магнітний стани при різних значеннях модельних параметрів.

## Література

1. *Edwards S.F.* The electronic structure of liquid metals // Proc. Roy. Soc. – 1962. – Vol. A267. – P. 518.
2. *Roth L. M.* Tight-binding models of amorphous systems: liquid metals // Phys. Rev. B. – 1972. – Vol. 7. № 10 – P. 4321.
3. *Ishida Y., Yonezawa F.* Electronic structure of liquid metals in the tight-binding approximation // Prog. Theor. Phys. – 1973. – Vol. 49. №3 – P. 731-753.

4. *Schwartz L.* Short-range order and the electronic structure of binary alloys and liquid metals: a comparison of different approaches // *Phys. Rev. B.* – 1973.– Vol. 7. № 10 – P. 4425.
5. *Kaneyoshi T.* Contribution to the spin wave theory of amorphous ferromagnets // *J. Phys. C: Solid State Phys.* –1972. – Vol. 5.– P. 3504.
6. *Бом Д.* Общая теория коллективных переменных.– М.: Мир, 1964. – 474 с.
7. *Changfu L., Singh V.A., Roth L.M.* Evaluation of some effective medium theories for liquid and amorphous metals // *Phys.Rev. B.* – 1987.– Vol. 35. № 15.– P. 7898-7901.
8. *Довгопол С.П., Крохин А.Л., Мирзоев А.А.* Функция Грина жидких металлов. // *ТМФ.* –1979. – т. 41, № 3.– С. 378-387.
9. *Эллиот Р., Крумхансл Дж., Лис П.* Теория и свойства неупорядоченных материалов. – М.: Мир, 1977.– С. 13-136.
10. *Хандрих К., Кобе С.* Аморфные ферро- и ферримагнетики: Пер. с нем. – М.: Мир, 1982. – 296 с.
11. *Тябlikов С.В.* Методы квантовой теории магнетизма. – М.: Наука, 1975.
12. *Phariseau P., Ziman J.M.* The theory of the electronic structure of liquid metals // *Phil. Mag.* –1963. –Vol. 8, № 93. – P. 1487.
13. *Brouers F., Cyrot M., Cyrot-Lackman F.* Bethe-Peierls approximation in the electronic theory of disordered materials // *Phys. Rev. B.* – 1972.– Vol. 7. № 10 – P. 4370.
14. *Ziman J.M.* The localization of electrons in ordered and disordered systems. III. Quantum-mechanical particles in “free” bands // *J. Phys. C: Solid St. Phys.* –1969. – Vol. 2.– P. 1704.
15. *Юхновский И.Р., Головки М.Ф.* Статистическая теория классических равновесных систем. – К.: Наук. думка, 1980. – 372 с.
16. *Марч Н.Х., Тоси М.* Движение атомов в жидкости – М.: Металлургия, 1980. –306 с.
17. *Рудаvський Ю.К., Понеділок Г.В., Микитюк О.А., Клапчук М.І.* Стани електронегативних домішок в структурно неупорядкованих системах: Препр./ НАН України, Ін-т фізики конденсованих систем: ISMP-02-13U.– Львів: 2001.– 26 с.
18. *Рудаvський Ю.К., Понеділок Г.В., Клапчук М.І.* Модельний псевдопотенціал взаємодії електронів з негативними іонами: Препр./ НАН України, Ін-т фізики конденсованих систем: ISMP-02-24U.– Львів: 2002.– 18 с.
19. *Yu. Rudavskii, G. Ponedilok, M. Klapchuk* Model pseudopotential of the electron – negative ion interaction. // *Conden. Matter Phys.*

- 2003. – Vol.6, No 4(36).– P. 611-628.
20. *Рудаvський Ю.К., Понеділок Г.В., Клапчук М.І.* Стани електронегативних домішок в рідкому лужному металі.// *Журнал фізичних досліджень.*– 2005.–т. 8, №4.–С. 352-364.
21. *P. Anderson* Localized Magnetic States in Metals // *Phys. Rev.* – 1961. – Vol. 124, №41.– P. 23.
22. *Зубарев Д.Н.* Двухвременные функции Грина в статистической физике // *УФН.* – 1960. – т. 71, №1.– С. 71–116.
23. *J. Hubbard* Electron correlation in narrow energy bands // *Phys. Rev.* – 1963. – Vol. 144.– P. 238.
24. *A.C. Hewson* Theory of localized magnetic states in metals // *Phys. Rev.* –1966. – Vol. 144.– P. 420.
25. *H.G. Luo, Ju. Ying, S. Wang* Equation of motion approach to the solution of the Anderson model // *Phys. Rev. (B).* – 1999. – Vol. 59.– P. 9710.
26. *Ostrovskii O.I., Grygorian V.A., Vishkariov A.F.* Properties of Metallic Alloys. Moscow, Metallurgia, 1988.
27. *R. Kishore, S.K. Joshi* Electron correlation in ferromagnetism. II. Hybridization of *s* and *d* bands // *Phys. Rev. (B).* –1970. – Vol. 2.– P. 1411.
28. *Ф. Андерсон* Локальные моменты и локализованные состояния // *УФН.* – 1979. – т. 127, вып. 1.– С. 19.

# CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

**AIMS AND SCOPE:** The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

---

**ABSTRACTED/INDEXED IN:**

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- “Referativnyi Zhurnal”
- “Dzherelo”

---

**EDITOR IN CHIEF:** Ihor Yukhnovskii

**EDITORIAL BOARD:** T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Freiburg*; R. Folk, *Linz*; D. Henderson, *Provo*; Yu. Holovatch, *Lviv*; M. Holovko, *Lviv*; O. Ivankiv, *Lviv*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; H. Krienke, *Regensburg*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod, *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; N. Plakida, *Dubna*; G. Röpke, *Rostock*; Yu. Rudavskii, *Lviv*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; M. Vavrukh, *Lviv*; A. Zagorodny, *Kyiv*.

**CONTACT INFORMATION:**

Institute for Condensed Matter Physics  
of the National Academy of Sciences of Ukraine  
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine  
Tel: +380(322)760908; Fax: +380(322)761158  
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua    <http://www.icmp.lviv.ua>