

УДК 539.1

РАСЧЕТ НЕКОТОРЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ И АТОМНЫХ СВОЙСТВ НИКЕЛЯ МЕТОДОМ РЕЗОНАНСНОГО МОДЕЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА

В. М. Силонов, О. В. Крисько, А. А. Кацнельсон

(кафедра физики твердого тела)

В рамках метода модельного резонансного потенциала получены выражения формфактора модельного потенциала и характеристической функции переходного металла. С их помощью проведен расчет энергетической зонной структуры и фононных спектров кристаллического никеля, а также удельного электросопротивления жидкого никеля.

Основы теории учета $s-d$ взаимодействия с помощью резонансных модельных потенциалов (РМП), развитые в [1], получили дальнейшее развитие в [2—9]. В этих работах была доказана возможность применения метода РМП для теоретического описания некоторых физических свойств переходных металлов с использованием ограниченного числа их параметров. Так в [3—5] рассмотрено применение РМП для расчета свойств благородных металлов, а в [8, 9] — металлов $3d$ -ряда. В настоящей работе предложены усовершенствованная форма РМП и характеристическая функция переходного металла. Полученные выражения использовались для расчета энергетических зон и фононных спектров кристаллического никеля, а также удельного электросопротивления жидкого никеля.

Экранированный РМП и характеристическая функция переходного металла. Матричный элемент РМП d -металла запишем в виде [1]

$$V(\mathbf{q}, \mathbf{k}, E) = V_n(\mathbf{q}, \mathbf{k}, E) + U(\mathbf{q}, \mathbf{k}) / (E - \mathcal{E}_d), \quad (1)$$

где $V_n(\mathbf{q}, \mathbf{k}, E)$ — нерезонансная часть модельного РМП, \mathbf{k} — волновой вектор, \mathbf{q} — вектор рассеяния, E — энергия, \mathcal{E}_d — энергия d -резонанса,

$$U(\mathbf{q}, \mathbf{k}) = A_d \gamma(\mathbf{k}) \gamma(\mathbf{k} + \mathbf{q}) P_2(\cos \theta), \quad (2)$$

A_d — параметр, определяющий «силу» резонанса, $\gamma(\mathbf{k})$ — функция, характеризующая $s-d$ -взаимодействие, $P_2(\cos \theta)$ — второй полином Лежандра, θ — угол между векторами \mathbf{k} и $\mathbf{k} + \mathbf{q}$. В данной работе при получении выражения для $\gamma(\mathbf{k})$ предполагалось, что функция гибридизации может быть записана в виде

$$\gamma(r) = r^2 \exp(-br/R_m), \quad (3)$$

где b — параметр, определяющий положение максимума функции $\gamma(r)$, R_m — модельный радиус. Аналитическое выражение фурье-образа (3) запишем следующим образом:

$$\gamma(k) = k^2 / [2(1 + a^2 k^2)^4], \quad (4)$$

где $a = R_m/b$. Анализ показал, что величина параметра b влияет на рассчитываемые относительные положения $\Gamma_{25'}$, X_3 и X_5 . Поэтому значение параметра b выбиралось из условия $\Gamma_{25'} = (X_3 + X_5)/2$, которое приближенно выполняется для ГЦК переходных металлов.

Параметр A_d переходного металла может быть рассчитан с помощью соотношения

$$A_d = C_n W_d \Omega_i^{2/3}, \quad (5)$$

где Ω — объем, приходящийся на атом. Входящий в это выражение коэффициент C_n является константой для каждого d -ряда и может быть рассчитан для Cu, Ag и Au (также принадлежащих к этим рядам) по формуле

$$C_n = A_d / (W_d \Omega^{2/3}). \quad (6)$$

В работе [4] для благородных металлов характеристическая функция была представлена с помощью экранирующих функционалов Π [...], выражения для которых были получены в результате проведения энергонезависимого сдвига в модельном гамильтониане. Для переходных металлов более последовательным является проведение энергозависимого сдвига в модельном гамильтониане. В этом случае выражения для экранирующих функционалов примут вид

