

УДК 539.2

## ГЛАДКИЙ НЕЛОКАЛЬНЫЙ МОДЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ПРОСТЫХ МЕТАЛЛОВ. ФОРМФАКТОР

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

(кафедра физики твердого тела)

E-mail: sols333@phys.msu.ru

**В полной нелокальной теории получено выражение формфактора простого металла для гладкого нелокального модельного потенциала.**

В работе [1] было предложено семейство гладких нелокальных модельных потенциалов простых металлов (ГНМП), формфактор которых отличается от аналогичных отсутствием нефизических осцилляций. В работе [2] была описана методика расчета параметров ГНМП, при определении которых использовались спектроскопические данные значений термов свободных ионов [3]. Необходимость получения выражения формфактора ГНМП связана с его широким использованием при расчетах различных характеристик металлов [4–12].

Целью настоящей работы является получение выражения формфактора ГНМП простых металлов в полной нелокальной теории.

ГНМП иона  $V(r, \varepsilon)$  записывается в виде [1]

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

где

$$V_l(r, \varepsilon) = -\frac{Z}{r} - \sum_{l=0}^{\infty} \left[ \left( A_l(\varepsilon) - \frac{Z}{r} \right) \vartheta^K(r, R_m) \right],$$

$$\vartheta^K(r, R_m) = \frac{1}{(1 + (r/R_m)^{2M})^K},$$

$R_m$  — параметр, характеризующий радиус модельной сферы;  $K$  и  $M$  — целочисленные степени;  $\vartheta^K(r, R_m)$  — функция, сглаживающая ступенчатый характер модельного потенциала;  $\varepsilon$  — энергия рассеивающегося электрона в поле свободного иона;  $l$  — орбитальное квантовое число;  $Z$  — валентность иона;  $r$  — расстояние от центра иона;  $A_l(\varepsilon)$  — параметр, характеризующий глубину потенциальной ямы ГНМП для каждого  $l$  при  $r$ , близких к нулю. Из (1) видно, что  $\vartheta^K(r, R_m) \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$  и  $\vartheta^K(r, R_m) \rightarrow 1$  при  $r \rightarrow 0$ . Так как потенциал при  $r > R_a$  должен равняться кулоновскому потенциалу иона, то необходимо выполнение условия  $\vartheta^K(r, R_m) \approx 0$  при  $r \approx R_m$ . На рис. 1 приведены зависимости  $\vartheta^K(r, R_m)$  от  $x = r/R_m$  при  $K = 1, 4$  и  $12$ . Видно, что условие  $\vartheta^K(r, R_m) = 0$  при  $r = R_m$  не выполняется при  $K = 1$ , выполняется приблизительно при  $K = 4$  и выполняется с высокой степенью

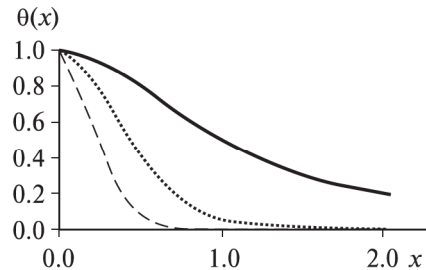


Рис. 1. Зависимость  $\vartheta^K(r, R_m)$  от  $x = \frac{r}{R_m}$  при  $K = 1$  (сплошная кривая), 4 (штриховая) и 12 (пунктир)

