

## Секція 1

# Теорія неупорядкованих систем

---

### ЕЛЕКТРОННІ ЯВИЩА ПЕРЕНОСУ В РІДКИХ ТА АМОРФНИХ МЕТАЛАХ

*Швець В.Т.*

*Одеська державна академія холоду, Одеса, Україна*

*E-mail: valtar@paco.net*

Дане повідомлення містить підсумок багаторічної діяльності автора по теоретичному дослідженню електронних явищ переносу у рідких та аморфних металах. Предметом дослідження є коефіцієнти електропровідності, електронного внеску у теплопровідність, термо-е.р.с. та стала Хола простих та перехідних металів. Останні розглядаються як у магнітовпорядкованій, так і магнітонеупорядкованій фазах. Прості метали розглядаються лише в рамках моделі майже вільних електронів. Для опису перехідних металів використовуються як модель майже вільних електронів - це стосується металів з відносно малим електроопором, так і модель майже зв'язаних електронів - це стосується металів з відносно великим електроопором. Розрахунки виконані у широкому діапазоні температур. Для низьких температур, характерних для аморфного стану металів, врахована динаміка іонної підсистеми та спінової іонної. Для температур, характерних для рідких металів, іонна підсистема вважається статичною. Для низьких температур досліджена також і роль електрон електронної взаємодії.

Вихідним пунктом побудови теорії електронних явищ переносу у неупорядкованих металах ми поклали теорію лінійної реакції Кубо та метод двочасових квантовомеханічних загаяних функцій Гріна. Останній, на нашу думку, є адекватним методом для побудови даної теорії. Кінетичні коефіцієнти, що визначають різні явища переносу безпосередньо виражаються саме через зазначені функції Гріна. Для знаходження загаяних функцій Гріна використані два методи: метод рівнянь руху і метод асимптотичного розвинення

Метод рівнянь руху, як більш простий, використаний для обчислення функцій Гріна, що безпосередньо визначають кінетичні коефіцієнти простих і перехідних рідких металів. У цьому разі динаміка

іонної підсистеми не враховувалась, остання вважалась статичною, а електрон-електронна взаємодія розглядалась в рамках дифракційної моделі металу, тобто через екранування електрон-іонної взаємодії. Модельний гамільтоніан електронної підсистеми простих металів містить енергію вільних електронів та потенціальну енергію їх взаємодії з іонами. Остання описується псевдопотенціалом електрон-іонної взаємодії. Модельний гамільтоніан для немагнітних перехідних металів, крім вже зазначеного потенціалу, містить потенціал гібридизації s- і d-станів електронів провідності (модель Мота). Псевдопотенціал і потенціал гібридизації вважаються малими параметрами теорії і за цими параметрами побудовані ряди теорії збурень для відповідних кінетичних коефіцієнтів. Поряд з добре вивченими членами другого порядку отримані і детально проаналізовані члени третього порядку. Вперше виконані чисельні розрахунки відносної величини поправки третього порядку для коефіцієнту електроопору більшості простих рідких металів. Вони виявились надзвичайно чутливими до форми використовуваних модельних псевдопотенціалів, особливо їх асимптотик. Сформульовані критерії щодо придатності модельних псевдопотенціалів до подібних розрахунків. Виявилось, що значно менш чутливими результати розрахунків є до типу апроксимації трьохчастинкового структурного фактора іонної підсистеми. Величина поправки третього порядку склала від декількох відсотків до декількох десятків відсотків від члену другого порядку, який є основним. Вперше обчислено і внесок членів третього порядку у температурний коефіцієнт електроопору простих рідких металів. Його врахування значно покращило узгодження між теоретичними і експериментальними даними. Для сталі Хола у квадратичному наближенні за псевдопотенціалом для компонент тензора електропровідності отриманий вираз, що збігається з результатом моделі вільних електронів. Перша незникаюча поправка, зумовлена псевдопотенціалом, вимагає розрахунків компонент тензора електропровідності з урахуванням членів четвертого порядку. Так само обчислення з точністю до членів четвертого порядку коефіцієнтів електропровідності і електронного внеску у теплопровідність необхідні і для пояснення незначних відхилень від закону Відемана-Франца. При врахуванні лише членів другого і третього порядків останній виконується ідеально. У цьому ж наближенні електронний внесок у коефіцієнт термо-е.р.с. визначається через коефіцієнт електропровідності. Аналогічна ситуація спостерігається і для рідких перехідних металів. Член третього порядку (другого порядку за потенціалом гібридизації і першого порядку за псевдопотенціалом) для електроопору перехідних рідких металів отриманий вперше. Те саме стосується і його чисельних розрахунків, які були виконані для більшості 3d-металів. Тут поправка третього порядку склала 10%-15% від величини члена другого порядку. Модельний гамільтоніан магнітних перехідних металів додатково містить потенціал

обмінної взаємодії s- і d-електронів, що описується відповідно до моделі Вонсовського як взаємодія спінів електронів провідності із спінами іонів. Магнітний внесок у коефіцієнт електроопору виявився пропорційним магнітній сприйнятливості іонної підсистеми і досить вагомим при чисельних розрахунках.

Однозонна модель перехідного металу не здатна пояснити додатний знак сталої Хола деяких металів, тому електроопір і стала Хола перехідних рідких металів також обчислені у двозонній моделі. Тут електронна підсистема металу складається з двох окремих підсистем, що відповідають s- і d-електронам, які мають квадратичні закони дисперсії і різні ефективні маси. При цьому взята до уваги і електрон-електронна взаємодія у кожній з підсистем і між ними.

Для аморфних металів, де динаміка іонної підсистеми при низьких температурах може відігравати суттєву роль, вже для знаходження часів релаксації, що описують відповідні кінетичні процеси, а не кінетичних коефіцієнтів, використаний метод асимптотичного розвинення. Відповідно до нього обернені часи релаксації можуть визначатись як через уявні частини певних загаяних функцій Гріна, так і через уявні частини пов'язаних з ними причинних функцій Гріна. Останні більш зручні для побудови рядів теорії збурень за додатними степенями малих параметрів теорії. У цьому разі також отримані і детально проаналізовані члени другого і третього порядків але вже з урахуванням динаміки іонної підсистеми, динаміки іонної спінової підсистеми та електрон-електронної взаємодії. Досліджена температурна залежність електроопору перехідних металів при низьких температурах.

Для перехідних неупорядкованих металів з відносно великим електроопором використана і модель майже зв'язаних електронів провідності. Останніми вважаються як s-, так і d-електрони. Єдиним малим параметром теорії вважається інтеграл перескоку. І в цьому разі адекватними проблемі виявились теорія лінійної реакції Кубо і метод загаяних двочасових функцій Гріна. Для компонент тензора електропровідності побудований ряд теорії збурень за додатними степенями цього інтегралу, отримані і детально проаналізовані члени другого і третього порядків. Стала Хола виявляється відмінною від нуля лише при врахуванні членів третього порядку. На цій основі в рамках моделі сильного зв'язку вперше пояснений додатний знак сталої Хола для ряду перехідних рідких металів.

[1]. Швець В.Т. Метод функцій Гріна в теорії металів. - Одеса: Латстар, 2002.

## ПРОСТОРОВО-ПРОМОДУЛЬОВАНІ СТАНИ В НЕСПІВМІРНИХ ФАЗАХ КРИСТАЛІВ ГРУПИ $A_2BX_4$

*Половинко І.І., Свелеба С.А., Катеринчук І.М., Семотюк О.В.  
Львівський національний університет ім. Івана Франка, Львів, Україна*

В останні роки виявлено і активно досліджується новий стан неспівмірно-модульованої структури, який характеризується суперпозицією декількох хвиль модуляції в одному кристалографічному напрямку. В цьому випадку сумарна модуляція структури здійснюється через суперпозицію таких хвиль. Наявність рухомих і нерухомих дефектів буде впливати на умови формування багатомодових станів в неспівмірних фазах кристалів. Так, як в полі неспівмірної модуляції проходить процес формування хвилі густини дефектів, то повинні існувати ефекти які зумовлені взаємодією останньої із хвилею модульованої структури. В даній роботі на прикладі кристалів  $[N(CH_3)_4]_2ZnCl_4$ ,  $[N(CH_3)_4]_2CuCl_4$ ,  $[N(CH_3)_4]_2CoCl_4$ ,  $[N(CH_3)_4]_2FeCl_4$  досліджено ефекти такої взаємодії. Вибір даних кристалів зумовлений детальним дослідженням неспівмірних фаз в цих кристалах різними методами.

