

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 539.2

**ФОНОННЫЕ СПЕКТРЫ МАГНИЯ В МЕТОДЕ ГЛАДКОГО НЕЛОКАЛЬНОГО МОДЕЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА**

**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 характеристической функции простого металла для гладкого нелокального модельного потенциала. Расчеты фононных спектров магния, проведенные с использованием полученных выражений характеристической функции, удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.**

В работе [1] был предложен гладкий нелокальный модельный потенциал простых металлов (ГНМП), формфактор которых отличается от аналогичных отсутствием нефизических осцилляций. В работе [2] была описана методика расчета его параметров, при определении которых использовались спектроскопические данные значений термов свободных ионов. В работе [3] получено выражение его формфактора. Настоящая работа посвящена получению выражения характеристической функции при использовании ГНМП.

В полной нелокальной теории характеристическая функция чистого металла, нормированная на единицу, имеет вид [4, 5]

$$F_{bs}(q) = \frac{V_{loc2}^2(q) - V_{loc1}^2(q) + V_{f2}(q) + V_{ort}^2(q)}{V_{ee}(q)V'_{ee}(q)}, \quad (1)$$

где  $V_{ee}(q)$  — потенциал электрон-электронного взаимодействия;  $V'_{ee}(q)$  — потенциал электрон-электронного взаимодействия с учетом обмена и корреляции;  $V_{ort}(q)$  — потенциал ортодырки в приближении Дагенса [4],  $V_{loc1}(q)$  — локальная часть потенциала с учетом ортогонализационной дырки:

$$V_{loc1}(q) = B(q) + V_{ort}(q); \quad (2)$$

$V_{ee}(q) = \frac{4\pi Z_{eff}^2}{\Omega q^2}$ ,  $Z_{eff}$  — эффективный заряд иона с учетом размытости (неточности) ортодырки [4];  $Z_{eff}^2 = (Z + Z_{dpl})^2 - Z_{dpl}^2$ ,  $Z_{dpl}$  — заряд ортодырки и в наших обозначениях равен

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

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

$f(q)$  — обменно-корреляционная функция в приближении Шоу [5]. В выражении (1)

$$V_{loc2}(q) = B(q) + V_{f1}(q) + V_{ort}(q), \quad (4)$$

где  $V_{f1}(q)$ ,  $V_{f2}(q)$  — потенциалы экранирующего функционала от соответственно первой и второй степеней нелокальной части псевдопотенциала [6]:

$$V_{f1}(q) = V'_{ee}(q) \times \Pi[F(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E)], \\ V_{f2}(q) = V'_{ee}(q) \times \Pi[F^2(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E)]. \quad (5)$$

Экранирующий функционал  $\Pi[...]$  для простых металлов [6] представляет собой сумму в  $\mathbf{k}$ -пространстве по  $\mathbf{k}$  в области  $|\mathbf{k}| < k_f$ , которую можно преобразовать в интеграл вида

$$\Pi[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)] = 2 \sum_{k < k_f} \frac{2F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E_k)}{k^2 - k'^2} = \\ = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \int_{k < k_f} \frac{2F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E_k)}{k^2 - k'^2} dk, \quad (6)$$

где  $E_k = k^2/2$  в ат. ед.

Аналитические выражения для  $B(q)$  и  $F(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E_k)$  приведены в Приложении. При численных расчетах интегралов (6) возникают проблемы, связанные с особенностью подынтегральной функции при  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ . Представим интеграл (6) 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 (пределы интегрирования и интегралы от нелокальной части потенциала приведены ниже):

$$\Pi[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)] = \Pi_A[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)] + \Pi_B[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)], \quad (7)$$

где

$$\Pi_A[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)] = \frac{\Omega}{\pi^2} \int_{k_a}^{k_f} dk \int_{-1}^{t_b} \frac{2F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E_k)}{k^2 - k'^2} dt, \quad (8)$$

$$k'^2 = q^2 + k^2 - 2qkt, \quad P_0(\cos \Theta) = 1,$$

$$P_1(\cos \Theta) = \cos(\theta), \quad P_2(\cos \Theta) = 0.5(3 \cos^2(\theta) - 1),$$

$$\cos(\theta) = \frac{k'^2 + k^2 - q^2}{2kk'}, \quad k_a = \begin{cases} 0 & \text{при } q \geq k_f, \\ k_f - q & \text{при } q < k_f, \end{cases}$$