точности (сотые доли процента) при  $K = 12$ . По аналогии с теорией модельных потенциалов типа Хейне–Абаренкова [4] будем считать, что параметр  $R_m$  характеризует модельную сферу. Но в случае гладкого потенциала, как видно из рис. 1 и выражения (1), четко выраженной границы модельной сферы не существует. Значение  $R_m$  неявно связано с параметром  $K$ . Эта связь обусловлена требованием близости модельного потенциала к кулоновскому при  $r > R_a$ . Исходя из этого требования, мы должны выбирать такие  $K$  и  $R_m$ , чтобы выполнялось условие близости ГНМП к кулоновскому потенциалу при  $r > R_a$ , т.е.  $\vartheta^K(r, R_m) \approx 0$  при  $r \approx R_a$  и  $\vartheta^K(r, R_m) \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$ . Как видно из рис. 1 и выражения (1), при  $K = 12$  и  $R_m \approx R_a$  отклонение значений ГНМП от кулоновского составляет порядка сотых долей процента, а с ростом  $r$  это отклонение быстро уменьшается. При  $K = 12$ , видимо, следует выбирать  $R_m$  близким к радиусу атомной сферы. В этом случае можно считать, что «модельная сфера» совпадает с атомной. Подобный выбор параметров приближает ГНМП к ячеистому потенциалу, в котором «модельной сферой» можно считать ячейку Зейтца [13]. Для магния параметры потенциала при  $K = 12$  и  $R_m = 3.35$  ат. ед., рассчитанные по методике [2], приведены в таблице. Используя эти данные, сравним ГНМП иона с оптимизированным потенциалом (ОМП) [8–10].

На рис. 2 приведены значения потенциала иона магния в кристалле для двух значений  $l$  в моделях ГНМП и ОМП, а также значения кулоновского по-

**Значения параметров ГНМП потенциала Mg  $A_0, A_1, A_2, \frac{dA_0}{dE}, \frac{dA_1}{dE}, \frac{dA_2}{dE}$  и значения  $R_m, \Omega, \frac{c}{a}$ , используемые в работе (ат. ед.)**

$A_0(E_F)$	$\left. \frac{dA_0(E)}{dE} \right _{E=E_F}$	$A_1(E_F)$	$\left. \frac{dA_1(E)}{dE} \right _{E=E_F}$	$A_2(E_F)$	$\left. \frac{dA_2(E)}{dE} \right _{E=E_F}$	$R_m$	$\Omega$	$\frac{c}{a}$
-2.257	-1.316	-1.454	-0.729	3.091	-0.174	3.35	156.8	1.623

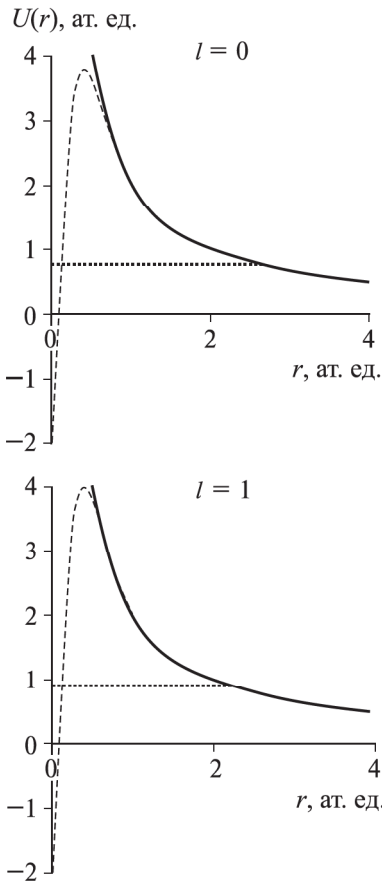


Рис. 2. Значения потенциала иона магния для двухорбитальных моментов в модели ГНМП ( $K = 12$ ) (штриховая кривая) и ОМП (пунктир). Для сравнения приведен кулоновский потенциал (сплошная кривая)

тенциала. Видно, что при  $r > R_a$  ( $R_a \approx 3.35$  ат. ед.) различие между значениями потенциала для обоих значений  $l$  невелико. Существенные отличия наблюдаются при  $r \leq R_a$  как по величине, так и по характеру зависимости  $V(r)$ . ОМП больше нуля и не изменяется при  $r < R_m^{OMP}$ , а при  $r \geq R_m^{OMP}$  ОМП равен кулоновскому потенциалу. К недостаткам ОМП можно отнести его нефизический излом при  $r = R_m^{OMP}$ , поскольку его производная имеет разрыв второго рода, что должно приводить к нефизическим осцилляциям формфактора ОМП в обратном пространстве. ГНМП в области  $r < R_a$  меняет знак и значительно отличается от ОМП при  $r < R_m^{OMP}$ , а в области  $r \geq R_m^{OMP}$  с ростом  $r$  приближается к кулоновскому потенциалу. ГНМП не имеет нефизических изломов и плавно переходит от псевдопотенциала остова к кулоновскому потенциалу вне атомной сферы.

