ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 2, № 3 (1998) с. 346–356

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 2, No. 3 (1998) p. 346–356

УРАХУВАННЯ СПІН–ОРБІТАЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ ДЛЯ РОЗРАХУНКУ ФОРМФАКТОРІВ НЕЛОКАЛЬНОГО МОДЕЛЬНОГО ПОТЕНЦІЯЛУ

В. В. Фурман[1,4], П. М. Якібчук[1], С. О. Вакарчук[2], М. І. Жовтанецький[3]

[1] *Львівський державний університет імені Івана Франка, кафедра теоретичної фізики, вул. Драгоманова, 12, Львів, 290005, Україна*

[2] *Державний університет "Львівська Політехніка", кафедра фізики, вул. С. Бандери, 12, Львів, 290646, Україна*

[3] *Львівський державний університет імені Івана Франка, кафедра інформаційних систем в менеджменті, просп. Свободи, 18, Львів, 290000, Україна*

[4] *E-mail: fourman@KTF.Franko.lviv.ua*

(Отримано 29 листопада 1996 р.; в остаточному вигляді — 15 грудня 1997 р.)

На підставі формалізму методу фазових функцій та теорії розсіяння визначено структуру формфакторів модельного потенціялу (МП), що враховують спін–орбітальну взаємодію. Знайдено співвідношення між змінами енергії рівня та параметрів МП. Отримано зв'язок між величиною квантового дефекту та фазою розсіяння на кулонівських функціях. На підставі побудованого МП розраховано сталу спін–орбітальної взаємодії, повну енергію зв'язку і рівноважні атомні радіуси рідкісноземельних металів. Отримані результати можна легко поширити на інші типи модельних псевдопотенціялів, параметри яких визначаються з розв'язку рівняння Шредингера.

Ключові слова: спін–орбітальна взаємодія, формфактор модельного потенціялу, кулонівські функції, квантовий дефект, фазові функції

PACS number(s): 71.10.+x, 34.80.Kw, 61.14.Dc

ВСТУП

Кількісні розрахунки властивостей важких перехідних та рідкісноземельних металів, що проводяться з використанням методу МП, наштовхуються на необхідність урахування релятивістичних ефектів і найперше спін–орбітальної взаємодії. Урахуванню спін–орбітальної взаємодії в електрон–йонному МП металів присвячено низку праць [1–3]. Насамперед слід назвати статті [2, 3], автори яких зображають повний електрон–йонний потенціял у вигляді суми засередненого за орбітальним квантовим числом псевдопотенціялу та потенціялу спін–орбітальної взаємодії. Урахування спін–орбітальної взаємодії при розрахунку формфакторів МП [4] потребує знаходження великої кількости параметрів МП, що створює значні труднощі під час дослідження властивостей металів. Наша мета — розвинути раціональну методику обчислення формфакторів МП з урахуванням спін–орбітальної взаємодії та подальшим їх використанням для розрахунку властивостей перехідних і рідкісноземельних металів (РЗМ).

I. НЕЛОКАЛЬНИЙ МОДЕЛЬНИЙ ПОТЕНЦІЯЛ ЗІ СПІН–ОРБІТАЛЬНОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ

Відомо [5], що врахування спін–орбітальної взаємодії обумовлює поправку $\Delta\varepsilon_{ls}$ до енергії ε_{nl} водневоподібного атома. Додаткова енергія, зумовлена цією взаємодією, дорівнює засередненому значенню потенціялу спін–орбітальної взаємодії за розподілом імовірности перебування електрона на відстані r від йонного залишку з квантовими числами n і l:

$$\Delta\varepsilon_{ls} = \langle V_{ls}\rangle = \langle \frac{z}{r^3} \rangle \left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2 \frac{2ls}{\hbar^2},$$

$$V_{ls}(r) = -\xi_{nl} \left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 \frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr},$$

де ξ_{nl} — стала спін–орбітальної взаємодії. У працях [1, 3, 6] показано, що повний псевдопотенціял електрон–йонної взаємодії можна зобразити у вигляді суми засередненого за спіновим числом s потенціялу $\mathcal{W}_l^{\text{пот}}(r)$ та потенціялу спін–орбітальної взаємодії $\mathcal{W}_l^{SO}(r)$:

$$\bar{\mathcal{W}}^{\text{йон}}(r) = \sum_{l=0}^{l_0} \left[\mathcal{W}_l^{\text{пот}}(r) + \mathcal{W}_l^{SO}(r)LS\right]\hat{P}_l, \qquad (1.1)$$

$$\mathcal{W}_l^{\text{пот}}(r) = \left\{\frac{(l+1)\mathcal{W}_l^{l+1/2}(r) + l\mathcal{W}_l^{l-1/2}(r)}{(2l+1)}\right\},$$

$$\mathcal{W}_l^{SO}(r) = 2\left\{\frac{\mathcal{W}_l^{l+1/2}(r) - \mathcal{W}_l^{l-1/2}(r)}{(2l+1)}\right\}.$$

Тут $\mathcal{W}_l^{l\pm 1/2}(r)$ — компонента МП, визначена для заданих l та $l \pm 1/2$:

$$\mathcal{W}_l^{l\pm 1/2}(r) = -\frac{z}{r} + w_l^{l\pm 1/2}(r, \{\mu_i^l\}_{i=1,N}), \qquad (1.2)$$

$w_l^{l\pm 1/2}(r, \{\mu_i^l\}_{i=1,N})$ — модельна функція, за допомогою якої апроксимується відштовхування валентного електрона від заповнених внутрішніх оболонок; $\{\mu_i^l\}_{i=1,N}$ — набір N параметрів МП, l_0 — максимальне значення орбітального квантового числа, для якого існують зв'язані стани в йонному залишку, $\hat{P}_l$ — проєкційний оператор. Потенціял $\mathcal{W}_l^{SO}(r)$ апроксимує спін–орбітальну взаємодію. Зазначимо, що різниця енергій рівнів $\varepsilon_{nlj} = \varepsilon_{nl} + \Delta\varepsilon_{nl}^j$ визначає розщеплення тонкої структури спектрів металів. У наближенні центрально–симетричного поля поправку до енергії стану, зумовлену спін–орбітальною взаємодією, можна визначити [5] так:

$$\Delta\varepsilon_{nl}^j = \frac{1}{2}\begin{cases} l\xi_{nl}, & j = l+1/2 \\ (l+1)\xi_{nl}, & j = l-1/2 \end{cases}, \qquad (1.3)$$

де

$$\xi_{nl} = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2}\int\limits_0^\infty r^2 R_{nl}^2(r)\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}dr \qquad (1.4)$$