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

$$\Pi_B[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)] =$$

$$= \frac{\Omega}{\pi^2} \int_{k_a}^{k_f} dk \int_{t_a}^{t_b} \frac{2(F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E_k) - F(\mathbf{k}', \mathbf{k}; E_{k'}))}{k^2 - k'^2} dt. \quad (9)$$

Здесь

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

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

Точность полученных результатов численного интегрирования следует контролировать с помощью предельных соотношений [6]

$$\lim_{q \rightarrow 0} \Pi_A[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)] = -\frac{3ZF(k_f, k_f; E_{k_f})}{k_f^2},$$

$$\lim_{q \rightarrow 0} \Pi_B[F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E)] = -Z_{\text{дп1}},$$

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

В полной нелокальной теории псевдопотенциалов формфактор экранированного иона простого металла при  $|\mathbf{k}| = k_f$  в наших обозначениях имеет вид [7]

$$V^{\text{scr}}(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_f + \mathbf{q}; E_f) = F(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_f + \mathbf{q}; E_f) + \frac{V_{\text{loc2}}(q)}{\varepsilon(q)}. \quad (10)$$

Обычно для сравнения различных моделей псевдопотенциалов [7, 8] используют формфактор экра-

нированного иона при «рассеянии назад». При «рассеянии назад» нелокальная часть формфактора потенциала рассчитывается как

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

На рис. 1 и 2 приведены зависимости формфактора экранированного иона магния при «рассеянии назад» и нормированной характеристической функции. Из рис. 1 видно, что значения формфактора ГНМП при  $q < 2k_f$  несколько выше значений формфактора, рассчитанного на основе оптимизированного модельного потенциала (ОМП) типа Хейне–Абаренкова [9]. При  $q > 2k_f$  формфактор ОМП имеет осциллирующий характер (меняет знак) и с ростом  $q$  стремится к нулю. Формфактор ГНМП, в отличие от формфактора ОМП, плавно убывает при  $q > 2k_f$ , стремясь к нулю с ростом  $q$ .

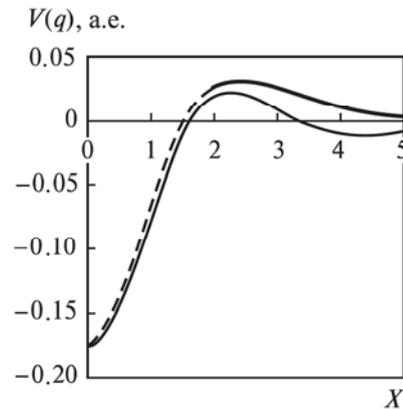


Рис. 1. Зависимости формфактора ГНМП магния («рассеяние назад»), полученного из оптимизированного потенциала типа Хейне–Абаренкова [9], — сплошная кривая и с помощью ГНМП в настоящей работе с параметрами из табл. 1 — пунктирная кривая ( $x = q/k_f$ )

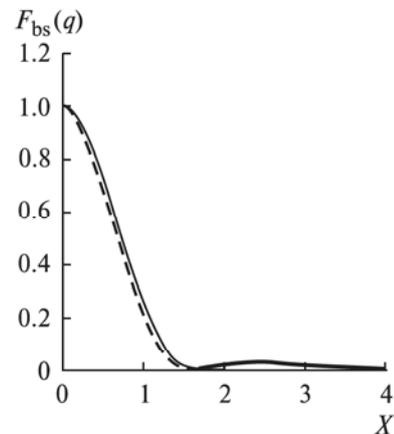


Рис. 2. Зависимости нормированной характеристической функции магния, полученной из ОМП, — сплошная кривая [10] и с помощью ГНМП в настоящей работе с параметрами из табл. 1 — пунктирная кривая ( $x = q/k_f$ )

Таблица 1

Параметры ГНМП потенциала Mg (все в ат. ед.)