В потенциале (1) можно выделить локальную, не зависящую от  $\varepsilon$  и  $P_l$ , и нелокальную, зависящую от  $\varepsilon$  и  $P_l$ , части. Для случая простого металла, как и в [6], положим все  $A_l$  для  $l > 1$  равными  $C = A_2$ . Тогда (1) запишем в виде суммы локальной и нелокальной частей:

$$V_l(r) = V_{loc}(r) + V_{nonloc}(r), \quad (2)$$

где

$$V_{loc}(r) = -\frac{Z}{r} + \frac{Z}{r} \vartheta^K(r, R_m) - C \vartheta^K(r, R_m), \quad (3)$$

$$V_{nonloc}(r) = -\sum_{l=0}^2 (A_l - C) \vartheta^K(r, R_m) P_l.$$

В выражениях (3)  $P_l$  — проекционный оператор.

Матричный элемент ГНМП неэранированного иона также можно представить в виде суммы локальной и нелокальной частей:

$$\langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | V_{loc}(r, \varepsilon) | \mathbf{k} \rangle = B(q) + F(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E), \quad (4)$$

где

$$B(q) = \frac{4\pi}{\Omega} \int_0^\infty V_{loc}(r) \frac{\sin(qr)}{qr} r^2 dr.$$

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

$$B(q) = \frac{4\pi Z}{\Omega q^2} [-B_1(q) + B_2(q)],$$

$$B_1(q) = 1 + C \frac{\pi R_m}{2^{12} 11! Z} X^2 f_K^{-1}(X), \quad (5)$$

$$B_2 = X \int_0^\infty \frac{\sin(t)}{(1+t^2)^K} dt,$$

где  $X = qR_m$ ,  $f_K^{-1}(X)$  — многочлен порядка  $K - 2$ . Учитывая линейную зависимость  $A_l(E)$  от энергии:

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

нелокальную часть формфактора ГНМП можно разбить на сумму двух функций — энергозависящей нелокальной части формфактора и энергонезависящей:

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E) = F_0(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) + F_1(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E), \quad (6)$$

где

$$F_0(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) = -\frac{4\pi R_m^3}{\Omega} \times$$

$$\begin{aligned}
& \times \sum_{l=0}^2 [2l+1] [A_l(E_F) - C] D_{K,l}(a, b) P_l(\cos \Theta), \\
F_1(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E_k) &= -\frac{4\pi R_m^3}{\Omega} \times \\
& \times \sum_{l=0}^2 [2l+1] \left[ \frac{d(A_l(E))}{dE} \Big|_{E=E_F} \right] \times \\
& \times (E_k - E_F) D_{K,l}(a, b) P_l(\cos \Theta),
\end{aligned}$$

$\Theta$  — угол между векторами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ ,  $P_l(\cos \Theta)$  — полином Лежандра,  $E_k$  — энергия электрона с импульсом  $\mathbf{k}$ ,  $E_F$  — энергия электрона на уровне Ферми,  $b = |\mathbf{k} + \mathbf{q}| R_m$ ,  $a = |\mathbf{k}| R_m$ ,  $R = |b - a|$ ,  $S = b + a$ . При вычислении  $D_{K,l}(a, b)$  приходим к следующим интегралам, которые берутся аналитически с помощью вычетов:

$$D_{K,l}(a, b) = \frac{1}{ab} \int_0^{\infty} \left[ \frac{j_l(at) j_l(bt)}{(1+t^2)^K} \right] t^2 dt. \quad (7)$$