В багатьох кристалах із неспівмірною фазою спостерігаються ряд ефектів, таких як: ефект термооптичної пам'яті, ефект другої гармоніки термооптичної пам'яті, ефекти діелектричної пам'яті та ефект наявності подвійних електрооптичних петель гістерезису. Зокрема природа ефекту термооптичної пам'яті пов'язана із взаємодією модульованої структури з рухомими дефектами кристала. При цьому в процесі витримки зразка при постійній температурі ця взаємодія приводить до періодичної зміни концентрації дефектів, зумовлюючи тим самим утворення хвилі густини дефектів з періодом рівним періоду модуляції. Дана модель отримала як добру теоретичну розробку так і експериментальне підтвердження.

Але поряд із вище наведеними ефектами існує ціла низка властивостей (в'язкої взаємодії, наявності метастабільних станів, кінетики фізичних величин, термічних циклів, глобального гістерезису, впливу передісторії зразка і т. п.) неспівмірних фаз, які не можна пояснити на основі тільки утворення хвилі густини дефектів. Співіснування таких двох хвиль просторової модуляції вказує на новий стан неспівмірно-модульованої структури, який характеризується суперпозицією декількох хвиль модуляції в одному кристалографічному напрямку. В цьому випадку сумарна модуляція структури буде здійснюватися через суперпозицію таких хвиль. Отже повинні існувати ефекти які зумовлені наявністю результуючого коливання.

Виходячи із експериментальних і теоретичних досліджень отримані наступні висновки.

В метастабільному стані в неспівмірній фазі відбувається взаємодія рухомих дефектів із неспівмірною структурою, і як результат цього проходить процес утворення хвилі густини дефектів. В цьому випадку напруженість електричного поля є просторово промодульоване із періодом рівним періоду модульованої структури, тобто  $E_1 = bE_0 \cos l_1 \varphi$  і  $l_1 = l$ . При умові співпадіння періодів просторових коливань проходить зростання густини вільної енергії кристала, а отже розширення температурної області існування метастабільного стану із даним періодом модуляції. Що до просторового розподілу фази параметру порядку, то отримані результати аналогічні тим, які отримані при умові впливу стаціонарного електричного поля.

В умовах в'язкої взаємодії, періоди просторового розподілу густини дефектів і модульованої структури не співпадають, але є близькими тобто  $E_1 = bE_0 \cos l_1 \varphi$ ;  $l_1 \neq l$ . В даному випадку густина вільної енергії кристалу зростає за рахунок члена  $\frac{1}{2} a_1 b E_0 \rho^l \cos(l-l_1)\varphi$ . Отже в перехідній області проходить взаємодія двох просторово-промодульованих коливань в результаті чого утворюється результуюче коливання з хвильовим вектором рівним різниці хвильових векторів даних коливань. Це свідчить про новий стан модульованої структури який характеризується суперпозицією декількох хвиль модуляції вздовж одного кристалографічного напрямку. Виходячи з опису оптичного двопронезаломлення, приріст оптичного двопронезаломлення в умовах в'язкої взаємодії є пропорційним до просторової зміни фази параметра порядку  $(\delta(\Delta n) \sim \frac{\partial \varphi}{\partial x})$ . Тобто  $\delta(\Delta n) \sim \left( C + \frac{a_1 b E_0 \rho^{l-2} \cos(l-l_1)\varphi}{h} \right)^{\frac{1}{2}}$ ,

оскільки останніми доданками можна знехтувати в силу їх незначного вкладу. Отримані експериментальні і теоретичні (згідно виразу ) залежності  $\delta(\Delta n) \sim f(T)$  добре між собою корелюють.

Отже в перехідній області відбувається взаємодія двох просторово промодульованих коливань одне з яких є незмінне і відповідає хвилі густини дефектів. Як результат такої взаємодії утворюється результуюче коливання, яке вносить основний вклад в появу аномальної поведінки оптичного двопронезаломлення в умовах в'язкої взаємодії.

Ще одним ефектом, який зумовлений появою результуючого просторово – промодульованого коливання є виникнення подвійних електрооптичних петель гістерезису. Дані електрооптичні петлі гістерезису спостерігаються в метастабільних станах (співмірних фазах) і їх поява зумовлена взаємодією неспівмірної та співмірної періодичностей. При цьому величина коерцитивного поля є незначною. В співмірній області неспівмірної фази проходить процес утворення хвилі густини дефектів з хвильовим вектором, який відповідає хвильовому вектору неспівмірної

структури (в цьому випадку хвильовий вектор неспівмірності приймає співмірне значення вищого порядку). Тобто, утворюється стан, в якому співіснують дві просторові хвилі модуляції – стаціонарна хвиля розподілу густини дефектів та хвиля модуляції, хвильовий вектор якої міняється з температурою. В умовах переполяризації сегнетоелектричних доменів відбувається процес переходу кристалу з неоднорідного в однорідний стан зі зникненням солітонної структури. При цьому залишається слід - хвиля просторового розподілу густини дефектів, яка є зародком при зворотному процесі. Таким чином виникаюча суперпозиція існуючих хвиль модуляції і зумовлює появу аномальної поведінки фізичних величин під впливом електричного поля.

Отже в неспівмірній фазі кристалів  $[\text{N}(\text{CH}_3)_4]_2\text{ZnCl}_4$ ,  $[\text{N}(\text{CH}_3)_4]_2\text{CuCl}_4$ ,  $[\text{N}(\text{CH}_3)_4]_2\text{CoCl}_4$ ,  $[\text{N}(\text{CH}_3)_4]_2\text{FeCl}_4$  виникає стан модульованої структури, який характеризується суперпозицією декількох хвиль модуляції в одному кристалографічному напрямку.

## ГУСТИНА СТАНІВ НЕВПОРЯДКОВАНИХ МЕТАЛІВ У ТЕОРІЇ РОЗСІЯННЯ ТА ВАРІАЦІЙНОМУ ПІДХОДІ

*Якібчук П.М.<sup>1</sup>, Волков О.В.<sup>1</sup>, Вакарчук С.О.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> *Львівський національний університет ім. Івана Франка, Львів, Україна*

<sup>2</sup> *Львівська державна академія ветеринарної медицини, Львів, Україна*

Відомо, що густина станів топологічно неупорядкованої металічної системи представляється уявною частиною конфігураційно засередненої функції Гріна, яка в свою чергу виражається через конфігураційно усереднену **T**-матрицю розсіяння. Використавуючи розклад **T**-матриці за парціальними складовими, густину станів можна представити через парціальні фази розсіяння:

$$N(E) = N_0(E) + \frac{2}{\pi} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{d\delta_l(E)}{dE} \quad (1)$$

Отже, задача знаходження густини станів зводиться до розрахунку парціальних фаз розсіяння на системі іонів металу, тобто використання методів квантової теорії розсіяння, що описують процес розсіяння електрона на багаточастинковій мішені.

Використавши результати нестационарної теорії розсіяння отримуємо зв'язок між парціальною фазою розсіяння електрона на системі іонів з фазою розсіяння електрона провідності на окремому іоні та структурним фактором досліджуваної металічної системи. Останній розраховується у наближенні твердих сфер Ашкрофта-Лекнера.

Для знаходження парціальних фаз розсіяння на окремому іоні розв'язується інтегральне рівняння для нерегулярної парціальної радіальної складової хвильової функції електрона провідності, що розсіюється на іоні металу. Асимптотичний розв'язок такого рівняння на нескінченості визначає парціальні фази розсіяння електрона провідності на окремому іоні.

Енергетичний спектр визначається наступним виразом:

$$E(k) = \left[ k^3 + \frac{6\pi}{\Omega_0} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [\delta_l(k) - \delta_l(0)] \right]^{2/3} \quad (2)$$

У варіаційному методі, який базується на використанні однопараметричної пробної функції, отримуємо наступний вираз для енергетичного спектру електрона провідності:

$$E(k) = (k^2 + \Delta_k) / 2, \quad (3)$$

де 
$$\Delta_k = \frac{2\Omega_0}{\pi^2} \int_0^{\infty} dq \frac{S(q)w^2(k, q)}{q^2} \left\{ 3\Delta_k + q^2 - \frac{(\Delta_k - q^2)^2}{2kq} \ln \left| \frac{q^2 + 2kq - \Delta_k}{q^2 - 2kq - \Delta_k} \right| \right\}$$

Знаючи енергетичний спектр, густину станів можна визначити наступним чином:

$$N(E) = \frac{\Omega_0 k^2}{\pi^2} \left( \frac{dE}{dk} \right)^{-1} \quad (4)$$

Нами проведений чисельний розрахунок енергетичного спектру електронів провідності  $E(k)$  та густини станів  $N(E)$  для неупорядкованих металів в обидвох вище наведених наближеннях.

Поблизу рівня Фермі спостерігаються значні відхилення цих величин від значень розрахованих у наближенні вільних електронів. Така поведінка  $E(k)$  і  $N(E)$  добре узгоджується з припущеннями Займана про "псевдоцилінний" характер залежностей  $E(k)$  і  $N(E)$  поблизу рівня Фермі. Її можна пояснити з огляду на сингулярність енергетичного спектру кристалічного твердого тіла поблизу країв зони Брилюена, яка при переході в рідкий стан розвивається внаслідок зростання розупорядкованості.