— стала спін–орбітальної взаємодії. Відомо [5], що $\Delta\varepsilon_{nl}^j$ пропорційна до квадрата сталої тонкої структури, яка сама по собі є малою величиною. Отже, спін–орбітальну взаємодію можна розглядати як збурення відносно усередненого псевдопотенціялу. Тому

$$\mathcal{W}_l^{(l\pm 1/2)}(r) = \left\{\mathcal{W}_l^{(0)}(r) + \Delta\mathcal{W}_l^{(l\pm 1/2)}(r)\right\} \qquad (1.5)$$
$$\approx \mathcal{W}_l^{(0)}(r) + \Delta w_l^{(l\pm 1/2)}\left(r, \left\{\mu_l^{(l\pm 1/2)}\right\}\right),$$

де $\mathcal{W}_l^{(0)}(r)$ — l–компонента МП без урахування спін–орбітальної взаємодії:

$$\mathcal{W}_l^{(0)}(r) = -\frac{z}{r} + w_l(r, \mu_l). \qquad (1.6)$$

Розвинемо $w_l^{(l\pm 1/2)}\left(r, \left\{\mu_l \pm \Delta\mu_l^{(l\pm 1/2)}\right\}\right)$ у ряд Тейлора, вважаючи, що мала зміна енергії спектроскопічного терма

$$-\left|\varepsilon_{nl}^{(l\pm 1/2)}\right| = -|\varepsilon_{nl}| + \Delta\varepsilon_{nl}^{(l\pm 1/2)} \qquad (1.7)$$

приведе до незначної зміни некулонівської частини МП, яка, відповідно, зумовить малі відхилення параметрів МП $\pm\Delta\mu_l^{(l\pm 1/2)}$:

$$w_l^{(l\pm 1/2)}\left(r, \mu_l \pm \Delta\mu_l^{(l\pm 1/2)}\right) = w_l(r,\mu_l) + \Delta\mu_l^{(l\pm 1/2)}\frac{\partial}{\partial\mu_l}w_l(r,\mu_l) + (\Delta\mu_l^{(l\pm 1/2)})^2\frac{\partial^2}{2\partial\mu_l^2}w_l(r,\mu_l) + \cdots.$$

Величина ε_{nl}, що фігурує в (1.7), — значення енергії рівня, а $\Delta\varepsilon_{nl}^{(l\pm 1/2)}$ — зміщення енергії рівня, зумовлене спін–орбітальною взаємодією. Для l–ї компоненти МП

$$\mathcal{W}_l^{(l\pm 1/2)}(r) = \mathcal{W}_l^{(0)}(r) + \Delta\mu_l^{(l\pm 1/2)}\frac{\partial}{\partial\mu_l}w_l(r,\mu_l) + (\Delta\mu_l^{(l\pm 1/2)})^2\frac{\partial^2}{2\partial\mu_l^2}w_l(r,\mu_l) + \cdots. \qquad (1.8)$$

Обмежуючись першими двома членами розвинення, отримуємо:

$$\mathcal{W}_l^{\text{пот}}(r) = -\frac{z}{r} + w_l(r,\mu_l) + \left\{\frac{(l+1)\Delta\mu_l^{(l+1/2)} + l\Delta\mu_l^{(l-1/2)}}{(2l+1)}\right\}\frac{\partial}{\partial\mu_l}w_l(r,\mu_l), \qquad (1.9)$$

$$\mathcal{W}_l^{SO}(r) = \left\{\frac{\Delta\mu_l^{(l+1/2)} - \Delta\mu_l^{(l-1/2)}}{(2l+1)}\right\}\frac{\partial}{\partial\mu_l}w_l(r,\mu_l). \qquad (1.10)$$

Отже, для визначення потенціялу $\mathcal{W}_l^{pot}(r)$ та потенціялу спін–орбітальної взаємодії $\mathcal{W}_l^{SO}(r)$ необхідно відшукати величини $\Delta\mu_l^{(l\pm 1/2)}$, пов'язані зі зміною енергії спектроскопічного терма. Визначимо цей зв'язок.

II. АНАЛІЗ ВЗАЄМОЗВ'ЯЗКУ МІЖ ЗМІНОЮ ПАРАМЕТРІВ МП ТА ЗМІЩЕННЯМИ ЕНЕРҐЕТИЧНИХ РІВНІВ

Запропонований у [4] МП містить кулонівський потенціял притягання та деяку модельну некулонівську частину, що моделює відштовхування валентних електронів від внутрішніх оболонок йонного залишку. Викликає інтерес визначення внеску некулонівської частини МП у власне значення енергії ε_{nl} псевдойона, яке прирівнюється до експериментального значення відповідного спектроскопічного терма. Відомо [5, 7], що для чисто кулонівської взаємодії енергія рівня визначається формулою

$$\varepsilon_{nl} = -\frac{z^2}{2n^2}. \tag{2.1}$$

Розв'язками рівняння Шредингера з кулонівським потенціялом будуть кулонівські функції $\mathcal{F}_l(kr,\eta)$ та $\mathcal{G}_l(kr,\eta)$, що визначаються лінійною комбінацією функцій Вілера [8] $\mathcal{Y}_l(kr,\eta)$:

$$\mathcal{F}_l(kr,\eta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\mathcal{Y}_l(kr,\eta) + \mathcal{Y}_l^*(kr,\eta)\right),$$

$$\mathcal{G}_l(kr,\eta) = \frac{1}{i\sqrt{2\pi}}\left(\mathcal{Y}_l(kr,\eta) - \mathcal{Y}_l^*(kr,\eta)\right),$$

які відповідно пов'язані з виродженими гіпергеометричними функціями

$$\mathcal{Y}_l(kr,\eta) = ie^{-i\beta_l^0}e^{i(\pi/2)l}e^{-\eta(\pi/2)}F_{\eta,l+1/2}(2ikr). \tag{2.2}$$

Будь–яке відхилення взаємодії від кулонівської буде змінювати енергію рівня [10, 11]:

$$-|\varepsilon_{n\ell}| = -\frac{z^2}{2n^2} + \Delta\varepsilon_{n\ell}, \tag{2.3}$$

де $\Delta\varepsilon_{n\ell}$ — зміщення енерґетичного рівня, зумовлене наявністю некулонівської частини потенціялу. Енерґію рівня можна також записати у вигляді [12, 13]

$$-|\varepsilon_{n\ell}| = -\frac{z^2}{2(n+\sigma_{nl}^{(1)})^2}, \tag{2.4}$$

де $\sigma_{nl}^{(1)}$ — поправка квантового дефекту.