Можно показать, что

$$\begin{aligned}
D_{K,0}(a, b) &= \frac{1}{2ab} (f_K^0(R) - f_K^0(S)) \frac{\pi}{2^K (K-1)!}, \\
D_{K,1}(a, b) &= \frac{-1}{2(ab)^2} [(f_K^1(R) - ab f_K^0(R)) - \\
& - (f_K^1(S) + ab f_K^0(S))] \frac{\pi}{2^K (K-1)!}, \\
D_{K,2}(a, b) &= \frac{3}{2(ab)^3} [(f_K^2(R) - ab f_K^1(R)) - \\
& - (f_K^2(S) + ab f_K^1(S))] \frac{\pi}{2^K (K-1)!} + D_{K,0}(a, b),
\end{aligned}$$

где  $f_K^{-1}(X)$ ,  $f_K^0(X)$ ,  $f_K^1(X)$ ,  $f_K^2(X)$  — многочлены порядка  $K-2$ ,  $K-1$ ,  $K$ ,  $K+1$  соответственно, которые вычисляются по формулам

$$f_k^0(X) = \sum_{j=0}^{k-1} \frac{X^{k-1-j}}{2^j} C_{k-1}^j \frac{(K-1+j)!}{(K-1)!}, \quad (8)$$

$$f_{K+1}^{-1}(X) = f_K^0(X) = f_{K-1}^1(X) = f_{K-2}^2(X).$$

Здесь  $C_{K-1}^j$  — число сочетаний из  $K-1$  по  $j$ . В частности, для  $K=12$

$$\begin{aligned}
f_{12}^{-1}(X) &= e^{-x} (x^{10} + 550x^9 + 1485x^8 + 25740x^7 + \\
& + 315315x^6 + 2837835x^5 + 18918900x^4 + 91891800x^3 + \\
& + 310134825x^2 + 654729075x + 654729075),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f_{12}^0(X) &= e^{-x} (x^{11} + 66x^{10} + 2145x^9 + 45045x^8 + \\
& + 675675x^7 + 7567560x^6 + 64324260x^5 + \\
& + 413513100x^4 + 1964187225x^3 + 6547290750x^2 + \\
& + 13749310575x + 13749310575),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f_{12}^1(X) &= e^{-x} (x^{12} + 78x^{11} + 3003x^{10} + 75075x^9 + \\
& + 1351350x^8 + 18378360x^7 + 192972780x^6 + \\
& + 1571349780x^5 + 9820936125x^4 + 45831035250x^3 + \\
& + 151242416325x^2 + 316234143225x + 316234143225),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f_{12}^2(X) &= e^{-x} (x^{13} + 91x^{12} + 4095x^{11} + 120120x^{10} + \\
& + 2552550x^9 + 41351310x^8 + 523783260x^7 + \\
& + 5237832600x^6 + 41247931725x^5 + 252070693875x^4 + \\
& + 1159525191825x^3 + 3794809718700x^2 + \\
& + 7905853580625x + 7905853580625)
\end{aligned}$$

Таким образом, как видно из этих выражений, в отличие от формфакторов типа Хейне–Абаренкова, матричные элементы ГНМП с ростом вектора рассеяния убывают по экспоненциальному закону и не содержат нефизических осцилляций (не содержат тригонометрических функций, зависящих от вектора рассеяния).

Самосогласованный потенциал металла можно представить в виде суммы потенциалов ионов и экранирующего потенциала, созданного электронной плотностью  $\rho_{sc}$  почти свободных электронов:

$$V_{cr} = V_i + V_{ee} \rho_{sc} \quad (9)$$

$V_{ee}$  — потенциал электрон-электронного взаимодействия;  $V_i$  — потенциал ионов кристалла, равный сумме потенциалов неэкранированных ионов.