**EFFECT OF ATOMIC THERMAL VIBRATIONS AND LATTICE  
LOCAL STATIC DISPLACEMENTS ON BINARY ALLOY  
THERMODYNAMIC PROPERTIES**

*Gurskii Z.O.<sup>1,2</sup>, Krawczyk J.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>*Institute for Condensed Matter Physics, Lviv, Ukraine*

<sup>2</sup>*Opole University, Institute of Mathematics and Informatics, Opole, Poland*

Calculation of the alloy free energy is the key point in constructing the alloy phase diagram [1,2]. One should include the atomic thermal vibrations (ATV) and the local atomic static displacements (LASD) into consideration to achieve an adequate theoretical description of the alloy thermodynamical properties [1,2].

There are two kinds of degrees of freedom in the disordered alloys: the configurational and vibrational ones. They must be incorporated into the computational scheme on the same microscopic level to construct a consistent theory [1,2].

The main aim of the present report (see also [3]) is the calculation of the substitutional binary alloy free energy if the configurational and vibrational degrees of freedom and interrelations between them are taken into account explicitly. Some features of [3] and the present report are worthy of attention.

- I We start from the problem for the grand partition sum of substitutional binary alloy. One can perform summing over the vibrational and configurational states separately because of two quite different time scales characterizing them [3].
- II The correlated average crystal (CAC) model [2] is used here to sum over the vibrational degrees of freedom. This microscopic model is more adequate than the Einstein one or the phenomenological Debye-Gruneisen approach used conventionally in the first principles studies of other authors, see review of literature in [3]. The short-range order effect on the phonon density of states, the Debye temperature and other quantities can be investigated naturally within the CAC model [2]. Analysis of the relationships between the CAC approach and the known virtual crystal and coherent potential approximations is given in [2] and the present report.
- III Conditions when interrelations between the configurational and vibrational degrees of freedom can be ignored are formulated for the first time in [3].

The binary alloy Hamiltonian  $\tilde{H}$  renormalized by the ATV is obtained. Analysis of the  $\tilde{H}$  shows that renormalization of it is a rather small effect and one should regard the rigid lattice as a reasonable zero approximation in the



alloy thermodynamics [1-3]. Renormalization of  $\tilde{H}$  is more pronounced in alloys where there is a significant difference in the interatomic pair potentials of the alloy components [3]. The thermal vibrations must play the more important role in the thermodynamics of such alloys, especially in the phase diagram calculations [3]. The numerical results of other authors (see list of references in [3]) confirm perfectly this conclusion made within the analytical theory.

Summing over the configurational states of an alloy is performed by the collective variables method [4]. Equations defining the alloy free energy  $F$  and the chemical potentials of alloy components are derived. It has been shown that the configurational and vibrational degrees of freedom contribute separately to the free energy only at high temperatures. Analysis of  $F$  allows to state: including the ATV into consideration stabilizes a disordered alloy in comparison with the rigid lattice model. This deduction obtained analytically is in complete agreement with the numerical results of other authors, see for details [3].

The important conclusion follows from the consideration of the equation defining the order-disorder phase transition temperature  $T_c$ . Inclusion of the ATV into the theoretical scheme reduces  $T_c$  of the second order phase transition from the  $T_c$  value one would get neglecting the vibrations.

As is well known forming of a binary alloy is accompanied by arising of the LASD with respect to the regular lattice sites. The LASD influence on alloy different physical properties. There is the growing interest to both experimental and theoretical investigations of the LASD role in the alloy formation during the last decade, see for details [5].

An original microscopic approach to investigate the LASD in the substitutional binary alloys has been advanced in [6]. It is based on utilizing the collective variables method [4] that permits to solve correctly several principal problems related to the random quantities treatment in a disordered alloy theory [2,3,5].

Let us stress some features of the present report and [5]

- a) The grand partition sum when the LASD are taken into account is calculated by the collective variables method [4]. Thus, the all terms of the alloy free energy (the internal energy and the entropy) are obtained within the same method.
- b) Unlike the computational simulations it is an analytical approach that provides a deeper understanding of the underlying physics. Analysis of the obtained expressions allows one to find out when and why (in which alloys) the LASD effect is noticeable. For example, one can clear up on the microscopic level the nature of the well known phenomenological Hume-Rothery rules analyzing equations for the LASD amplitudes.

Analysis of the derived explicit expressions for the free energy and the renormalized by the LASD ordering potential  $\tilde{V}_2(R) = \tilde{V}_{AA}(R) + \tilde{V}_{BB}(R) - 2\tilde{V}_{AB}(R)$  ( $i = A, B$  is a kind of metal) provides a deep understanding of the LASD and their role in the alloy formation. Contribution to the free energy caused by the entropy term is shown to stabilize a disordered alloy. This effect is more pronounced owing to the LASD [5]. A great influence of the LASD on the alloy thermodynamics can be observed in such systems where is a considerable difference in the interatomic potentials  $V_{ii}(R)$  ( $i = A, B$ ) [5]. The theory is illustrated by numerical calculations performed for alloys of the Ca-Ba system. Dependence of the alloy formation heat on temperature and alloy concentration obtained numerically agrees perfectly with the experimental data.

- [1] J.Hafner, From Hamiltonians to Phase Diagrams, Springer, Berlin Heidelberg, 1987.
- [2] I.R.Yukhnovskii, Z.A.Gurskii, Quantum-Statistical Theory of Disordered Systems, Naukova Dumka, Kiev, 1991 (in Russian).
- [3] Z.Gurskii, J.Krawczyk, Physica B 304 (2001) 319-332.
- [4] I.R.Yukhnovskii, Phase Transitions of the Second Order: Collective Variables Method, World Scientific, Singapore, 1987.
- [5] Z.Gurskii, J.Krawczyk, Physica B (2003) to be published.
- [6] Z.Gurskii, Yu.Khokhlov, J. Phys.: Condens. Matter 6 (1994) 8711.

## БАЗИСНИЙ ПІДХІД В ТЕОРІЇ МЕТАЛІЧНИХ СИСТЕМ

*Ваврух М.В.<sup>1</sup>, Коваль С.П.<sup>1</sup>, Солов'ян В.Б.<sup>2</sup>, Якібчук П.М.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> *Львівський національний університет ім. Івана Франка, Львів, Україна*

<sup>2</sup> *Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, Україна*

1. Базисний підхід до побудови електрон-іонної моделі металу запропонований у попередніх роботах авторів [1,2]. Він ґрунтується на редукції опису електронної системи металу шляхом статистичного засереднення за станами підсистеми локалізованих електронів, оскільки в багатьох фізичних процесах останні відіграють відносно пасивну роль. Еквівалентність всіх електронів металу вимагає використання повної і ортогональної системи одночастинкових функцій, орти якої є близькими до хвильових функцій одночастинкових станів електронів. Цій умові задовольняють так звані змішані базиси, до яких входять функції, близькі до хвильових функцій локалізованих станів та хвильові функції типу плоских хвиль, що відповідає рівноправному опису двох підсистем електронів. Розглянуто різні способи побудови змішаного базису  $\{\psi_\sigma(\mathbf{r})\}$ , що включає підпростір ортогональних локалізованих функцій  $\psi_{\lambda ij}(\mathbf{r})$  ( $\lambda$  –

набір квантових чисел,  $j$  – номер ядра) та підпростір делокалізованих функцій  $\psi_k(\vec{r})$ , що мають асимптотику плоских хвиль на великих відстанях від ядер і є результатом дії деякого унітарного оператора  $\hat{W} \equiv \hat{W}(\vec{r})$ , який визначається сукупністю функцій  $\psi_{\lambda l}(\vec{r})$ , на орти базису плоских хвиль  $\varphi_k(\vec{r})$ , а саме  $\psi_\sigma(\vec{r}) = \hat{W}\varphi_k(\vec{r})$ . Змішаний базис  $\{\psi_\sigma(\vec{r})\} = \{\psi_{\lambda l}(\vec{r})\} \oplus \{\psi_k(\vec{r})\}$  є системою власних функцій лінійного ермітового оператора  $\hat{\Lambda} = \hat{W}\hat{T}\hat{W}^*$  (де  $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$  – оператор кінетичної енергії). Практична побудова змішаних базисів пов'язана зі значними труднощами. Тут використовується лише принципова можливість побудови змішаних базисів.