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

Такое различие формфакторов, рассчитанных в двух моделях, объясняется негладким характером зависимости нелокальной части ОМП иона от  $r$  в прямом пространстве и как следствие появлением «нефизических осцилляций». Формфактор ГНМП плавно убывает и стремится к нулю при  $q \rightarrow 0$ , не изменяя знака, что объясняется гладким характером ГНМП иона в прямом пространстве. Из рис. 2 видно, что значения нормированной характеристической функции магния ОМП при  $q/2k_f < 1.6$  несколько выше ее значений, полученных с ГНМП в настоящей работе. При  $q/2k_f > 1.6$  ситуация меняется на противоположную. Это объясняется разницей в значениях формфакторов, полученных в различных моделях (рис. 1), которая в свою очередь обусловлена отсутствием нефизических осцилляций у формфактора ГНМП. Любопытно отметить, что в квазилокальном приближении характеристическая функция ОМП ведет себя аналогично характеристической функции ГНМП [10]. Возможно, успешное применение квазилокального приближения при расчете атомных свойств металлов объясняется нивелированием нефизических осцилляций формфактора «негладких» псевдопотенциалов при получении характеристических функций, которые используются для расчета атомных свойств металлов.

Расчет закона дисперсии фононов в магнии в трех направлениях высокой симметрии был проведен с параметрами ГНМП, приведенными в табл. 1. Использовалось выражение (1) для характеристиче-

ской функции в рамках полной нелокальной теории ГНМП, подробное описание расчетов приведено в Приложении. Результаты теоретических расчетов приведены на рис. 3.

Динамическая матрица ГПУ магния, нормированная на плазменную частоту, рассчитывалась по формулам (7). Выбранная нами система координат и нормировка позволили построить действительную симметрическую нормированную динамическую матрицу  $\hat{D}(\mathbf{q})$  размерности  $6 \times 6$ , собственные значения которой дают квадраты частот колебаний решетки, нормированные на плазменную частоту с учетом эффективного заряда иона:

$$D_{ij}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{G}} \frac{(\mathbf{G} + \mathbf{q})_i (\mathbf{G} + \mathbf{q})_j}{(\mathbf{G} + \mathbf{q})^2} F_0(|\mathbf{G} + \mathbf{q}|) - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{G}}^* \frac{(\mathbf{G})_i (\mathbf{G})_j}{(\mathbf{G})^2} F_0(|\mathbf{G}|) - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{G}}^* \frac{(\mathbf{G})_i (\mathbf{G})_j}{(\mathbf{G})^2} F_0(|\mathbf{G}|) \cos(2\pi(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_2)),$$

$$D_{i+3,j}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{G}} \frac{(\mathbf{G} + \mathbf{q})_i (\mathbf{G} + \mathbf{q})_j}{(\mathbf{G} + \mathbf{q})^2} F_0(|\mathbf{G} + \mathbf{q}|) \times \cos(2\pi(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_2)),$$

$$D_{ij}(\mathbf{q}) = D_{i+3,j+3}(\mathbf{q}), \quad D_{i,j+3}(\mathbf{q}) = D_{i+3,j}(\mathbf{q}). \quad (11)$$

Звездочка над знаком суммы означает, что слагаемое с  $\mathbf{G} = 0$  следует опустить,  $\mathbf{G}$  — векторы обратной решетки,  $i$  и  $j$  — индексы осей де-