$$\Pi[\Omega] = 4 \sum_{k < k_F} \frac{1}{E_k^0 - E_{k+q}^0} - 4\Delta_{ef} \sum_{k > k_F} \frac{f'_k - 1}{E_k^0 - E_{k+q}^0}, \quad (7)$$

$$\Pi \left[\Omega \frac{U(q, k)}{E - \mathcal{E}_d} \right] = 4 \sum_{k > k_F} \frac{1}{E_k^0 - E_{k+q}^0} \cdot \frac{U(q, k)}{E_k^+ - \mathcal{E}_d} f'_k, \quad (8)$$

$$\Pi \left[\Omega \left(\frac{U(q, k)}{E - \mathcal{E}_d} \right)^2 \right] = 4 \sum_{k > k_F} \frac{1}{E_k^0 - E_{k+q}^0} \left(\frac{U(q, k)}{E_k^+ - \mathcal{E}_d} \right)^2 f'_k, \quad (9)$$

где

$$f'_k = (E_k^+ - \mathcal{E}_d) / F(E_k^0, \mathcal{E}_d),$$

$$E_k^+ = (1/2) [E_k^0 + \mathcal{E}_d + F(E_k^0, \mathcal{E}_d)],$$

$$\mathcal{E}_d = E_d - 0,2A_d \mathcal{E}_s,$$

$$F(E_k^0, \mathcal{E}_d) = [(E_k^0 - \mathcal{E}_d)^2 + 4\Delta_{ef}]^{1/2},$$

$$\Delta_{ef} = (E_F - E_F^0)(E_F - \mathcal{E}_d),$$

$$E_k^0 = k^2/2,$$

$\mathcal{E}_s = \frac{1}{2} \frac{\pi}{R_a}$ — ширина s -зоны, $k_F^0 = (2E_F^0)^{1/2}$, E_F — энергия уровня Ферми,

отсчитанная от дна зоны, E_F^0 — энергия уровня Ферми для нулевого приближения теории возмущений, Δ_{ef} — константа, определяющая величину сдвига энергии в модельном гамильтониане, \mathcal{E}_d — энергия d -резонанса, отсчитанная от дна зоны и выбираемая при $k = k_0$, k_0 — радиус сферы Дебая, E_d — середина d -зоны [10]. Выражения для Π [...], полученные в [4] для благородных металлов, являются частным случаем выражений (7) — (9). Интересно отметить, что энергетический знаменатель типа $E_k^+ - \mathcal{E}_d$ фигурирует также в теории полностью ортогонализированных плоских волн [11]. С использованием (7) — (9) экранированный формфактор РМП $v(q, k_F, E_F)$ и характеристическая функция зонной структуры $F_{bs}(q)$ могут быть записаны в виде

$$v(q, k_F, E_F) = \frac{v_n(q, k_F^0) + v_{dpl}(q) + v^{ee}(q) \Pi \left[\Omega \frac{U(q, k)}{E - \mathcal{E}_d} \right]}{\mathcal{E}^*(q)} + U(q, k_F) P_2(\cos \theta) / (E_F - \mathcal{E}_d), \quad (10)$$

$$F_{bs}(q) = \frac{1}{2} \frac{1}{v^{ee}(q)} \{ (v(q, k_F, E_F) - U(q, k) P_2(\cos \theta) / (E_F - \mathcal{E}_d))^2 / \mathcal{E}^*(q) + v^{ee}(q) \Pi [\Omega (U(q, k) / (E - \mathcal{E}_d))^2] - (v_n(q, k_F) + v_{dpl}(q))^2 + v_{dpl}^2(q) \}, \quad (11)$$

где $v^{ee}(q)$ — фурье-образ потенциала электрон-электронного взаимодействия с учетом обмена и корреляций, $v_n(q, k_F^0)$ — формфактор нерезонансной части, записанный в квазилокальном приближении, $v_{dpl}(q)$ — фурье-образ потенциала ортогонализационной дырки,

$$\mathcal{E}^*(q) = 1 - v^{ee}(q) \Pi [\Omega].$$

Использовавшиеся в расчетах параметры РМП никеля приведены в таблице. В случае жидкого состояния проводилась перенормировка на объем жидкого никеля [10]. Энергия Ферми жидкого состояния рас-