2. У зображенні вторинного квантування на базисі  $\{\psi_\sigma(\vec{r})\}$  гамільтоніан системи, що складається з  $N_n$  ядер заряду  $Qe_0$  і  $N_e = N_n Q$  електронів в об'ємі  $V$ , має такий вигляд:

$$\hat{H} = \hat{H}_n(R) + \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \sum_s \epsilon_{\sigma_1, \sigma_2} a_{\sigma_1, s}^+ a_{\sigma_2, s} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} \sum_{s_1, s_2} V_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4} a_{\sigma_1, s_1}^+ a_{\sigma_2, s_2}^+ a_{\sigma_3, s_2} a_{\sigma_4, s_1}. \quad (1)$$

Тут перша складова – гамільтоніан ядерної підсистеми з чисто кулонівською взаємодією,  $a_{\sigma, s}$  – фермі-оператори електронів, що відповідають станам  $\psi_\sigma(\vec{r})$  і проекції спіна  $s$ ;  $\epsilon_{\sigma_1 \sigma_2}$  – комбінація із матричних елементів оператора кінетичної енергії та електрон-ядерної взаємодії,  $V_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}$  – матричний елемент міжелектронної взаємодії.

З метою переходу від точного гамільтоніана (1) до наближеного гамільтоніана електрон-іонної моделі використовується статистичне засереднення статоператора за станами підсистеми локалізованих електронів. Процедура засереднення розбита на два етапи. З метою спрощення розрахунку на першому етапі здійснено циклічне перетворення гамільтоніана

$$e^{-\hat{w}}(\hat{H} - \mu\hat{N}_e)e^{\hat{w}} = \hat{H}_n(R) + \hat{H}_l + \hat{H}_k + \hat{V}_{lk},$$

$$\hat{V}_{lk} = \sum_{\substack{l_1, l_2 \\ k_1, k_2}} \sum_{s_1, s_2} \{V_{\tilde{k}_1, l_1, l_2, \tilde{k}_2} a_{\tilde{k}_1, s_1}^+ a_{l_1, s_2}^+ a_{l_2, s_2} a_{\tilde{k}_2, s_1} + V_{\tilde{k}_1, l_1, \tilde{k}_2, l_2} a_{\tilde{k}_1, s_1}^+ a_{l_1, s_2}^+ a_{\tilde{k}_2, s_2} a_{l_2, s_1}\}, \quad (2)$$

що дозволяє врахувати гібридизаційні ефекти. Оператор  $\hat{H}_l$  залежить тільки від  $a_{l, s}$ ,  $\hat{H}_k$  – від  $a_{\tilde{k}, s}$  ( $l = \lambda, j$ ). На другому етапі здійснено засереднення статистичного оператора моделі (2) за станами моделі, що описується перенормованим гамільтоніаном  $\tilde{H}_l$  в рамках теорії збурень за оператором  $\hat{V}_{lk}$ . Наступний перехід від підпростору  $\psi_k(\vec{r})$  до базису плоских хвиль  $\varphi_k(\vec{r})$  дозволяє записати гамільтоніан електрон-ядерної

моделі у традиційній формі  $\hat{H}_{ei} = \hat{H}_i(R) + \hat{H}_{el} + \hat{V}_{ei}^{(1)} + \hat{V}_{ei}^{(2)}$ , де  $\hat{H}_i(R)$  – гамільтоніан іонної підсистеми,  $\hat{H}_{el}$  – гамільтоніан електронної рідини,

$$\hat{V}_{ei}^{(1)} = \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \sum_s C_{\vec{k}_1, s}^+ C_{\vec{k}_2, s}^- A_2(\vec{k}_1, \vec{k}_2 | R),$$

$$\hat{V}_{ei}^{(2)} = \sum_{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_4} \sum_{s_1, s_2} C_{\vec{k}_1, s_1}^+ C_{\vec{k}_2, s_2}^+ C_{\vec{k}_3, s_2}^- C_{\vec{k}_4, s_1}^- A_4(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4 | R) + \dots,$$

де  $C_{\vec{k}, s}$  – оператори електронів на базисі плоских хвиль. Матричні елементи  $A_2(\dots)$ ,  $A_4(\dots)$  залежать від сукупності координат іонів. В роботі вони досліджені для випадку простих металів.  $\hat{H}_{ei}$  відрізняється від традиційних гамільтоніанів електрон-іонних моделей наявністю багаточастинкових взаємодій.

Цей підхід узагальнено на випадок домішок у металах і на випадок сплавів чи розплавів двох металів.

3. Здійснено перехід від електрон-іонної до іонної моделі металу шляхом статистичного засереднення за станами колективізованих електронів. Термодинамічний потенціал і вільна енергія електронної підсистеми зображені у вигляді розкладів за n-частинковими кореляційними функціями моделі електронної рідини. Досліджено ефективні багаточастинкові взаємодії між іонами для випадку чистого металу та для випадку розплаву двох металів.

4. Базисний підхід застосовано до опису просторово обмеженого металу шляхом підсумовування розкладів для вільної енергії металу і приведення її до вигляду функціонала густини з багаточастинковими ефективними взаємодіями.

[1] М.В.Ваврух, В.Б.Солов'ян. Базисний підхід до опису систем з локалізованими станами // УФЖ, 1991, **36**, № 4, с. 630-636.

[2] М.В.Ваврух, П.Н.Якибчук, С.П.Коваль. Учет локализованных состояний в металлах в рамках базисного подхода // Металлофизика и новейшие технологии, 2000, **22**, № 5, с. 16-22.

## THERMODYNAMIC PROPERTIES OF LIQUID-VAPOR TRANSITION IN ALKALI METALS

*Rogankov V.B., Bedrova T.A.  
Odesa State Academy of Refrigeration, Odesa, Ukraine*

The experimental studies of such thermodynamic properties of metals as density, pressure and latent heat along the coexistence curve of liquid-vapor transition are the labor-consuming and expensive problem of thermophysics. We

have established the method to diminish the necessary volume of experimental information and to represent accurately by calculations all above-named thermodynamic data in the range from triple points to the critical points of the alkali metals Rb and Cs. The method is based on the model of fluctuational thermodynamics which has been proposed originally for the pure nonmetallic fluids. The difference between a rectilinear diameter - and liquid branch behavior of nonmetallic fluids and metals is discussed.

## **ВИКЛИКАНИЙ ШУМОМ КРОСОВЕР ВІД БЕЗПОРЯДКУ ДО ПОРЯДКУ В ЕЛЕКТРОННІЙ ПІДСИСТЕМІ НАПІВПРОВІДНИКА ЗІ ЗСУВОМ МОСА-БУРШТЕЙНА**

*Гудима Ю.В.*

*Чернівецький національний університет ім. Юрія Федьковича,  
Чернівці, Україна*

В сильнолегованих напівпровідниках має місце виродження Фермі в зоні провідності. Стани біля екстремуму цієї зони при дії світла великої інтенсивності заповнюються носіями заряду. Тому край поглинання зсувається в сторону більших енергій і має місце ефективне зростання ширини забороненої зони. Це явище і називають динамічним зсувом Моса-Бурштейна. Нами теоретично розглянуто індукований шумом фазовий перехід в упорядкований стан електронної підсистеми неупорядкованої напівпровідникової плівки, в якій спостерігається динамічне явище Моса-Бурштейна під дією потужного лазерного випромінювання.

Зовнішній шум приймався кольоровим і релаксуючим, а інертність шуму моделювалася випадковим процесом Орнштейна-Уленбека. Швидкість зміни концентрації фотонів описувалась дифузійним рівнянням генераційно - рекомбінаційного балансу. Враховано спектральну залежність коефіцієнту поглинання світла для сильнонеупорядкованого напівпровідника. Недетерміновані порушення інтенсивності світла моделювалися випадковим кольоровим процесом. Отримане стохастичне рівняння проаналізовано в наближенні середнього поля в підході Кюри-Вейса. Для визначення стаціонарної густини імовірності концентрації фотонів воно інтерпретувалося в розумінні Стратоновича. Густина імовірності отримана в наближенні „об'єданого” кольорового шуму [1], як стаціонарний розв'язок відповідного рівняння Фокера - Планка. Вивчено вплив ефекту кольоровості шуму на поведінку системи. В рамках наближення регулярної ґратки отримано і проаналізовано фазову діаграму даної просторово розподіленої стохастичної системи. Проведено числове моделювання. Показано, що мультиплікативний кольоровий зовнішній шум породжує в ній додатковий

висококонцентраційний усталений стан. Таку поведінку системи можна трактувати як нерівноважний фазовий перехід першого роду, індукований шумом.