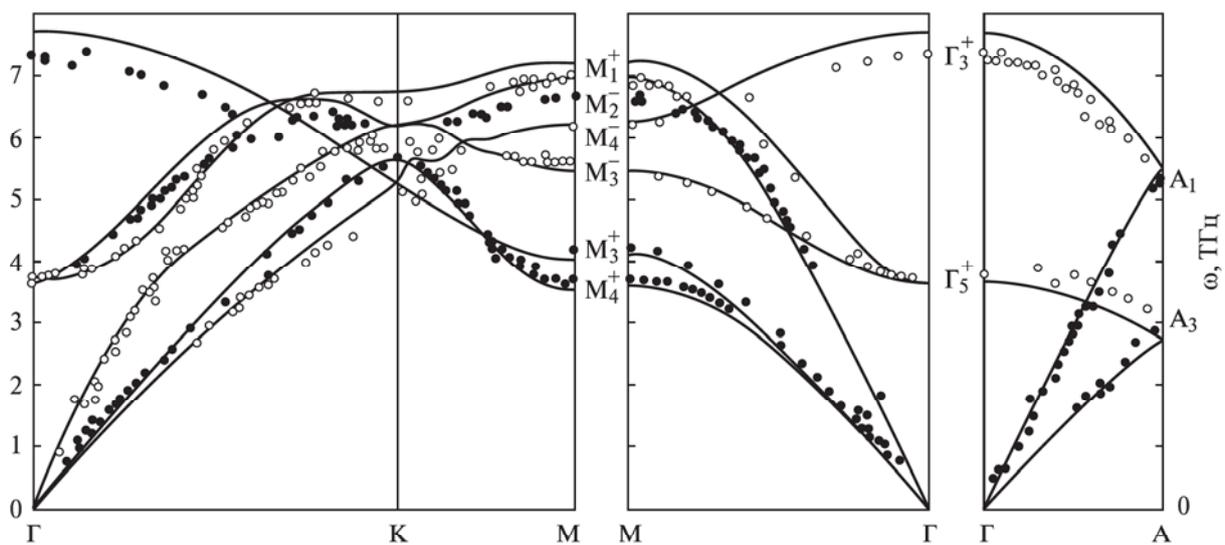


Рис. 3. Полученные в настоящей работе с ГНМП дисперсионные кривые для фононов в магнии (сплошные кривые). Точки — экспериментальные данные [11]. По оси  $y$  отложена частота в  $10^{12}$  Гц, по оси  $x$  — проекции безразмерного волнового вектора фонона в направлениях высокой симметрии

картовой системы координат, координаты первого атома в ячейке равны нулю:  $\mathbf{r}_1 = (0, 0, 0)$ ;  $\mathbf{r}_2$  — радиус-вектор второго атома в ячейке ГПУ магния:  $\mathbf{r}_2 = \left(\frac{2}{3}\mathbf{a}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{a}_2 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_3\right)$ ,  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  — векторы трансляции в прямом пространстве:  $\mathbf{a}_1 = -\frac{1}{2}a\mathbf{e}_x + \frac{\sqrt{3}}{2}a\mathbf{e}_y$ ,  $\mathbf{a}_2 = a\mathbf{e}_x$ ,  $\mathbf{a}_3 = c\mathbf{e}_z$ . Тогда векторы трансляции в обратном пространстве  $\mathbf{b}_1 = \frac{1}{a}\left(\mathbf{e}_x + \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{e}_y\right)$ ,  $\mathbf{b}_2 = \frac{1}{a}\left(\mathbf{e}_x - \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{e}_y\right)$ ,  $\mathbf{b}_3 = \frac{1}{c}\mathbf{e}_z$ , а векторы обратной решетки  $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$ , где  $h, k, l$  — индексы векторов ГПУ решетки в обратном пространстве. В данной системе координат скалярные произведения векторов обратной решетки на векторы атомов в элементарной ячейке равны:  $(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_1) = 0$ ,  $(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_2) = \frac{1}{2}\left(l + \frac{2}{3}(h - k)\right)$ .

В (11)  $F_0(q) = F_{bs}(q) + F_{es}(q)$ , где  $F_{es}(q)$  — нормированная на единицу электростатическая функция Эвальда [7]:  $F_{es}(q) = \exp\left(-\frac{q}{k_f\eta}\right)$ . Параметр  $\eta$  подбирается таким образом, чтобы сходился ряд суммирования по  $\mathbf{G}$  в (11) при замене  $F_0(q)$  на  $F_{es}(q)$ . Расчеты проводились при  $\eta = 2.8$ . Результаты расчетов приведены на рис. 3. Видно, что теоретически рассчитанные кривые дисперсии фононов в магнии достаточно хорошо согласуются с экспериментом. Некоторые несоответствия можно объяснить температурным влиянием на фононы, которое не учитывается при расчетах, а также приближенным характером учета обменно-корреляционных эффектов в электронном газе металла. В табл. 2 приведены значения частот фононов в точках высокой симметрии, рассчитанные в приближении ОМП [10] и ГНМП. Там же приведены экспериментальные данные по рассеянию нейтронов на колебаниях решетки магния [11]. Видно, что модель ГНМП дает результаты более близкие к эксперименту,