Поза йонним залишком МП збігається з кулонівським потенціялом. Тому при великих значеннях r розв'язок рівняння Шредингера для МП типу [4] має таку асимптотику:

$$\Psi_l(r)_{r\to\infty} = \alpha_l(k)\mathcal{F}_l(kr,\eta) + \mu_l(k)\mathcal{G}_l(kr,\eta). \tag{2.5}$$

Оскільки ε_{nl} є власне значення рівняння Шредингера, то для коефіцієнтів розкладу хвильової функції справедливе співвідношення [13, 14]

$$\frac{\mu_l(k)}{\alpha_l(k)} = (n+\sigma_{nl}^{(1)})^{2l+1}\frac{\Gamma(n+\sigma_{nl}^{(1)}-l)}{\Gamma(n+\sigma_{nl}^{(1)}+l+1)}\mathrm{tg}(\pi(n+\sigma_{nl}^{(1)})),$$

яке з урахованням властивості Γ–функції [9]

$$\Gamma(m+x) = \Gamma(x)x(x+1)...(x+m),$$

(m — ціле) можна переписати так

$$\frac{\mu_l(k)}{\alpha_l(k)} = \frac{(n+\sigma_{nl}^{(1)})^{2l+1}\mathrm{tg}(\pi\sigma_{nl}^{(1)})}{\prod\limits_{j=-l}^{l}\left\{n+\sigma_{nl}^{(1)}+j\right\}}. \tag{2.6}$$

Використаємо зображення хвильових функцій стаціонарних станів з енергією $\varepsilon_l = -|\varepsilon_{nl}|$ через вироджену гіпергеометричну функцію з цілими значеннями параметрів:

$$\Psi_{nl}(r) = e^{-kr}(2kr)^{n-1}F_2(-n+l+1, 2l+2, \frac{2r}{n}),$$

де функція

$$F_2(\tau,\lambda,x) = 1 + \frac{\tau\lambda}{1}x^{-1} + \frac{\tau(\tau+1)\lambda(\lambda+1)}{2}x^{-2} + \cdots$$

та визначимо зміщення енерґетичного рівня, зумовлене відхиленням електрон–йонного потенціялу від кулонівського. З точністю до множників $\Psi_{nl}(r)$ збігається з виразом, записаним через узагальнені поліноми Лаґера [5] $\Psi_{nl}(r) = Cr^{l+1}L_{n+l}^{2l+1}(r)$. Тому з урахуванням умови нормування хвильову функцію можна записати

$$\Psi_{nl}(r) = \frac{2}{n^{l+3}(2l+1)}\sqrt{\frac{(n+l)}{(n-l-1)}}(2r)^{l+1}e^{-r/n}$$

$$\times F_2(-n+l+1, 2l+2, \frac{2r}{n}).$$

Розглядаючи некулонівську частину МП $w_l(r)$ як збурення відносно кулонівського потенціялу, для зміщення енерґетичного рівня отримуємо [15]

$$\Delta\varepsilon_{nl} = T_{nl}^2$$

$$\times \int_0^\infty w_l(r) e^{-2r/n} r^{2l+2} F_2^2 \left(-n+l+1, 2l+2, \frac{2r}{n}\right) r dr,$$

$$T_{nl} = \frac{2^{l+1}}{(2l+1)} \left[\frac{1}{n^3}\left(1-\frac{1^2}{n^2}\right)\dots\left(1-\frac{l^2}{n^2}\right)\right]^{1/2}.$$

Використовуючи зображення виродженої гіпергеометричної функції через бесселівські функції [9, 10], зміщення енерґетичного рівня запишемо як

$$\Delta\varepsilon_{nl} = T_{nl} \int_0^\infty w_l(r) J^2_{2l+1}(\sqrt{8zr}) r dr, \tag{2.7}$$

де $J_{2l+1}(\sqrt{8zr})$ — функція Бесселя.

Зупинимось на іншому підході до цієї задачі, який ґрунтується на формалізмі методу фазових функцій [6, 16], і встановимо зв'язок між зміщенням енерґетичних рівнів та фазою розсіяння, зумовленою некулонівською частиною МП. При від'ємних значеннях енерґії ε_{nl}, що відповідають зв'язаним станам, розв'язок рівняння Шредінґера з $\mathcal{W}_l(r)$ є суперпозицією регулярного та нерегулярного його розв'язків для вільної частинки від уявного арґументу $i\mathbf{kr}$, якими є функції Ріккаті–Ганкеля $h_l^{(\pm)}(kr)$:

$$\Psi_l(k,r) = 2\pi i^l \left\{h_l^{(-)}(kr) + S_l(k) h_l^{(+)}(kr)\right\}, \tag{2.8}$$

де $S_l(k)$ — l–компонента матриці розсіяння. Для уявного арґументу замість функцій $h_l^{(\pm)}(kr)$ матимемо функції $i_l(kr)$ та $k_l(kr)$ [9]. Згідно з методом фазових функцій [16] рівняння Шредінґера для псевдохвильової функції $\Psi_l(r)$ зводиться до фазового рівняння з парціяльною складовою МП $\mathcal{W}_l(r)$ [6]:

$$\frac{d\delta_l(k,r)}{dr} = -\frac{2\mathcal{W}_l(r)}{k}(\cos\delta_l(k,r) i_l(kr) + \sin\delta_l(k,r) k_l(kr))^2 \tag{2.9}$$

та з початковою умовою $\delta_l(k,0) = 0$, а $k = \sqrt{2\varepsilon_l}$. Оскільки МП містить некулонівську частину, то псевдохвильову функцію $\Psi_l(r)$ можна записати у вигляді лінійної комбінації кулонівських функцій

$$\Psi_l(r) = A_l(r)(\cos\gamma_l(k,r) F_l(kr,\eta) + \sin\gamma_l(k,r) G_l(kr,\eta)).$$

Для похідної псевдохвильової функції будемо домагатися виконання умови [16]

$$\frac{d}{dr}\Psi_l(r) = A_l(r)(\cos\gamma_l(k,r)\frac{d}{dr}\mathcal{F}_l(kr,\eta) + \sin\gamma_l(k,r)\frac{d}{dr}\mathcal{G}_l(kr,\eta)).$$

Тоді з рівняння Шредінґера для $\Psi_l(r)$ отримуємо фазове рівняння з некулонівською частиною МП:

$$\frac{d}{dr}\mathrm{tg}\gamma_l(k,r) = -\frac{2w_l(r)}{k}(\mathcal{F}_l(kr,\eta) + \mathrm{tg}\gamma_l(k,r)\mathcal{G}_l(kr,\eta))^2 \tag{2.10}$$

та початковою умовою $\mathrm{tg}(\gamma_l(k,0)) = 0$. Для енерґій ε_{nl}, що відповідають дискретному спектрові, розв'язок рівняння Шредінґера з поведінки кулонівських функцій [9] має таку асимптотику:

$$\Psi_l^{(\pm)}(r) = \mathcal{G}_l(ikr,\eta) \pm i\mathcal{F}_l(ikr,\eta) \to \exp\left\{\pm i(kr - \eta\ln 2kr - \frac{l\pi}{2} + \beta_l^0)\right\}. \tag{2.11}$$