Низькоконцентраційний усталений стан системи відповідає неупорядкованій фазі напівпровідника, а висококонцентраційному усталеному стану системи можна поставити у відповідність упорядковану фазу системи. Дійсно, коли нерівноважних носіїв народжується багато, вони можуть так щільно заповнити крупномасштабні флуктуації потенціалу, що краї його енергетичних зон нічим істотно не відрізнятимуться від енергетичної структури ідеального кристалу. Таким чином, ми маємо справу з нерівноважним переходом першого роду типу безпорядок-порядок, індукованим зовнішнім мультиплікативним шумом. З точки зору загальної класифікації, його можна віднести до електронних фазових переходів в твердих тілах. При таких фазових переходах в конденсованому середовищі відбуваються відносно невеликі зміни, але електронна підсистема зазнає сильної перебудови (наприклад, в даному випадку, різко змінюється енергетичний спектр носіїв заряду). Проаналізовані параметри системи для яких може реалізуватися даний перехід.

Розрахунки проведені в рамках запропонованої теорії якісно добре узгоджуються з дослідними даними. Таким чином, дана робота служить містком між теорією реальних напівпровідникових систем та теорією фазових переходів, індукованих шумом.

[1] Jung P., Hänggi P. Phys.Rev.A35,4464 (1987).

## **КВАЗІТОЧНО РОЗВ'ЯЗУВАНА НЕВПОРЯДКОВАНА МОДЕЛЬ КРОНІГА-ПЕННІ**

*Возняк О.О., Ткачук В.М.  
Львівський національний університет, Львів, Україна  
E-mail: tkachuk@ktf.franko.lviv.ua*

Опис руху електрона на кристалічній ґратці є однією із центральних задач теорії твердого тіла. Така квантова задача зводиться до знаходження розв'язків рівняння Шредінґера з деяким модельним потенціалом. На сьогодні відомо тільки декілька потенціалів, для яких можна знайти розв'язки рівняння Шредінґера для всіх енергетичних рівнів у аналітичному вигляді. Класичним прикладом є потенціал моделі Кроніґа-Пенні або його граничний випадок – „гребінець Дірака”.

Внесення випадковості у потенціал значно ускладнює знаходження розв'язків задачі про рух електрона у цьому потенціалі. Випадковий

потенціал у одновимірному випадку задається функцією  $V(x) = V^i(x) = V(\alpha_i, x)$ , означеною на кожному з інтервалів  $l_i < x \leq l_{i+1}$  окремо. Тут набір параметрів  $\{\alpha_i\}$  є випадковим і відповідає певній конкретній реалізації потенціалу.

Можна розрахувати деякі статистичні характеристики випадкових потенціалів та відповідних їм розв'язків рівняння Шредінгера, але випадкові потенціали, розв'язки рівняння на власні значення яких можуть бути знайдені в аналітичному вигляді, до цього часу не відомі. Незважаючи на неможливість знайти всі розв'язки задачі на власні функції та власні значення, для багатьох потенціалів можна знайти точний вираз для енергії та хвильових функцій декількох станів. Така задача відома як квазіточно розв'язувана задача з кількома відомими власними станами.

Потужним засобом вивчення проблеми точної розв'язуваності рівняння Шредінгера є суперсиметрична квантова механіка Вітгена. В наших попередніх роботах було запропоновано новий суперсиметричний метод побудови квазіточно розв'язуваних потенціалів з двома відомими розв'язками, який пізніше був узагальнений для побудови періодичних та неупорядкованих потенціалів. Використання цього методу передбачає вибір певної генеруючої функції з наперед заданими властивостями. Така генеруюча функція однозначно задає квазіточно розв'язуваний потенціал та його розв'язки. Вибір генеруючої функції суттєво ускладнюється вимогою отримання несингулярного потенціалу.

В даній роботі розглянуто особливості побудови одновимірного неупорядкованого квазіточно розв'язуваного потенціалу Кроніга-Пенні з використанням методу суперсиметрії. Зокрема, для потенціалу  $V^i(x) = -\alpha_i^2/2$ ,  $0 < \alpha_i \leq \infty$ ,  $l_{i+1} - l_i = \pi/\alpha_i$  знайдено розв'язок для стану з нульовою енергією, який є двократно виродженим. Зауважимо, що при зміні випадкового параметра  $\alpha_i$  змінюється як глибина потенціальної ями, так і відстань між вузлами ланцюжка. Для потенціалу  $V^i(x) = -n_i/6$ ,  $n_i = \{0, 1\}$ ,  $l_{i+1} - l_i = \sqrt{3}\pi/(n_i + \sqrt{3}(1 - n_i))$  знайдено розв'язки для двох власних станів з енергіями  $E=0$  та  $E=1/2$ , перший із яких є невірдженим, а другий – двократно виродженим. При зміні випадкового параметра  $n_i$  змінюється тільки ширина ями.

Отримані власні стани належать до протяжних станів частинки в даних потенціалах. Добре відомо, що у одновимірних випадкових потенціалах можуть існувати локалізовані розв'язки. Можливість отримання таких розв'язків може бути темою для подальших досліджень у цьому напрямку.

# СТАТИСТИЧНИЙ ОПИС БАГАТОЧАСТИНКОВИХ ЕФЕКТІВ З ВРАХУВАННЯМ СИМЕТРИЙНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ФІНІТНИХ СИСТЕМ

*Товстюк Н.К.*

*Львівський національний університет ім. І. Франка, Львів, Україна*

*E-mail: tovstyuk@wups.lviv.ua*

Відомо, що геометрична структура атомів, що формують молекули, кластери, чи тверде тіло, визначає електронну структуру цих об'єктів. Власне геометрична структура, тобто взаємне розташування атомів, має певну симетрію – звичайні і дзеркальні вісі обертання, площини відбивання, тощо. Така симетрія дозволяє класифікувати одночастинкові, а отже і багато-частинкові хвильові функції побудовані у вигляді добутку одночастинкових, у теоретико-груповому підході.

В даній роботі при вивченні структури кристалу і її взаємозв'язку з електронною будовою обмежимося вивченням структури елементарної комірки, тобто об'єкту який описується точковою групою симетрії. Для системи електронів в комірці в наближенні парної взаємодії записується гамільтоніан  $\hat{H}$  [1]. В представленні вторинного квантування  $\hat{H}$  подається альтернативними способами, зокрема, на хвильових функціях  $\psi_{\mu ij}(r)$  прокласифікованих за незвідними представленнями  $\{\mu, i, j\}$  або на хвильових функціях класу  $\varphi_{\rho}(r)$ , оскільки між ними існує співвідношення

$$\varphi_{\rho}(\vec{r}) = \frac{1}{n_{\mu}} \sum_{\mu} \sum_{i,j} \chi_{\rho}^{\mu} \psi_{\mu ij}(\vec{r}),$$

$$\text{де } h_{\rho} \varphi_{\rho}(\vec{r}) = \sum_{g \in \rho} \sum_{\mu ij} D_{ij}^{\mu}(g) \psi_{\mu ij}(\vec{r}); \quad n_{\mu} \psi_{\mu}(\vec{r}) = \sum_{ij} \psi_{\mu ij}(\vec{r}).$$

Перехід від простору класів до простору незвідних представлень забезпечується унітарним перетворенням, де  $D_{ij}^{\mu}(g)$  - матричний елемент незвідного представлення  $\mu$  для елемента  $g$ .

Аналіз побудованої в просторі класів повної функції Гріна [1] дозволяє стверджувати: в комірці кристала з багатьма атомами, основний стан відповідає кільком повністю зайнятим класам. Випадок заповненого лише одного класу заборонений в зв'язку з відсутністю щільної упаковки. У випадку відсутньої неоднорідної упаковки, атоми одного класу зсуваються на вектор неповної трансляції (появляється додаткова трансляція) вздовж того елемента класу де вони локалізовані, що є причиною появи несиморфних груп з елементами симетрії  $\{\varphi | \vec{a}(\alpha) + \vec{R}_n\}$  де  $\alpha$  - кут повороту, дозволений симетрією,  $\vec{R}_n$  - вектор трансляції,  $\vec{a}(\alpha)$  - вектор додаткового зсуву вздовж осі чи площини симетрії



при повороті на кут  $\alpha$ ,  $\bar{g}(\alpha)$ - кратне до вектора трансляції. У випадку коли система не поповнюється вчасно матеріалом при рості, появляється аморфна структура.

[1] Tovstyuk K.D., Tovstyuk N.K.// Mod. Phys.Lett. B, vol.14, No16 (2000) 589-597

## МЕТОД ФАЗОВИХ ФУНКЦІЙ У ТЕОРІЇ МЕТАЛІВ

Фурман В.В.

Львівський національний університет ім. Івана Франка, Львів, Україна

E-mail: [fourman@ktf.franko.lviv.ua](mailto:fourman@ktf.franko.lviv.ua)

Конкретні методи розрахунку властивостей фізичних систем за теорією розсіяння з успіхом застосовуються як у атомній так і ядерній фізиці. На підставі методу фазових функцій проведено в єдиному підході аналіз по визначенню критеріїв і вимог до методів одноелектронного наближення в теорії розсіяння та до побудови потенціалів електрон-іонної взаємодії із поведінки фазових функцій розсіяння. Із дослідження поведінки логарифмічних похідних хвильових функцій електронів провідності визначено ефективні параметри і характеристики квантового розсіяння для потенціалів іонних залишків в кристалах металу та отримані співвідношення для розрахунку функціональних залежностей [1].