Значения параметров РМП никеля для твердого и жидкого состояний

Состояние	Ω	E_d	$W_d/2$	A_d	Z_{dpl}	Δ_{ef}	Z_s	E_F
Твердое	73,6	0,254	0,0694	0,257	-1,83	0,0053	0,906	0,311
Жидкое	85,2	0,230	0,0550	0,222	-1,70	0,0033	0,906	0,275

считывалась в рамках модели [10]. Структурный фактор жидкого никеля взят из [12]. Нерезонансная часть РМП никеля выбиралась в виде, предложенном в [5]. При проведении численных расчетов, как и в [13], экранирующие функционалы рассчитывались приближенно с последующей нормировкой на их точные значения при $q=0$.

Результаты расчетов. Для иллюстрации возможностей предложенных выражений модельного резонансного потенциала и характеристической функции проводились расчеты как электронных, так и атомных свойств никеля. В качестве электронных свойств были выбраны зонная структура и электросопротивление жидкого состояния, а атомных — фоновые спектры.

Зонная структура никеля. На рис. 1 приведены результаты расчетов зависимости энергии электронов от квазимпульса никеля для направлений высокой симметрии с использованием методики, предложенной в [7], а также данные, полученные методом ортогонализированных плоских волн (ОПВ) [14]. Видно, что гибридные ветви, лежащие ниже уровня Ферми, близки к рассчитанным методом ОПВ. Наблюдаемые различия ветвей, лежащих выше уровня Ферми, можно объяснить использованием при расчетах гибридных ветвей структурно-независимого приближения.

Электросопротивление жидкого никеля. Рассчитанное в борновском приближении удельное электросопротивление жидкого никеля оказалось равным 54 мкОм·см, в то время как экспериментальное значение составляет 85 мкОм·см [15] (т. е. различаются на 36%). Это расхождение следует считать удовлетворительным, поскольку ρ_L никеля, рассчитанное также методом РМП в [9], отличается от эксперимен-

тального значения на 43% (48,8 мкОм·см). Видимо, наблюдаемые расхождения в какой-то степени можно отнести за счет приближенного характера структурного фактора жидкого металла $S(q)$.