Фазову функцію $\delta_l(k,r)$, що є розв'язком рівняння (2.9), можна зобразити у вигляді суперпозиції фазової функції $\gamma_l(k,r)$, яка зумовлена дією некулонівської частини l–компоненти МП $\mathcal{W}_l(r)$ на псевдохвильову функцію $\Psi_l(r)$, та кулонівської фази β_l^0 для l–стану

$$\delta_l(k,r) = \gamma_l(k,r) + \beta_l^0 - \eta\ln 2kr. \tag{2.12}$$

Для всіх r парціяльну амплітуду розсіяння $f_l(k)$, яка відповідає l–компоненті МП $\mathcal{W}_l(r)$, можна зобразити у вигляді [16]

$$f_l(k) \to f_l(k,r) = \exp\{i\delta_l(k,r)\}\sin\delta_l(k,r).$$

Зауважимо, що полюси $f_l(k)$, які лежать на додатній уявній півосі $k_{nl} = ik_{nl}(k_{nl} > 0)$, відповідають енерґіям зв'язаних станів $2\varepsilon_{nl} = k_{nl}^2 = -k_{nl}^2$. Цим можна скористатись для визначення параметрів МП [6]. Оскільки функція $f_l(k,r)$ є комплексною, то з (2.9) отримуємо таке рівняння Ріккаті–Бесселя:

$$\frac{df_l(k,r)}{dr} = -\frac{2\mathcal{W}_l(r)}{k}(j_l(kr) + if_l(k,r)h_l^{(1)}(kr))^2,$$

де $h_l^{(1)}(kr)$ — функція Ріккаті–Ганкеля першого роду, яка відповідає розбіжній хвилі. Функцію $f_l(k,r)$ можна записати як суму кулонівської частини

$$f_l^{\text{кул}}(k,r) = \frac{i}{2k}\left(\exp(2i(kr - \eta\ln 2kr - \frac{l\pi}{2} + \beta_l^0)) - 1\right)$$

та некулонівської, що зумовлена відштовхувальною частиною МП:

$$\Phi_l^{\text{нек}}(k,r) = \frac{i\exp(2i(kr - \eta\ln 2kr - \frac{l\pi}{2} + \beta_l^0))}{2k}\left(\exp(2i\gamma_l(k,r)) - 1\right).$$

Для функції $f_l^{\text{нек}}(k,r)$, яка пов'язана з $\Phi_l^{\text{нек}}(k,r)$ співвідношенням

$$f_l^{\text{нек}}(k,r) = \left\{\Phi_l^{\text{нек}}(k,r)\exp(-2i(kr - \eta\ln 2kr - \frac{l\pi}{2} + \beta_l^0))\right\} = \frac{i}{2k}\left(\exp(2i\gamma_l(k,r)) - 1\right),$$

можна отримати рівняння

$$\frac{df_l^{\text{нек}}(k,r)}{dr} = -\frac{2w_l(r)}{k}(\mathcal{F}_l(ikr,\eta) - if_l^{\text{нек}}(k,r)\mathcal{G}_l(ikr,\eta))^2.$$

Воно підтверджує, що внесок некулонівської частини МП у парціяльну амплітуду розсіяння відбувається на фоні кулонівського потенціялу. Цей внесок буде суттєвим тільки при малих значеннях r, сумірних з розмірами йонного залишку, оскільки при $r \to \infty$ некулонівська частина МП значно швидше спадає до нуля, ніж кулонівський потенціял. Оскільки вираз для $f_l^{\text{нек}}(k,r)$ містить і кулонівську амплітуду, то відділити суто некулонівську частину парціяльної амплітуди не вдається [7, 8, 11] (на відміну від фази некулонівської частини МП, що є розв'язком (2.10)). Використовуючи модифікований метод Калоджеро, запишемо рівняння (2.9) і (2.10) у вигляді [16]

$$\frac{d\mathrm{tg}\gamma_l(k,r)}{dr} = -\frac{2w_l(r)}{k}\mathcal{F}_l^2(kr,\eta) + \frac{4w_l(r)}{k}\mathrm{tg}\gamma_l(k,r)\mathcal{F}_l(kr,\eta)\mathcal{G}_l(kr,\eta), \tag{2.13}$$

$$\frac{d\mathrm{tg}\delta_l(k,r)}{dr} = -\frac{2\mathcal{W}_l(r)}{k}i_l^2(kr) + \frac{4\mathcal{W}_l(r)}{k}\mathrm{tg}\delta_l(k,r)i_l(k,r)k_l(kr) \tag{2.14}$$

з такими асимптотичними розв'язками:

$$\mathrm{tg}\left\{\gamma_l(k,\infty)\right\} - \mathrm{tg}\left\{\gamma_l(k,r)\right\} \approx -\frac{2}{k}\int\limits_r^\infty w_l(r)\mathcal{F}_l^2(kr,\eta)dr, \tag{2.15}$$

$$\mathrm{tg}\left\{\delta_l(k,\infty)\right\} - \mathrm{tg}\left\{\delta_l(k,r)\right\} \approx -\frac{2}{k}\int\limits_r^\infty \mathcal{W}_l(r)i_l^2(kr)dr. \tag{2.16}$$

У борнівському наближенні граничне значення фазової функції, зумовленої некулонівською частиною МП, запишемо як

$$\mathrm{tg}\left\{\gamma_l(k,\infty)\right\} = -\frac{2}{k}\int\limits_0^\infty w_l(r)\mathcal{F}_l^2(kr,\eta)dr. \tag{2.17}$$

З іншого боку, ця величина дорівнює $\mu_l(k)/\alpha_l(k)$. Враховуючи (2.6), отримаємо

$$\mathrm{tg}\left\{\gamma_l(k,\infty)\right\} = \frac{\mu_l(k)}{\alpha_l(k)} = \frac{(n+\sigma_{nl}^{(1)})^{2l+1}\mathrm{tg}(\pi\sigma_{nl}^{(1)})}{\prod\limits_{j=-l}^{l}\left\{n+\sigma_{nl}^{(1)}+j\right\}}. \tag{2.18}$$

Отже, величини квантового дефекту можна записати через граничне значення фази розсіювання некулонівської частини МП у вигляді

$$\sigma_{nl}^{(1)} = \frac{1}{\pi}\mathrm{arctg}\left\{\mathrm{tg}\left\{\gamma_l(k,\infty)\right\}(2\varepsilon_{nl}/z)^{(2l+1)/2}\prod_{j=-l}^{l}\left\{(z/(2\varepsilon_{nl}))^{1/2}+j\right\}\right\}. \tag{2.19}$$

Використовуючи (2.3) та (2.19), матимемо такий вираз для зміщення енерґетичного рівня некулонівською частиною МП:

$$\Delta\varepsilon_{nl} = \frac{z^2}{n^2} - z^2\left\{1+\frac{1}{n\pi}\mathrm{arctg}\left\{\mathrm{tg}\left\{\gamma_l(k,\infty)\right\}(2\varepsilon_{nl}/z)^{(2l+1)/2}\prod_{j=-l}^{l}\left\{(z/(2\varepsilon_{nl}))^{1/2}+j\right\}\right\}\right\}^{-2}. \tag{2.20}$$

З формули (2.20) випливає, що зміщення енерґетичного рівня $\Delta\varepsilon_{n\ell}$ виражається через фазу розсіяння, зумовлену некулонівською частиною МП.