Спроба означити критерії вибору псевдопотенціалу металу на основі зв'язку між псевдопотенціалом металу й розв'язками фазових рівнянь для фазових функцій розсіяння реалізована в [1,2]. На підставі методу фазових функцій [3] отримано нові фазові рівняння за допомогою функцій, на яких ґрунтуються наближені методи Вентцеля-Крамерса-Бриллюена і модифікований метод Джефріса, та запропоновано спосіб знаходження точного розв'язку рівняння Шредінґера у термінах цих методів. Важливим аспектом у дослідженні електронних характеристик металів є оцінка розсіюючих параметрів середовища [2], для якого будується теорія збурень для відповідного потенціалу іонного залишку. Форми фазових рівнянь для фазових функцій розсіяння можуть бути довільними, але всі вони пов'язані між собою тотожними перетвореннями, які просто слідує із умови неперервності логарифмічної похідної хвильової функції [4].

Для розрахунку фази розсіяння  $\delta_l(k)$  при різних значеннях  $k$  необхідно скористатись граничним значенням розв'язку фазового рівняння [1]:

$$\frac{d}{dr} \tan \delta_l(k, r) = -\frac{2W_l(k, r)}{k} (j_l(k, r) - \tan \delta_l(k, r) n_l(k, r))^2$$

із парціальною складовою формфактору псевдопотенціалу  $\langle \mathbf{k} | W_l | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle$  для парціальної фази розсіяння [4]

$$\tan \delta_l(k) = \frac{\int_0^{2k} q \langle \mathbf{k} | W_l | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle P_l \left( 1 - \frac{q^2}{2k^2} \right) dq}{1 - \int_0^{2k} q \langle \mathbf{k} | W_l | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle \frac{d}{dx} P_l \left( \frac{q^2}{2k^2} - 1 \right) dq}$$

Результати розрахунку енергії зчеплення [5] для рідкісноземельних металів із прозицій теорії розсіяння ліпше корелюють із експериментальними даними, ніж результати розрахунків, отриманих у стандартному підході.

- [1] Фурман В.В., Якібчук П.М. // Журн. фіз. досл., 1966. Т.1. №1. С.134-147.  
 [2] Фурман В. // Журн. фіз. досліджень. 2000. Т.4. №3. С.306-314.  
 [3] Фурман В. // Укр. ж. журн. 2002. Т.47. №11. С.1089-1095  
 [4] Фурман В. // Укр. ж. журн. 2000. Т.45. №2. С.212-219.  
 [5] Фурман В.В. // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. фіз. 2001. Вип.34. С.12-16.

### МОДЕЛЬ НАДПРОВІДНИКА З ЕЛЕКТРОН-ФОНОННИМ І КОРЕЛЯЦІЙНИМ МЕХАНІЗМАМИ

*Ваврух М.В., Слободян С.Б.*

*Львівський національний університет ім. Івана Франка, Львів, Україна*

Розглянуто модель, що описує систему електронів у полі фононів з гамільтоніаном

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_{ph} + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{ep}, \\ \hat{H}_0 &= \sum_{\mathbf{k},s} \varepsilon_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k},s}^+ \alpha_{\mathbf{k},s}, \quad \hat{H}_{ph} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} \left( b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right), \\ \hat{V}_{ee} &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, s_1, s_2} \alpha_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, s_1}^+ \alpha_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, s_2}^+ \alpha_{\mathbf{k}_2, s_2} \alpha_{\mathbf{k}_1, s_1}, \\ \hat{V}_{ep} &= \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, s} D_{\mathbf{q}} \{ b_{\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+ \alpha_{\mathbf{k}, s} - b_{\mathbf{q}}^+ \alpha_{\mathbf{k} - \mathbf{q}, s}^+ \alpha_{\mathbf{k}, s} \} \end{aligned}$$

в області повного виродження і сильної неідеальності електронної підсистеми.

Тут  $\hat{H}_0$  – гамільтоніан незваємодіючих електронів,  $\hat{H}_{ph}$  описує вільні фонони,  $\hat{V}_{ee}$  оператор прямої кулонівської взаємодії електронів,  $\hat{V}_{ep}$  –

оператор електрон-фононої взаємодії,  $\alpha_{\mathbf{k},s}$  – фермі-оператори вторинного квантування електронів на базисі плоских хвиль,  $b_{\mathbf{q}}$  – оператори фононів.

Використано модельний опис електронної підсистеми: електрони, імпульси яких належать невеликій області  $\delta(\mathbf{k})$  в околі поверхні Фермі, описуються в термінах квазічастинок згідно з  $(u, v)$  – перетворенням Боголюбова, а “пасивна” підсистема електронів, імпульси яких не належать до  $\delta(\mathbf{k})$ , вважається нормальною (парамагнітною) і описується в термінах операторів частинок.

Модельна система, що включає в себе вільні квазічастинки, фонони та парамагнітну підсистему електронів, використовується як базисна система для розрахунку статистичної суми методом теорії збурень.

Варіаційним методом одержано систему рівнянь в імпульсно-частотному зображенні, яка визначає функції  $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$  та спектр збуджень надпровідної підсистеми електронів. Для випадку сферичної симетрії області  $\delta(\mathbf{k})$  рівняння компенсації зведене до традиційної форми, досліджено внески у ядро цього рівняння за рахунок електрон-фононного механізму та механізму міжелектронних кореляцій. В області слабкої неідеальності, що відповідає традиційним низькотемпературним металічним надпровідникам, ці два механізми конкурують між собою. В області сильної неідеальності електронної підсистеми вони доповнюють один одного, що забезпечує високі критичні температури. Розглянута модель в області сильної неідеальності може відповідати таким фізичним системам, як диборид магнію, гідрид паладію та інші, які можна інтерпретувати як “розбавлені” метали.

## **ВРАХУВАННЯ БАГАТОЧАСТИНКОВИХ ЕФЕКТІВ В ЕЛЕКТРОН-ІОННІЙ МОДЕЛІ МЕТАЛУ**

*Солов'ян В.Б.*

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, Україна*

На основі багаточастинкового мікроскопічного базисного підходу розглядається електрон-ядерна модель металу. У гамільтоніані моделі  $\hat{H}_{en}(R_j, a_{\sigma})$  використано координатний опис для ядерної підсистеми  $\{\mathbf{R}_j\}$  та зображення вторинного квантування у змішаному базисі  $\{\Psi_{\sigma}\}$  для підсистеми електронів  $(a_{\sigma,s}^+, a_{\sigma,s})$  – оператори породження (знищення) у станах  $\Psi_{\sigma}, \sigma = l, \mathbf{k}, s$  – спінова змінна). Засереднення статистичного оператора моделі за станами електронів  $\{\Psi_j\}$  дозволяє послідовно отримати ефективний багаточастинковий гамільтоніан  $\hat{H}_{ef}(R_j, n_l, a_k)$

підсистеми колективізованих електронів у полі іонів ( $n_l$  – числа заповнення станів іонного остова). З використанням умови повноти системи функцій  $\{\Psi_\sigma\}$  виконано коректний перехід у  $\hat{H}_{ef}$  до зображення плоских хвиль, що дозволило виділити внесок однорідної компоненти електронів провідності  $\hat{H}_{EL}$ , а саме

$$\hat{H}_{ef}(R_j, n_l, c_k) = \hat{H}_{EL} + \hat{V}_{ef}(R_j, n_l, c_k),$$

де  $\hat{H}_{EL}$  – гамільтоніан моделі однорідної електронної рідини, а  $\hat{V}_{ef}$  – оператор електрон-іонних взаємодій,  $c_k$  – оператори вторинного квантування на базисі плоских хвиль. При розрахунку сліду статистичного оператора за станами колективізованих електронів модель однорідної електронної рідини слугує в якості базисної системи (reference system), а  $\hat{V}_{ef}$  відіграє роль оператора збурення. При цьому  $\hat{V}_{ef}$  є досить складним багаточастинковим оператором (як і  $\hat{H}_{ef}$ ) як за іонними, так і за електронними змінними. З метою спрощення розрахунку діаграм теорії збурень у другому та вищих порядках запропоновано зведення  $\hat{V}_{ef}$  до традиційної – одноелектронної та одноіонної форми:

$$\hat{V}_{ei} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, s} S_{-\mathbf{q}} V(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s}^+ c_{\mathbf{k}, s},$$

де  $S_{\mathbf{q}}$  – структурний фактор іонів,  $V(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$  – перенормований форм-фактор нелокального електрон-іонного потенціалу взаємодії. Показано, що врахування двоіонних ефектів у першому порядку теорії збурень забезпечує коректність розрахунку іонних зарядів та дозволяє послідовно виконати екранування кулонівських взаємодій іонів на основі кореляційних функцій моделі однорідної електронної рідини. Врахування багаточастинкових ефектів покращує збіжність між розрахованими і експериментальними характеристиками металів.