Таблица 2

**Частоты фононов в магнии в  $\Gamma$ -,  $M$ - и  $A$ -точках симметрии, рассчитанные в двух моделях (ОМП и ГНМП), и экспериментальные данные**

Точки симметрии	$\omega$ (ОМП-модель), ТГц	$\omega$ (ГНМП-модель), ТГц	$\omega$ (эксперимент), ТГц [11]
$\Gamma_5^+$	3.78	3.66	3.70
$\Gamma_3^+$	8.10	7.79	7.30
$M_1^+$	7.63	7.34	6.88
$M_2^-$	7.28	7.06	6.58
$M_4^+$	3.73	3.65	3.70
$M_3^-$	5.66	5.56	5.45
$M_3^+$	4.26	4.06	4.15
$M_4^-$	6.52	6.32	6.12
$A_3$	2.78	2.76	2.94
$A_1$	5.73	5.58	5.20

чем модель ОМП. Полученные результаты говорят о перспективности использования предложенной модели ГНМП для анализа атомных свойств простых металлов.

### Приложение

Формфактор ГНМП незранированного иона представляется в виде суммы локальной и нелокальной частей потенциала:

$$V^{\text{ion}}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E_k) = B(q) + F(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E_k). \quad (\text{П1})$$

Разбивая локальную часть потенциала  $B(q)$  на сумму двух членов: одного, имеющего аналитический вид, и другого в виде интеграла, берущегося лишь численно, представляем ее в виде суммы

$$B(q) = \frac{4\pi Z}{\Omega q^2} [-B_1(q) + B_2(q)], \quad (\text{П2})$$

где

$$B_1(q) = 1 + C \frac{\pi R_m}{2^{12} 11!} X^2 f^{-1}(X), \quad B_2 = X \int_0^\infty \frac{\sin t}{(1+t^2)^{12}} dt, \\ X = qR_m,$$

$f^{-1}(X)$  — многочлен 10-го порядка, умноженный на  $e^{-X}$  (он будет определен ниже).

С учетом выражения

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

нелокальную часть формфактора ГНМП  $F(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E_k)$  разбиваем на сумму двух частей — энергонезависящей и энергозависящей:

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E_k) = F_0(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) + F_1(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E_k), \quad (\text{П3})$$

где

$$F_0(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) = \\ = -\frac{4\pi R_m^3}{\Omega} \sum_{l=0}^2 [2l+1] [A_l(E_F) - C] D_l(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) P_l(\cos \Theta);$$

$$F_1(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; E_k) = -\frac{4\pi R_m^3}{\Omega} \sum_{l=0}^2 [2l+1] \left[ \left. \frac{d(A_l(E))}{dE} \right|_{E=E_F} \right] \times \\ \times (E_k - E_F) D_l(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) P_l(\cos \Theta),$$

$\Theta$  — угол между векторами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ ;  $E_F$  — энергия электрона на уровне Ферми, отсчитанная от дна зоны проводимости металла [2]. Вводя обозначения  $b = |\mathbf{k} + \mathbf{q}| \cdot R_m$ ,  $a = |\mathbf{k}| \cdot R_m$ ,  $R = b - a$ ,  $S = b + a$ , приходим к следующим интегралам, которые берутся аналитически:

$$D_l(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) = \frac{1}{ab} \int_0^\infty \left[ \frac{j_l(at) j_l(bt)}{(1+t^2)^{12}} \right] t^2 dt. \quad (\text{П4})$$