Для енерґії відповідного спектроскопічного терма ε_{nl} це зміщення може бути виражене через граничне значення фази розсіяння (2.15) чи (2.17), що отримується з рівняння (2.13).

Отже, для потенціялу $\mathcal{W}_l^{\text{пот}}(r)$ (1.7) та потенціялу спін–орбітальної взаємодії $\mathcal{W}_l^{SO}(r)$ (1.8) величини $\pm\Delta\mu_l^{(l\pm1/2)}$, які визначаються зміною енерґії спектроскопічного терма спін–орбітальною взаємодією, будуть впливати на граничне значення фази розсіяння (2.15) і квантового дефекту (2.19).

III. УРАХУВАННЯ СПІН–ОРБІТАЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ ДЛЯ РОЗРАХУНКІВ ФОРМФАКТОРА МП

Оскільки зміщення енерґетичного рівня $\Delta\varepsilon_{n\ell}$ відносно "кулонівського терма" виражається через фазу розсіяння, зумовлену некулонівською частиною МП, то величина $\Delta\varepsilon_{n\ell}$ буде залежати і від доданка, що описує спін–орбітальну взаємодію у некулонівській частині МП. Знайдемо зв'язок між величиною зміщення енерґетичного рівня, зумовленою спін–орбітальною взаємодією, та зміною параметрів МП. З рівняння Шредингера отримуємо фазове рівняння для випадку пружнього розсіяння [6, 8], аналогічне до (2.10),

$$\frac{d}{dr}\mathrm{tg}\gamma_{nl}^{(l\pm1/2)}(k,r) = -\frac{2w_l^{l\pm1/2}(r)}{k}(\mathcal{F}_l(kr,\eta)+\mathrm{tg}\gamma_{nl}^{(l\pm1/2)}(k,r)\mathcal{G}_l(kr,\eta))^2, \tag{3.1}$$

з початковою умовою $\mathrm{tg}(\gamma_{nl}^{(l\pm1/2)}(k,0))=0$. Використовуючи співвідношення (3.1) та (2.20), можна записати

$$\Delta\varepsilon_{nl}^{(0)} + \Delta\varepsilon_{nl}^{(l\pm1/2)} = \frac{z^2}{n^2}$$

$$-z^2\left\{1+\frac{1}{n\pi}\mathrm{arctg}\left\{\mathrm{tg}\left\{\gamma_{nl}^{(l\pm1/2)}(k,\infty)\right\}(2\varepsilon_{nl}^{(l\pm1/2)}/z)^{(2l+1)/2}\prod_{j=-l}^{l}\left\{(z/(2\varepsilon_{nl}^{(l\pm1/2)}))^{1/2}+j\right\}\right\}\right\}^{-2}.$$

Аналогічно, використовуючи (2.8), для величини $\Delta\varepsilon_{nl}^{(0)}+\Delta\varepsilon_{nl}^{(l\pm1/2)}$ як функції від $\Delta\mu_l^{(l+1/2)}$ отримуємо

$$\Delta\varepsilon_{nl}^{(0)} + \Delta\varepsilon_{nl}^{(l\pm1/2)} = T_{nl}\int_0^\infty\left[w_l(r,\mu_l)+\Delta\mu_l^{(l\pm1/2)}\frac{\partial}{\partial\mu_l}w_l(r,\mu_l)\right]J_{2l+1}^2(\sqrt{8zr})r\,dr.$$

Увівши позначення

$$D_{nl}(\mu_l) = T_{nl}\int_0^\infty\left[\frac{\partial}{\partial\mu_l}w_l(r,\mu_l)\right]J_{2l+1}^2(\sqrt{8zr})r\,dr,$$

запишемо співвідношення, що пов'язує між собою зміну параметрів МП та зміщення енерґетичного рівня, зумовлене спін–орбітальною взаємодією, у вигляді

$$\Delta\mu_l^{(l\pm1/2)} = \frac{\Delta\varepsilon_{nl}^{(l\pm1/2)}}{D_{nl}(\mu_l)}. \tag{3.2}$$

Тоді l–ну компоненту МП можна зобразити так:

$$\mathcal{W}_l^{\text{пот}}(r) = -\frac{z}{r} + w_l(r,\mu_l) + \left\{ \frac{(l+1)\left|\varepsilon_{nl}^{(l+1/2)}\right| + l\left|\varepsilon_{nl}^{(l-1/2)}\right|}{(2l+1)} - |\varepsilon_{nl}| \right\} \frac{1}{D_{nl}} \frac{\partial}{\partial \mu_l} w_l(r,\mu_l), \tag{3.3}$$

$$\mathcal{W}_l^{SO}(r) = \left\{ \frac{\left|\varepsilon_{nl}^{(l+1/2)}\right| - \left|\varepsilon_{nl}^{(l-1/2)}\right|}{(2l+1)} \right\} \frac{1}{D_{nl}} \frac{\partial}{\partial \mu_l} w_l(r,\mu_l). \tag{3.4}$$

Якщо введемо позначення

$$M_l^{(1)} = \left\{ \frac{(l+1)\left|\varepsilon_{nl}^{(l+1/2)}\right| + l\left|\varepsilon_{nl}^{(l-1/2)}\right|}{(2l+1)} - |\varepsilon_{nl}| \right\} \frac{1}{D_{nl}}, \quad M_l^{(2)} = \left\{ \frac{\left|\varepsilon_{nl}^{(l+1/2)}\right| - \left|\varepsilon_{nl}^{(l-1/2)}\right|}{(2l+1)} \right\} \frac{1}{D_{nl}}, \tag{3.5}$$

то кінцево отримаємо вирази для формфакторів МП з урахуванням спін–орбітальної взаємодії:

$$\langle k|\,\mathcal{W}^{\text{пот}}\,|k\rangle = \langle k|\,\mathcal{W}\,|k\rangle^{(0)} + \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) M_l^{(1)} \frac{\partial}{\partial \mu_l} \langle k|\,w_l\,|k\rangle P_l(\cos(\theta)), \tag{3.6}$$

$$\langle k|\,\mathcal{W}^{SO}\,|k\rangle = -\sum_{l=1}^{l_0} (2l+1) M_l^{(2)} \left[\frac{\partial}{\partial \mu_l} \langle k|\,w_l\,|k\rangle \right] \frac{\partial}{\partial \theta} P_l(\cos(\theta)). \tag{3.7}$$