## СПЕКТР МАГНОННИХ ЗБУДЖЕНЬ АМОРФНОЇ S-D МОДЕЛІ

*Рудавський Ю.К., Понеділок Г.В., Дорош Л.А.*

*Національний університет "Львівська політехніка", Львів, Україна  
Інститут прикладної математики і фундаментальних наук, Львів, Україна*

Узагальнена s-d модель застосовується для опису властивостей структурно неупорядкованих магнітних металів і широкозонних напівпровідників з феромагнітним типом впорядкування [1]. Крім спин-електронної обмінної взаємодії гамільтоніан моделі включає також гайзенбергівську обмінну взаємодію локалізованих атомних спінів і

кулонівську взаємодію електронів провідності. Випадковими параметрами моделі є просторові координати атомів. Структура описується модельними кореляційними функціями для яких запропоновано явні аналітичні вирази.

Методом двочасових запізнюючих функцій Гріна, застосовуючи розщеплення типу Боголюбова-Тяблікова та Хаббарда, отримано систему рівнянь для спектру спінових збуджень системи. В довгохвильовій області магнетонного спектру отримано дві вітки спінових збуджень – "акустичного" і "оптичного" типу:

$$\omega^+ = \omega_0^+ - \frac{M}{P+M} D_1^+ k^2 - \frac{M}{2(P+M)} \frac{D_2^+}{\omega_0^+ + \Delta_0} k^2,$$

$$\omega^- = \omega_0^- - \frac{P}{P+M} D_1^- k^2 - \frac{P}{2(P+M)} \frac{D_2^-}{\omega_0^- + \Delta_0} k^2,$$

Тут  $\Delta_0 = IM - 2UP$  – стонерівська щілина,  $\omega_0^+ = 0$ ,  $\omega_0^- = -I(P+M)$ .

$$D_1^\pm = \rho M \left( \frac{1}{k} \frac{dJ_k}{dk} + \frac{1}{2} \frac{d^2 J_k}{dk^2} \right) + \frac{4\pi N M}{3V^2 I} \frac{(\omega_0^\pm + IM)^2}{\omega_0^\pm [\omega_0^\pm + I(P+M)]} \sum_{p \in \Lambda} (J_0 - J_p) S_2(p) \times$$

$$\times \left\{ \left( \frac{1}{p} \frac{dJ_p}{dp} + \frac{1}{2} \frac{d^2 J_p}{dp^2} \right) - \frac{\rho M (\omega_0^\pm + IM)}{\omega_0^\pm [\omega_0^\pm + I(P+M)]} \left[ (J_0 - J_k) \left( \frac{1}{p} \frac{dJ_p}{dp} + \frac{1}{2} \frac{d^2 J_p}{dp^2} \right) - \left( \frac{dJ_p}{dp} \right)^2 \right] \right\}$$

– константа спінової жорсткості з врахуванням прямого та опосередкованого через електронну підсистему гайзенбергівського обміну. Поправка до "маси" магнетонів залежна від міжелектронних взаємодій та спін-електронного обміну

$$D_2^\pm = \frac{4\pi I}{3V^3 (\omega_0^\pm + \Delta_0)} \sum_p (n_p^\uparrow - n_p^\downarrow) \left( \frac{dt_p}{dp} \right)^2 - \frac{2\pi I}{3V^2} \sum_p \frac{d(n_p^\uparrow + n_p^\downarrow)}{dp} \frac{dt_p}{dp}.$$

Тут  $M$ ,  $P$  – намагіченості підсистеми локалізованих атомних спінів і електронів провідності відповідно,  $I$  – параметр спін-електронної взаємодії,  $J_k$  – фур'є-коєфіцієнти прямої гайзенбергівської взаємодії,  $U$  – кулонівський інтеграл,  $t_k$  – інтеграл перескоку електронів (закон дисперсії електронів провідності). Підсумовування в формулах здійснюється по модулю вектора  $\mathbf{p}$ .

- [1] Rudavskii Yu.K., Ponedilok G.V., Dorosh L.A. Long-wave spin excitations in crystalline s-d models// Condensed Matter Physics – 1998.– Vol. 1(13), P.145–160.

## ЕЛЕКТРОНЕГАТИВНІ ДОМІШКИ В РІДКИХ ЛУЖНИХ МЕТАЛАХ

Рудавський Ю.К., Понеділок Г.В., Кляпчук М.І.  
Національний університет "Львівська політехніка", Львів, Україна

Досліджується стан електронегативних газових домішок  $H, O, Cl, N, F$  у рідких лужних металах. Пропонується узагальнена мікроскопічна модель Андерсона з метою опису стану електронегативної домішки у однокомпонентному розплаві лужного металу [1, 2]. Виникнення зарядового та спін-поляризованого стану домішки трактується як процес гібридизації вільних та локалізованих на домішках електронних станів під дією поляризаційного потенціалу. Запропонований модельний псевдопотенціал апробовано при розрахунку домішкового питомого опору рідкого натрію з домішками кисню. Отримано якісне узгодження з експериментом [3, 4].

В рамках теорії Хартрі-Фока, використовуючи техніку функцій Гріна, отримано густину локалізованих на домішці електронних станів із спіном  $\sigma$ .

$$\rho_0^\sigma(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta \left[ 1 + \langle n_{\mp} \rangle \left( \frac{\alpha}{\Delta} (\langle n_{\pm} \rangle + \langle n_{\mp} \rangle) + 3 \frac{\gamma}{\Delta} \right) \right]}{(E - E_0)^2 + \Delta^2 \left[ 1 + \langle n_{\mp} \rangle \left( \frac{\alpha}{\Delta} (\langle n_{\pm} \rangle + \langle n_{\mp} \rangle) + 3 \frac{\gamma}{\Delta} \right) \right]^2},$$

де  $\Delta = \pi \langle W^2 \rangle \rho_0(E)$ ,  $\alpha = \pi \langle U^2 \rangle \rho_0(E)$ ,  $\gamma = \pi \langle UW \rangle \rho_0(E)$  – постійні параметри, чисельно оцінені для заданих аналітичним виразом матричних елементів  $W, U$ , які характеризують процеси непружного розсіяння електронів, зумовлені їх переходом з локалізованого стану на зарядженій та нейтральній домішці в зону провідності і навпаки. При абсолютному нулі температури середнє термодинамічне значення числа, локалізованих на домішці електронів із заданим спіном  $\sigma$  обчислюється через самоузгоджені рівняння

$$\langle n_{\pm} \rangle = \frac{1}{\pi} \operatorname{arccctg} \frac{E_0 - E_F + U_0 \langle n_{\mp} \rangle}{\Delta \left[ 1 + \langle n_{\mp} \rangle \left( \frac{\alpha}{\Delta} (\langle n_{\pm} \rangle + \langle n_{\mp} \rangle) + 3 \frac{\gamma}{\Delta} \right) \right]}.$$

Досліджуються умови виникнення та існування магнітного моменту домішки  $m = \langle n_{+} - n_{-} \rangle$  в залежності від співвідношень між параметрами моделі.

- [1] Anderson P.W. Localized magnetic states in metal.// Phys.Rev.B, 1961, vol. 124, No1, p.41–53.

- [2] Рудавський Ю.К., Понеділок Г.В., Микитюк О.А., Клапчук М. І. Стани електронегативних домішок в структурно неупорядкованих системах.// Препринт ІСМР-02-13U, Львів, 2002.
- [3] Рудавський Ю.К., Понеділок Г.В., Клапчук М. І. Модельний псевдопотенціал взаємодії електронів з негативними іонами.// Препринт ІСМР-02-24U, Львів, 2003.
- [4] Yu. Rudavskii, G. Ponedilok, M. Klapchuk. Model pseudopotential of the electrons-negative ions interaction.// Condensed Matter Physics, Lviv, 2003 (у друці).

## СПІН-ОРБІТАЛЬНА ВЗАЄМОДІЯ В МОДЕЛІ СИЛЬНОГО ЗВ'ЯЗКУ ЗІ СТРУКТУРНОЮ НЕВПОРЯДКОВАНІСТЮ

*Возняк О.М.*

*Прикарпатський університет ім. Василя Стефаника,  
Івано-Франківськ, Україна*

Вплив спіно-орбітальної взаємодії на властивості ідеальних кристалічних твердих тіл розглядався багатьма авторами і є добре вивченим. Встановлено, що вона спричиняє лише невеликі поправки до енергії електронів, які, проте, можуть бути важливими, зокрема, для вузькозонних матеріалів, що містять елементи з великим атомними номерами. Разом із тим дослідження в останні десятиліття низькорозмірних та неупорядкованих систем показало, що роль спіно-орбітальної взаємодії у таких матеріалах може суттєво зростати. Проте, аналіз процесів, що відбуваються у них, переважно базується на різних інтерполяційних схемах, і тому застосування до їх вивчення строгих теоретичних підходів є важливим і актуальним.