Если учесть «размытость» заряда ортогонализационной дырки, то экранирующую электронную плотность можно представить в виде суммы [11]

$$\rho_{sc} = \rho_{ps} + \rho_{ort}, \quad (10)$$

$\rho_{ps}$  — псевдоплотность, построенная из псевдовольновых функций;  $\rho_{ort}$  — плотность заряда ортогонализационных дырок. Если ограничиться линейными по потенциалу членами, то псевдоплотность можно выразить через экранирующий функционал [11] от потенциала экранированного иона

$$\rho_{ps}(q) = S(q) \Pi(\Omega V(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, E)), \quad (11)$$

где  $S(q)$  — структурный фактор.

Экранирующий функционал для простых металлов [11, 12, 14] представляет собой сумму в  $\mathbf{k}$  — пространстве по  $\mathbf{k}$  в области  $|\mathbf{k}| < k_f$ , которую можно представить в виде интеграла:

$$\begin{aligned}
\Pi[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)] &= 2 \sum_{k < k_f} \frac{2F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)}{k^2 - k'^2} = \\
&= \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \int_{k < k_f} \frac{2F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E_k)}{k^2 - k'^2} d\mathbf{k}. \quad (12)
\end{aligned}$$

В случае если числитель подынтегральной функции в (12) зависит только от  $q$  и не зависит от  $k$ , то

$$\Pi[\Omega f(q)] = f(q) \frac{1 - \varepsilon(q)}{V_{ee}(q)}, \quad (13)$$

где  $V_{ee}(q)$  — потенциал электрон-электронного взаимодействия с учетом обмена и корреляции,  $\varepsilon(q)$  — диэлектрическая проницаемость с учетом обмена и корреляции.

Как следует из (9)–(13), экранированный форм-фактор потенциала иона можно представить в виде

$$V(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, E_k) = V_{\text{ion}}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, E_k) + V_{\text{ort}}(q) + V_{ee}(q)\Pi[\Omega V(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, E)], \quad (14)$$

$V_{\text{ort}}(q)$  — потенциал ортодырки в приближении Дагенса [11]. Разобьем потенциал неэкранированного иона на сумму локальной и нелокальной частей потенциала аналогично (6). Для простоты записи опустим аргументы, тогда (14) можно переписать в виде

$$V = V_{\text{nonloc}} + V_{\text{loc}} + V_{\text{ort}} + V_{ee}\Pi[\Omega V]. \quad (15)$$

Воспользуемся соотношениями (13), (14), тогда

$$\Pi[\Omega V] = \Pi[\Omega(V_{\text{nonloc}} + V_{\text{loc}} + V_{\text{ort}})] + (1 - \varepsilon)\Pi[\Omega V]. \quad (16)$$

С помощью (16) выразим экранирующий функционал от потенциала экранированного иона через экранирующий функционал от потенциала неэкранированного иона и подставим его в (15). В результате получим выражение для потенциала экранированного иона в полной нелокальной теории. В итоге получим

$$V(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, E_k) = F(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, E_k) + \frac{B(q) + V_{\text{ort}}(q) + V_{ee}(q)\Pi[\Omega F(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, E)]}{\varepsilon(q)}, \quad (17)$$

где

$$V_{ee}(q) = \frac{4\pi}{\Omega q^2}(1 - f(q)), \quad (18)$$

$$f(q) = \frac{1}{2} \left( 1 - \exp \left( -0.535 \left( \frac{q}{k_f} \right)^2 \right) \right),$$

$f(q)$  — обменно-корреляционная функция в приближении Шоу [10],

$$V_{\text{ort}}(q) = V_{ee}(q)Z_{\text{dpl}}n_{\text{ort}}(q), \quad (19)$$

$$Z_{\text{dpl}} = \frac{\Omega}{\pi^2} \int_0^{k_f} \left( -\frac{4\pi R_m^3}{\Omega} \sum_{l=0}^2 [2l + 1] \times \right. \\ \left. \times \left[ \frac{d(A_l(E))}{dE} \Big|_{E=E_F} \right] D_{K,l}(a, a)k^2 \right) dk, \quad (20)$$

$n_{\text{ort}}(q)$  — формфактор плотности заряда ортогонализационной дырки [12].