Для ілюстрації запропонованого методу обчислимо параметри спін–орбітальної взаємодії $4f$–оболонок РЗМ. Згідно з [20], сталу спін–орбітальної взаємодії для $4f$–оболонки РЗМ задає вираз

$$\xi_{4f} = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2} \int_0^\infty \Psi_{4f}^2(r) \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} dr. \tag{3.8}$$

Враховуючи (3.4), для сталої спін–орбітальної взаємодії РЗМ отримуємо

$$\xi_{4f} = \frac{\hbar^2 M_3^{(2)}}{2m^2c^2} \int_0^\infty \Psi_{4f}^2(r) \frac{\partial}{\partial \mu_3} w_3(r,\mu_3) dr. \tag{3.9}$$

На підставі методу фазових функцій $\Psi_{4f}(r)$ можна записати у вигляді

$$\Psi_{4f}(r) = A_{4f}(k,r)$$
$$\times (j_3(kr)\cos(\delta_3(k,r)) - n_3(kr)\sin(\delta_3(k,r)) \tag{3.10}$$

з умовою нормування

$$C_{4f}^2 \int_0^\infty \Psi_{4f}^2(r) dr = 1.$$

Для визначення величин $A_{4f}(k,r)$ і $\delta_3(k,r)$, що фігурують у (3.10), та коефіцієнта C_{4f} запишемо систему фазових диференціяльних рівнянь, яку отримуємо з (2.9) для амплітудної фазової функції $4f$–стану:

$$\begin{cases} \dfrac{dA_{4f}(k,r)}{dr} = -\dfrac{2\mathcal{W}_3(r)}{C_{4f}k} (i_3(kr) + C_{4f} \times A_{4f}(k,r) k_3(kr))^2; \\ \dfrac{d\delta_3(k,r)}{dr} = -\dfrac{2\mathcal{W}_3(r)}{k} (\cos\delta_3(k,r) i_3(kr) - \sin\delta_3(k,r) k_3(kr))^2. \end{cases} \tag{3.11}$$

Зауважимо, що величини $A_{4f}(k,r)$, $\delta_3(k,r)$ з $k=\sqrt{|2E_{4f}|}$ задовольняють початкові умови: $A_{4f}(k,0)=1$; $\delta_3(k,0)=0$ для $4f$–компоненти МП. Важливою характеристикою спін–орбітальної взаємодії є інтеґрал

$$\langle r^{-3}\rangle_{SO} = \int\limits_0^\infty \frac{\Psi_{4f}^2(r)}{r^3}dr, \tag{3.12}$$

що пов'язаний зі сталою спін–орбітальної взаємодії

$$\xi_{4f} = \frac{\hbar^2 e^2 Z_{4f}^*}{2m^2c^2}\langle r^{-3}\rangle_{SO}, \tag{3.13}$$

яка дає змогу визначити ефективний заряд йонного залишку псевдоатома для $4f$–електронів. Визначимо зміщення $\Delta\varepsilon_{nl}$ енерґетичного рівня, зумовлене l–компонентою некулонівської частини нелокального МП [17]:

$$\mathcal{W}(r) = -\frac{z}{r} + \sum_{l=0}^{l_0}\left(A_l + \frac{z}{r}\right)\exp(-r/R_l). \tag{3.14}$$

Підставивши (3.14) у (2.20), для зміщення рівня отримуємо

$$\Delta\varepsilon_{nl}^{(0)} = \frac{T_{nl}e^{-x}}{8z}\left\{I_{2l+1}\left(x\right)\left(z + A_l\left(x\left(1-x\right)/2 - (2l+1)\right)\right) + xA_lR_lI_{2l}\left(x\right)\right\}, \tag{3.15}$$

де $I_\nu\left(x\right)$ — модифікована функція Бесселя–Кліфорда від уявного арґументу $x = 4zR_l$ [18]. Треба зазначити, що при великих значеннях x зміщення $\Delta\varepsilon_{nl}^{(0)}$ має таку асимптотичну поведінку [9]:

$$\Delta\varepsilon_{nl}^{(0)} = \frac{T_{nl}}{4}\sqrt{\frac{R_l}{2\pi z}}\left\{Q_l\left(x\right)\left(z + A_l\left(x\left(1-x\right)/2 - (2l+1)\right)\right) + xA_lR_lQ_l\left(x\right)\right\}, \tag{3.16}$$

а при малих

$$\Delta\varepsilon_{nl}^{(0)} = \frac{T_{nl}R_l\left(x/2\right)^{2l+1}e^{-x}}{\Gamma(2l)}\left\{\frac{1}{2(2l+1)}\left(z + A_l\left(x\left(1-x\right)/2 - (2l+1)\right)\right) + A_lR_l\right\}. \tag{3.17}$$

Для МП (3.14) фазове рівняння (2.6) запишемо

$$\frac{d}{dr}\mathrm{tg}\gamma_l(k,r) = -\frac{2e^{-r/R_l}}{k}\left(A_l + \frac{z}{r}\right)(\mathcal{F}_l(kr,\eta) + \mathrm{tg}\gamma_l(k,r)\mathcal{G}_l(kr,\eta))^2, \tag{3.18}$$

а його розв'язок, згідно з (2.20), буде визначати $\Delta\varepsilon_{nl}^{(0)}$. З урахуванням спін–орбітальної взаємодії рівняння (3.18) набуває вигляду

$$\frac{d}{dr}\mathrm{tg}\gamma_l^{(l\pm1/2)}(k,r) = -\frac{2}{k}\left\{w_l^{(0)}(r) + \Delta R_l^{(l\pm1/2)}\frac{\partial}{\partial R_l}w_l(r,R_l)\right\}(\mathcal{F}_l(kr,\eta) + \mathrm{tg}\gamma_l^{(l\pm1/2)}\mathcal{G}_l(kr,\eta))^2. \tag{3.19}$$

З рівняння (3.19) можна отримати значення квантового дефекту для заданого терма. Оскільки зміщення енерґетичного рівня (3.17) залежать від параметрів МП, то очевидно, що і квантовий дефект $\sigma_{nl}^{(1)}$, який зумовлює зміщення рівня, теж буде залежним від цих параметрів. Таким чином параметри МП, отримані з рівняння Шредінґера з власним значенням енерґії $E_l = -\left|\varepsilon_{nl}\right|$ [19], яке є полюсом парціяльної амплітуди розсіяння [6], враховують квантові дефекти. Виконані числові розрахунки (табл. 1) свідчать, що зміщення $\Delta\varepsilon_{nl}^{(0)}$ для йонів перехідних металів є близьким до значення другого доданка в (2.3). Для РЗМ при різних значеннях $j = l\pm1/2$ ця величина добре відтворюється залежністю

$$\Delta\varepsilon_{nl}^{(l\pm1/2)} = -\left|\varepsilon_{nl}^{(l\pm1/2)}\right| + \frac{z^2}{2n^2} - \Delta\varepsilon_{nl}^{(0)}.$$