Здесь  $j_l(x)$  — сферические функции Бесселя  $l$ -го порядка

$$D_0(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) = \frac{1}{2ab} (f^0(R) - f^0(S)) \frac{\pi}{2^{12} 11!},$$

$$D_1(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) = \frac{1}{2(ab)^2} \times$$

$$\times \left[ (f^1(S) + abf^0(S)) - (f^1(R) + abf^0(R)) \right] \frac{\pi}{2^{12} 11!},$$

$$D_2(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) = \frac{-3}{2(ab)^3} \times$$

$$\times \left[ (f^2(S) + abf^1(S)) - (f^2(R) - abf^1(R)) \right] \frac{\pi}{2^{12} 11!} +$$

$$+ D_0(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}),$$

где  $f^{-1}(X), f^0(X), f^1(X), f^2(X)$  — многочлены соответственно порядка 10, 11, 12, 13, умноженные на  $e^{-X}$ , которые можно вычислить по формулам

$$f^0(X) = \sum_{j=0}^{11} \frac{X^{11-j}}{2^j} C_{11}^j \frac{(11+j)!}{(11-1)!} e^{-X},$$

$$f^{-1}(X) = \sum_{j=0}^{10} \frac{X^{10-j}}{2^j} C_{11}^j \frac{(10+j)!}{(10-1)!} e^{-X},$$

$$f^1(X) = \sum_{j=0}^{12} \frac{X^{12-j}}{2^j} C_{11}^j \frac{(12+j)!}{(12-1)!} e^{-X},$$

$$f^2(X) = \sum_{j=0}^{13} \frac{X^{13-j}}{2^j} C_{11}^j \frac{(13+j)!}{(13-1)!} e^{-X}.$$

В явном виде  $f^{-1}(X), f^0(X), f^1(X), f^2(X)$  вычисляются по формулам

$$f^0(X) = e^{-X} (x^{11} + 66x^{10} + 2145x^9 + 45045x^8 + 675675x^7 +$$

$$+ 7567560x^6 + 64324260x^5 + 413513100x^4 +$$

$$+ 1964187225x^3 + 6547290750x^2 + 13749310575x +$$

$$+ 13749310575),$$

$$f^1(X) = e^{-X} (x^{12} + 78x^{11} + 3003x^{10} + 75075x^9 +$$

$$+ 1351350x^8 + 18378360x^7 + 192972780x^6 +$$

$$+ 1571349780x^5 + 9820936125x^4 + 45831035250x^3 +$$

$$+ 151242416325x^2 + 316234143225x + 316234143225),$$

$$f^2(X) = e^{-X} (x^{13} + 91x^{12} + 4095x^{11} + 120120x^{10} +$$

$$+ 2552550x^9 + 41351310x^8 + 523783260x^7 +$$

$$+ 5237832600x^6 + 41247931725x^5 + 252070693875x^4 +$$

$$+ 1159525191825x^3 + 3794809718700x^2 +$$

$$+ 7905853580625x + 7905853580625).$$

Подставив (П2) в (2), (4), (П3) в (5) и интегрируя в соответствии с (7)–(9), мы получаем значения формфактора экранированного иона (10) и характеристическую функцию ГНМП (1).

### Литература

1. Крисько О.В., Силонов В.М., Скоробогатова Т.В., Бокарев В.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 В.П. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2006. № 5. С. 53 (Moscow University Phys. Bull. 2006. N 5. P. 56).
3. Крисько О.В., Силонов В.М., Скоробогатова Т.В., Бокарев В.П. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2007. № 2. С. 30.
4. Dagens L. // J. Phys. F: Metal Phys. 1977. 7. P. 1167.
5. Show R.W. Jr. // J. Phys. C. 1970. 3. P. 1140.
6. Силонов В.М. Введение в микроскопическую теорию твердых растворов. М., 2005.
7. Хейне В., Козн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала. М., 1973.
8. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. М., 1968.
9. Shaw R.W. // Phys. Rev. 1968. 174, N 3. P. 769.
10. Shaw R.W., Pynn R. // J. Phys. C. Ser. 2. 1969. 2. P. 2071.
11. Pynn R., Squires G.L. Neutron Inelastic Scattering. 1. Vienna, 1968.

Поступила в редакцию  
10.10.06