При численных расчетах подобных интегралов типа (12) возникают проблемы, связанные с особенностью подынтегральной функции при  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ . Эта трудность преодолевается, если представить этот

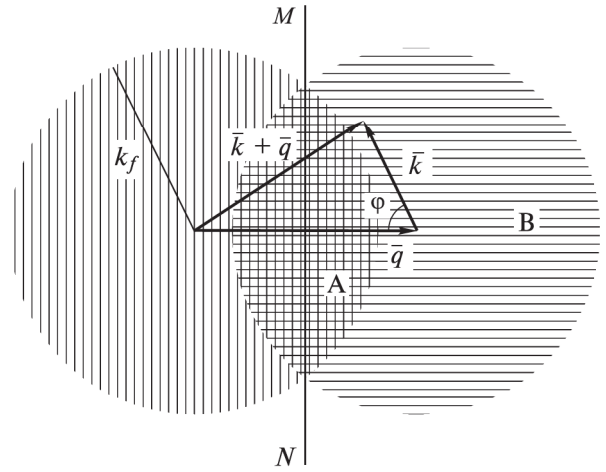


Рис. 3. Области интегрирования при вычислении экранирующего функционала от нелокальной части потенциала. При  $q < 2k_f$  область  $A$  — область перекрытия окружностей справа от прямой  $MN$  (более темная область). Область  $B$  — более светлая область справа от прямой  $MN$ . При  $q > 2k_f$  область  $A$  отсутствует, область  $B$  — область, ограниченная окружностью радиуса  $k_f$

интеграл в виде суммы двух интегралов по различным областям интегрирования таким образом, чтобы особенности подынтегральной функции оказывались на краях интервалов интегрирования. В этом случае численное интегрирование не представляет сложности при использовании метода особых точек Гаусса. Численные расчеты производились в полярной системе координат в двух областях интегрирования (рис. 3). Выражение для расчета интеграла от нелокальной части потенциала представим в виде суммы по областям  $A$  и  $B$ :

$$\Pi[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)] = \Pi_A[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)] + \Pi_B[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)]. \quad (21)$$

Первое слагаемое в (21) имеет вид

$$\Pi_A[F_K(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)] = \frac{\Omega}{\pi^2} \int_{k_a}^{k_f} dk \int_{t_a}^{t_b} \frac{2(F_K(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E_k) - F_K(\mathbf{k}', \mathbf{k}; E'_k))}{k^2 - k'^2} dt, \quad (22)$$

где

$$t_a = \begin{cases} -1 & \text{при } k \leq k_f - q, \\ \frac{k^2 + q^2 - k_f^2}{2kq} & \text{при } k > k_f - q, \end{cases}$$

$$t_b = \begin{cases} 1 & \text{при } k \leq \frac{q}{2}, \\ \frac{q}{2k} & \text{при } k > \frac{q}{2}, \end{cases} \quad k_a = \begin{cases} 0 & \text{при } q \leq k_f, \\ k_f - q & \text{при } q > k_f. \end{cases}$$

Второе слагаемое в (21) записывается следующим образом:

$$\Pi_B[F_K(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)] = \frac{\Omega}{\pi^2} \int_{k_a}^{k_f} dk \int_{-1}^{t_b} \frac{2F_K(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E_k)}{k^2 - k'^2} dt, \quad (23)$$

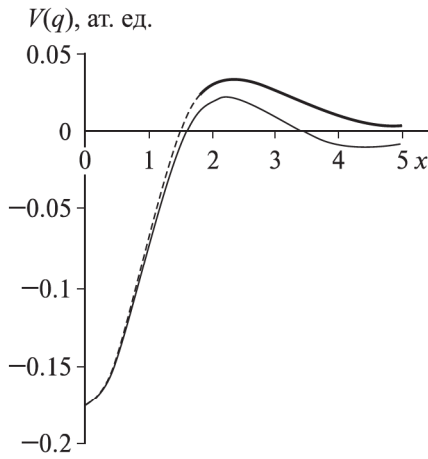


Рис. 4. Зависимости экранированного матричного элемента ГНМП (рассеяние назад, пунктир) и ОМП (сплошная линия)