Йон	Перехідні метали					
	$-\varepsilon_s$		$-\varepsilon_p$		$-\varepsilon_d$	
	$\sigma_{ns}^{(1)}$	$-\Delta\varepsilon_{ns}$	$\sigma_{np}^{(1)}$	$-\Delta\varepsilon_{np}$	$\sigma_{nd}^{(1)}$	$-\Delta\varepsilon_{nd}$
Fe^{+2}	1.190		0.839		1.173	
	-0.01567	0.1785	0.1793	-0.01547	-0.1479	0.1683
Ti^{+2}	1.003		0.734		0.995	
	-0.0023	0.0025	0.2937	-0.2473	0.0043	-0.0047
Ni^{+2}	1.258		0.865		1.335	
	-0.2093	0.2439	0.1479	-0.1296	-0.2564	0.2974
Pt^{+2}	1.321		0.896		1.365	
	-0.2487	0.3076	0.1097	-0.0995	-0.2793	0.3353
Pd^{+2}	1.21		0.834		1.429	
	-0.1718	0.1893	0.1873	-0.1647	-0.2987	0.3746
Y^{+3}	1.489		1.130		1.507	
	0.3987	-0.6745	-0.1725	0.1278	-0.5137	0.4875
Zr^{+4}	2.15		1.1751		2.500	
	-0.2659	0.3667	0.0221	-0.0249	-0.4631	0.6436
	Рідкісноземельні метали					
	$-\varepsilon_p$		$-\varepsilon_d$		$-\varepsilon_f$	
	$\sigma_{np}^{(1)}$	$-\Delta\varepsilon_{np}$	$\sigma_{nd}^{(1)}$	$-\Delta\varepsilon_{nd}$	$\sigma_{nf}^{(1)}$	$-\Delta\varepsilon_{nf}$
Pr^{+3}	1.0599		1.0388		1.5901	
	-0.0873	0.0587	-0.0561	0.0379	0.3701	-0.6391
$l+1/2$	-0.0871	0.0571	-0.0553	0.0367	0.3669	-0.6278
$l-1/2$	-0.0879	0.0597	-0.0582	0.0386	0.3829	-0.6422
Gd^{+3}	1.1249		1.4318		1.5171	
	-0.1689	0.1203	-0.4901	0.3908	0.4273	-0.6485
$l+1/2$	-0.1675	0.1174	-0.4871	.3874	0.4192	-0.6476
$l-1/2$	-0.1711	0.1217	-0.4932	0.4001	0.4297	-0.6493
Yb^{+3}	1.1845		1.5379		1.8423	
	-0.2376	0.1797	0.3987	-0.6738	0.2015	-0.3947
$l+1/2$	-0.2351	0.1756	0.3902	-0.6706	0.1983	-0.3928
$l-1/2$	-0.2393	0.1801	0.4011	-0.6793	0.2038	-0.4013

Таблиця 1. Величина квантового дефекту і зміщення енерґетичного рівня відносно кулонівського терма (значення енерґій в (Ry)) для йонів перехідних металів та РЗМ.

Отже, урахування зміщення енерґетичного рівня $\Delta\varepsilon_{nl}$, зумовленого квантовим дефектом $\sigma_{nl}^{(1)}$, дає змогу, як зазначалось у [14], точніше визначити параметри МП з рівняння Шредінґера.

Для йонів РЗМ хвильову функцію $\Psi_{4f}(r)$, обчислену за формулою (3.10), порівнювали з розрахунком, за яким використовували апроксимацію [20]

$$\Psi_{4f}(r) = r^4 \sum_{i=1}^{6} c_i \exp(-\alpha_i r). \tag{3.20}$$

Крім того, урахування поправок квантових дефектів дає змогу оцінити внесок спін–орбітальної взаємодії у формфактори МП, що задаються формулами (3.6) і (3.7), і визначити сталу спін–орбітальної взаємодії та радіяльні інтеґрали для $4f$–оболонок РЗМ.

Результати обчислень сталої спін–орбітальної взаємодії ξ_{4f} за формулою (3.9) та радіяльного інтеґрала $\langle r^{-3}\rangle_{SO}$ (формула (3.12)) з використанням МП (3.14) для йонів РЗМ ($z = 3$) наведені в табл. 2.

Як видно з табл. 2, отримані значення параметрів спін–орбітальної взаємодії ліпше узгоджуються з експериментальними даними, ніж результати розрахунку за методом Гартрі–Фока [20]. Такий результат є закономірним, оскільки псевдохвильова функція (3.11) відповідає компоненті МП, а функція (3.20) знайдена екстраполяцією гартрі–фоківських розрахунів [20].

Визначені формфактори, які враховують спін–орбітальну взаємодію, також використовували для розрахунку повної енерґії зв'язку та рівноважних атомних радіусів РЗМ за методикою, описаною в [21, 22]. Результати розрахунків (див. табл. 3) добре узгоджуються з експериментальними даними [23].

Автори висловлюють щиру подяку професорам І. О. Вакарчукові і З. О. Гурському за цінні вказівки та постійний інтерес до цієї роботи.

Йон	Параметри МП				Стала спін–орбітальної взаємодії $\xi_{4f} \times 10^{-8}, a_0^{-3}$			Радіяльний інтеґрал $\langle r^{-3}\rangle_{SO}, a_0^{-3}$		
	R_0, A_0	R_1, A_1	R_2, A_2	R_3, A_3	$\Psi_{4f}(r)$ (3.11)	$\Psi_{4f}(r)$ [20]	Експеримент [20]	$\Psi_{4f}(r)$ (3.11)	$\Psi_{4f}(r)$ [20]	Експеримент [20]
La	0.945	0.928	0.833							
	3.816	3.889	4.571							
Ce	1.455	0.905	0.806	0.635	1387.5	1568.6	1209.5	3.78	3.66	
	2.368	3.991	4.727	6.091						
Pr	1.645	0.885	0.781	0.613	1547.4	1852.0	1417.4	4.72	4.26	5.06
	2.166	4.082	4.875	6.313						
Eu	0.838	0.818	0.715	0.505	2678.5		2494.6	6.92	6.70	7.28
	4.338	4.638	5.328	7.663						
Gd	0.825	0.805	0.703	0.493	3365.7		3061.5	7.89	7.35	7.43
	4.410	4.529	5.419	7.849						
Tb	0.817	0.825	0.690	0.486	3425.6		3212.7	8.31	8.03	8.53
	4.413	4.369	5.517	7.962						
Ho	0.795	0.769	0.667	0.465	4345.6		4018.2	9.62	9.50	9.91
	4.456	4.702	5.712	8.322						
Er	0.787	0.757	0.656	0.456	4875.12	5348.2	4611.2	10.43	10.32	10.60
	4.577	4.776	5.807	8.486						
Tm	0.777	0.805	0.645	0.447	4898.1	5178.0	4989.1	11.37	11.20	11.72
	4.636	4.462	5.906	8.657						
Yb	0.767	0.737	0.635	0.438	5744.6	6425.4	5442.7	12.31	12.18	12.50
	4.696	4.906	5.995	8.835						
Lu	0.757	0.728	0.626	0.428	6123.3			13.62		
	4.759	4.965	6.084	9.042						

Таблиця 2. Стала спін–орбітальної взаємодії ξ_{4f} та радіяльний інтеґрал $\langle r^{-3}\rangle_{SO}$ для $4f$–оболонок йонів РЗМ ($z = 3$).