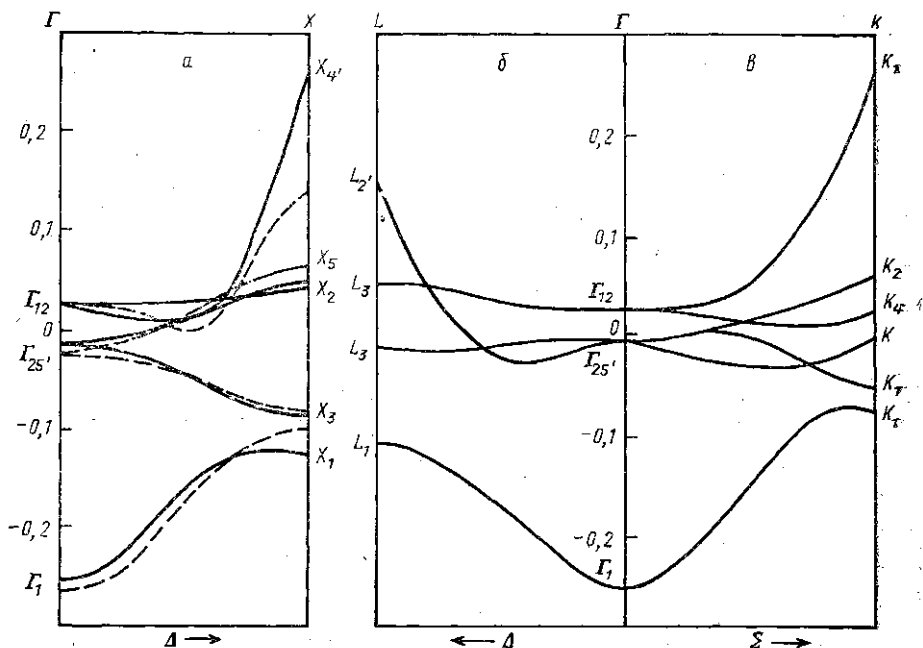


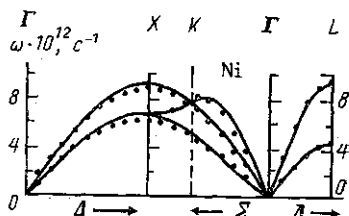
Рис. 1. Зонная структура никеля в направлениях высокой симметрии [001] (а), [111] (б) и [110] (в): сплошные линии — расчет с использованием РМП, предложенного в данной работе, штриховые — расчет методом ОПВ [14]

Фононные спектры. Фононные спектры никеля рассчитывались с использованием стандартной схемы расчета:

$$M\omega_{ij}^2(q) = \sum_{\mathbf{H}} [(q + \mathbf{H})_i (q + \mathbf{H})_j \Phi(|q + \mathbf{H}|) - H_i H_j \Phi(|\mathbf{H}|)], \quad (12)$$

где $\Phi(q) = F_{bs}(q) + F_{es}(q)$ — суммарная характеристическая функция. Результаты расчета приведены на рис. 2. Там же нанесены экспериментальные значения [16]. Видно, что рассчитанные и экспериментальные значения удовлетворительно согласуются.

Рис. 2. Фононные спектры никеля: сплошная линия — расчет, точки — эксперимент [15]



Таким образом, в данной работе в отличие от подхода Дадженса при расчетах свойств переходных металлов предложено использовать процедуру энергезависимого сдвига в модельном гамильтониане. Это

привело к модификации экранированного РМП и характеристической функции переходного металла, а также к видоизменению выражений для экранирующих функционалов. Полученные формулы предложено использовать для расчетов как электронных, так и атомных свойств переходных металлов. Проверка развитого подхода проведена на примере расчета энергетических зон никеля, фононных спектров кристаллического никеля и удельного электросопротивления жидкого никеля.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Heine V.//Phys. Rev. 1967. 153, N 3. P. 673. [2] Oli V. A., Anima-
zu A. O. E.//Phys. Rev. 1976. B13, N 6. P. 2398. [3] Dagens L.//J. Phys. F. 1976. 6,
N 10. P. 1801. [4] Dagens L.//J. Phys. F. 1977. 7, N 7. P. 1167. [5] Dagens L.//
//Phys. Stat. Sol. (b). 1977. 84. P. 311. [6] Dagens L.//Ibid. 1979. 93. P. 279.
[7] Dagens L.//J. Phys. F. 1981. 11, N 11. P. 2327. [8] Юрьев А. А., Вато-
лин Н. А.//Изв. АН СССР, Металлы. 1984. 5. С. 44. [9] Юрьев А. А.//Тез. научных
сообщ. V Всесоюз. конф. по строению и свойствам металлических и шлаковых распла-
вов. Свердловск, 1983. Ч. 1. С. 175. [10] Харрисон У. Электронная структура и
свойства твердых тел. Физика химической связи, М., 1983. Т. 2. [11] Гурский Б. А.,
Гурский З. А.//Физ. мет. и металловедение. 1980. 50, № 5. С. 928. [12] Wase-
da Y., Ohtani M.//Phys. Stat. Sol. (b). 1974. 62. P. 535. [13] Силюнов В. М.,
Кацнельсон А. А., Крисько О. В. Препринт физ. фак. МГУ № 4. М., 1986.
[14] Mattheis L. F.//Phys. Rev. 1964. 134. P. A970. [15] Смитлз К. Металлы.
Справочник. М., 1980. [16] Bergeneau R. J., Cordes J., Dolling G.,
Weads A. D. B.//Phys. Rev. 1964. 136. P. A1359.

Поступила в редакцию
08.12.88