где  $t = \cos(\phi)$  (рис. 4),  $k'^2 = q^2 + k^2 - 2qkt$ ,  $P_0(\cos \Theta) = 1$ ,  $P_1(\cos \Theta) = \cos(\theta)$ ,  $P_2(\cos \Theta) = 0.5(3 \cos^2(\theta) - 1)$ ,  $\cos(\theta) = \frac{k'^2 + k^2 - q^2}{2kk'}$ ,

$$k_a = \begin{cases} 0 & \text{при } q \geq k_f, \\ k_f - q & \text{при } q < k_f, \end{cases}$$

$$t_b = \begin{cases} 1 & \text{при } k \leq q - k_f, \\ \frac{k^2 + q^2 - k_f^2}{2kq} & \text{при } k > q - k_f. \end{cases}$$

Точность интегрирования можно контролировать с помощью предельных соотношений [14]

$$\lim_{q \rightarrow 0} \Pi_A[F_K(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)] = -Z_{\text{dpl}},$$

$$\lim_{q \rightarrow 0} \Pi_B[F_K(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)] = -\frac{3ZF_K(k_f, k_f; E_{k_f})}{k_f^2}.$$

Обычно при сравнении различных моделей псевдопотенциалов [4, 7, 8] используют матричные элементы потенциала экранированного иона при «рассеянии назад». В этом случае при расчете нелокальной части потенциала учитывалось, что

$$|\mathbf{k}_f + \mathbf{q}| = \begin{cases} k_f, & q < 2k_f, \\ q - k_f, & q \geq 2k_f. \end{cases}$$

На рис. 4 приведена зависимость ГНМП экранированного иона магния при «рассеянии назад». Видно, что значения матричного элемента ГНМП при  $q < 2k_f$  несколько выше значений матричного элемента ОМП [8, 9]. При  $q > 2k_f$  формфактор ОМП имеет осциллирующий характер (меняет знак) и с ростом  $q$  стремится к нулю. Подобные осцилляции формфактора ОМП связаны с его негладким характером. Формфактор ГНМП, в отличие от формфактора ОМП, плавно убывает при  $q > 2k_f$ , стремясь к нулю с ростом  $q$ .

#### Литература

1. Крисько О.В., Силонов В.М., Скоробогатова Т.В., Бокарев Д.П. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2006. № 1. С. 76 (Moscow University Phys. Bull. 2006. N 1. P. 100).
2. Крисько О.В., Силонов В.М., Скоробогатова Т.В., Бокарев Д.П. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2006. № 5. С. 53 (Moscow University Phys. Bull. 2006. N 5. P. 56).
3. Moore C.E. Atomic energy levels. National bureau of standards. V. I–III. Washington, D.C., 1949.
4. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. М., 1968.
5. Heine V., Abarenkov I. // Phil. Mag. 1964. **9**. P. 451.
6. Animalu A.O.E., Heine V. // Phil. Mag. 1965. **12**, N 20. P. 1249.
7. Хейне В., Козн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала. М., 1973.
8. Shaw R.W., Harrison W.A. // Phys. Rev. 1967. **163**. P. 604.
9. Shaw R.W. // Phys. Rev. 1968. **174**, N 3. P. 769.
10. Shaw R.W., Pynn R. // J. Phys. C. 1969. **2**, N 2. P. 2071.
11. Dagens L. // J. Phys. F: Metal Phys. 1976. **6**, N 10. P. 1801.
12. Dagens L. // Phys. Stat. Sol. (b). 1977. **84**. P. 311.
13. Займан Дж. Вычисление блоховских функций. М., 1973.
14. Силонов В.М. Введение в микроскопическую теорию твердых растворов. М., 2005.

Поступила в редакцию  
03.03.06