Йон	Рівноважний атомний радіус (а.о.)		Енергія зв'язку (Ry/атом)	
	Розрахунок	Експеримент	Розрахунок	Експеримент
La	3.810	3.911	3.153	2.980
Ce	3.731	3.811	3.279	3.085
Pr	3.738	3.804	3.175	3.083
Eu	4.038	4.286	3.256	3.187
Gd	3.653	3.764	3.328	3.190
Tb	3.622	3.692	3.323	3.265
Ho	3.547	3.687	3.363	3.303
Er	3.541	3.668	3.389	3.324
Tm	3.472	3.647	3.373	3.352
Yb	3.523	3.760	3.333	3.356
Lu	3.472	3.622	3.372	3.380

Таблиця 3. Розрахунок повної енергії зв'язку та рівноважних атомних радіусів йонів РЗМ ($z = 3$).

[1] K. Laasonen, A. Pasquarello, R. Car, C. Lee, D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **47**, 10142 (1993).

[2] В. В. Немошкаленко, В. Ю. Мильман, В. Н. Антонов, Укр. физ. журн. **32**, 8, 1238 (1987).

[3] G. B. Bachelet, D. R. Hamman, M. Schlüter, Phys. Rev. B **26**, 4199 (1982).

[4] П. Н. Якибчук, С. А. Вакарчук, В. В. Фурман, И. И. Моторнюк, препринт ИТФ–87–132Р (1987).

[5] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика* (Наука, Москва, 1989).

[6] В. В. Фурман, П. М. Якібчук, Журн. фіз. досл., **1**, 134 (1996).

[7] P. R. Auvil, Phys. Rev. **168**, 1568 (1968).

[8] М. Гольдбергер, К. Ватсон, *Теория столкновений* (Мир, Москва, 1967).

[9] М. И. Абрамовиц, И. Стиган. *Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами* (Мир, Москва, 1979).

[10] H. Totsuji, J. Phys. Soc. Jpn. **31**, 584 (1971).
[11] R. T. Ling, Phys. Rev. A **50**, 435 (1994).
[12] J. M. Berg, J. E. Murphy, N. A. Harris, R. W.Field, Phys. Rev. A **48**, 3012 (1993).
[13] De Prunelle E., Phys. Rev. A **36**, 3015 (1987)
[14] A. O. E. Animalu, Phys. Rev. B **8**, 3542 (1973).
[15] А. М. Переломов, В. С. Попов, М. В. Терентьев, Журн. эксп. теор. физ. **51**, 601 (1966).
[16] В. В. Бабиков, *Метод фазовых функций в квантовой механике* (Наука, Москва, 1988).
[17] Я. И. Дутчак, П. Н. Якибчук, М. И. Жовтанецкий, препринт ИТФ–75–26Р (1975).
[18] А. П. Прудников, Ю. А. Бричков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды. Специальные функции* (Наука, Москва, 1983).
[19] Martin W. C., R. Zabulas, L. Hagan, *Atomic Energy Levels the Rare–Earth Elements* (Academy Press, Washington, 1978).
[20] К. Тейлор, М. Дарби, *Физика редкоземельних соединений* (Мир, Москва, 1974).
[21] М. И. Жовтанецкий, З. А. Гурский, Я. И. Дутчак, П. Н. Якибчук, Физ. мет. металлов. **51**, 1183 (1981).
[22] И. Р. Юхновский, З. А. Гурский, *Квантово–статистическая теория неупорядоченных систем* (Наукова думка, Киев, 1991).
[23] А. Р. Регель, В. М. Глазов, *Периодический закон и физические свойства електронных расплавов* (Наука, Москва, 1978).

TAKING INTO ACCOUNT OF SPIN–ORBIT COUPLING DURING CALCULATION OF FORMFACTORS OF NONLOCAL MODEL POTENTIAL

V. V. Fourman[1,4], P. M. Yakibchuk[1], S. O. Vakarchuk[2], M. I. Zhovtanetskiy[3]
[1] *The Ivan Franko State University of Lviv, Chair of Theoretical Physics, 12 Drahomanov Str., Lviv, UA–290005, Ukraine*
[2] *State University "Lvivs'ka Politekhnika", Chair of Physics, 12 S. Bandera Str., Lviv, UA–290646, Ukraine*
[3] *The Ivan Franko State University of Lviv, Chair of the Information System in Management, 18 Svobody Pr., Lviv, UA–290000, Ukraine*
[4] *E–mail: fourman@KTF.Franko.lviv.ua*

The scheme that takes into account spin–orbit coupling is determined for scattering processes with the potential. The criterions of construction of nonlocal model potentials for transition and rare–earth metals on the base of the phase functions formalism, that take into account effects of spin–orbit coupling have been developed. For bound states energies, with the help of the phase functions method the criterion for finding the changes of parameters of nonlocal model potentials because of spin–orbit coupling have been obtained. Taking into account an analyticity of scattering amplitude in the presence of potential the conditions that are imposed on its structure have been analysed. The behaviour of scattering shifts was analyzed taking into account spin–orbit coupling. Phase equation with Coulomb wave functions that contain potential with spin–orbit coupling is received judging the properties of partial scattering shifts for bound states. Asymptotic solutions were found for this equation. The phase equation for partial scattering shifts in terms of Coulomb functions with partial component of potential and asymptotics that are valid for arbitrary nonlocal model potentials are presented.

The expressions for calculating model potential formfactors of transition and rare–earth metals, considering spin–orbit coupling in potential have been received. They depend on quantum defects and spectroscopic energy shifts determined through solutions of phase equations in terms of Coulomb functions.

Using obtained nonlocal model potential of $4f$–metals and its formfactors the cohesive energy and equilibrium atomic radii have been calculated. For $4f$–metals the constant of spin–orbit coupling has been calculated too. The results of calculations are in good agreement with experimental values.