В даній роботі послідовно розглянуто вплив спіно-орбітальної взаємодії на енергетичний спектр твердого тіла, неідеальність якого пов'язана зі статичними зміщеннями атомів із вузлів ідеальної кристалічної ґратки, що мають випадковий характер, і є малими. Для дослідження використано метод сильного зв'язку, базисом якого є атомні хвильові функції s-стану. Гамільтоніан спіно-орбітальної взаємодії у представленні вторинного квантування на цьому базисі має вигляд

$$H_{so} = -2 \sum_{i,j,\gamma} u_i^\gamma \bar{A}_{ij}^\gamma \bar{s}_i, \quad (1)$$

де  $\bar{u}_i^\gamma$  -  $\gamma$ -складова зміщення атома із  $i$ -го вузла,  $\bar{s}_i$  - оператор спіна  $i$ -го вузла,

$$\bar{A}_{ij}^\gamma = \int \psi^*(r) [\nabla V^\gamma(r - R_j), \hat{p}] \psi(r) d\vec{r}, \quad V^\gamma \equiv \frac{\partial V}{\partial x_\gamma}.$$

Для визначення енергетичного спектра використано методику двочасових температурних функцій Гріна, рівняння для яких у матричній формі має вигляд

$$E\hat{G}_{ij} = I\delta_{ij} + \sum_n \hat{H}_{in}^{(0)}\hat{G}_{nj} + \hat{T}_i\hat{G}_{ij} \quad (2)$$

Тут усі матриці мають розмірність  $2 \times 2$ , а  $\hat{G}_{ij}$  - матриця функцій Гріна,  $\hat{T}_i$  - матриця проєкцій матричних елементів оператора спін-орбітальної взаємодії  $\vec{T}_i = \sum_{l,\gamma} u_l^\gamma \vec{A}_{i,l}^\gamma$ ,  $H_{ij}^{(0)}$  - матричні елементи оператора Гамільтона ідеального кристала,

Рівняння для спектра, одержане із розв'язку рівняння (2) в  $k$ -представленні і у наближенні квадратичному за зміщеннями має вигляд

$$E - H^0(q) - \sum(q, E) = 0, \quad (3)$$

$$\text{де } \sum(q, E) = \frac{\langle u^2 \rangle}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{(\vec{A}^\gamma(\vec{k}))^2}{E - H^{(0)}(\vec{k} - \vec{q})} - \text{поправка до спектра, яка відіграє ту}$$

ж роль, що і масовий оператор квантової теорії поля,  $H^{(0)}(\vec{k})$  і  $\vec{A}^\gamma(\vec{k})$  - Фур'є - трансформанти матричних елементів  $H_{ij}^{(0)}$  і  $\vec{A}_j^\gamma$ . А його розв'язок, одержаний в аналітичному вигляді для лінійного ланцюжка атомів і у числовій формі для простої кубічної ґратки, свідчить, що, у той час, коли слабка спін-орбітальна взаємодія у неупорядкованих твердих тілах змінює такі параметри спектра як ширина зони та ефективна маса, сильна спричиняє радикальнішу його перебудову, зокрема, деформацію закону дисперсії з появою точок перегину, зміщення екстремумів зон.

## БАГАТОЧАСТИНКОВІ КОРЕЛЯЦІЇ ТА ТЕМПЕРАТУРНА ЗАЛЕЖНІСТЬ ЕЛЕКТРООПОРУ ПРОСТИХ РІДКИХ МЕТАЛІВ

*Швець В.Т., Савенко С., Дацько С., Попряга М.  
Одеська державна академія холоду, Одеса, Україна  
E-mail: valtar@paco.net*

Для знаходження коефіцієнту електроопору використана теорія лінійної реакції Кубо і метод двочасових загаяних функцій Гріна. Електронна підсистема розглянута у моделі майже вільних електронів. При цьому електрон-електронна взаємодія враховувалась у рамках дифракційної моделі металу. Гамільтоніан електронної підсистеми містив лише один малий параметр - псевдопотенціал електрон-іонної взаємодії. Для оберненого часу релаксації  $\tau^{-1}$ , що характеризує електропровідність, побудований ряд теорії збурень за степенями зазначеного параметру. і отримані детальні вирази для членів другого і третього порядків: Член третього порядку за псевдопотенціалом був достатньо детально



дослідженням у наших попередніх працях. Чисельні розрахунки, виконані з використанням різних модельних локальних псевдо потенціалів, діелектричних проникностей електронного газу, наближень при розчепленні трьохчастинкового структурного фактора іонної підсистеми тощо показали, що член третього порядку при розрахунках електроопору є надзвичайно суттєвим для більшості простих неупорядкованих металів і становить від декількох відсотків до декількох десятків відсотків від члену другого порядку. Разом з тим, досі були відсутні переконливі розрахунки, які б свідчили, що врахування члену третього порядку покращує узгодження між експериментальними і теоретичними результатами. Причина полягала у тому, що у всіх зазначених вище розрахунках знаходилась лише відносна величина поправки третього порядку. Незаперечним аргументом на користь того, що врахування поправки третього порядку дійсно покращує узгодженість між експериментальними і теоретичними результатами отримані нами при розрахунках температурного коефіцієнту електроопору. З чисельних розрахунків випливає, що член другого порядку досить добре якісно описує поведінку коефіцієнту електроопору. При цьому практично завжди він дає занижене його значення. За результатами наших розрахунків член третього порядку як для електроопору, так і для температурного коефіцієнту електроопору є додатним і його врахування суттєво покращує теоретичний опис експериментальних даних. Чисельні розрахунки нами виконані для більшості простих неупорядкованих металів.

- [1] В.Т.Швець. Метод функцій Гріна в теорії металів. Латстар, Одеса (2002), с.400

### **СПЕЦИФІКА СТРУКТУРНИХ ПЕРЕТВОРЕНЬ В СИСТЕМІ $In_xTl_{1-x}J$**

*Довгий Я.О., Франів А.В., Тернавська С.В.*

*Львівський національний університет ім. Івана Франка, Львів, Україна*

Проблема твердої розчинності шаруватих кристалів тривалий час привертає увагу дослідників та технологів, оскільки шляхом зміни складу розчину вдається планомірно змінювати параметри матеріалу. При зміні вмісту талію у гратці  $In_xTl_{1-x}J$  нами вперше було виявлено утворення проміжної фази, яка характеризується специфічними характеристиками. Як показали рентгеноструктурні дослідження, точкова група  $D_{2h}^{17}$  при цьому не змінюється, тобто маємо справу з ізоструктурним фазовим переходом другого роду. В умовах невеликого вмісту талієвої компоненти утворюється типовий твердий розчин заміщення з плавною залежністю від

x параметрів ґратки. З подальшим збільшенням вмісту Тl відбуваються якісні зміни у способі входження іонів талію у ґратку  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{J}$ . Оскільки радіуси  $\text{Tl}^+$  (1.45Å) більші від радіусів  $\text{In}^+$  (1.3Å), спостерігається розрив твердої розчинності при іонному заміщенні у сандвічних шарах [1]. Частина іонів талію заміщає індій в шарах, а частина входить у міжшаровий простір, сприяючи “металізації” хімічних зв'язків. Вивчення концентраційних залежностей параметрів ґратки показали, що фактор видозміни  $\eta=(c-a)/b$  елементарної комірки зі збільшенням талію постійно зростає [2]. Однак це зростання не монотонне, а при  $(1-x)\approx 0.3$  на кривій виникає злам, а на дифрактограмах з'являються додаткові рефлекси.

Ще одним якісним підтвердженням збільшення концентрації вільних носіїв є збільшення фонового поглинання на довжині генерації  $\text{CO}_2$ -лазера ( $\lambda=10.6\mu\text{m}$ ).

Вперше виявлена нами ізоструктурна фаза є проміжною фазою, область існування якої визначається, як фактором геометричного ізоморфізму, так і особливостями структури зонних спектрів компонент. Як показують експериментальні та теоретичні дослідження, InJ є непрямоzonним напівпровідником, а TlJ- прямоzonним. Цим зумовлюється суттєва відмінність комбінованих функцій щільності станів. В області  $E\approx E_g$  ці функції для окремих компонент відрізняються структурою, а також типом сингулярності Ван-Гова. Цей фактор, що пов'язаний з особливостями топології ізоенергетичних поверхонь, згідно з узагальненою концепцією Юм-Розері, обмежуватиме область твердої розчинності [3].

Враховуючи суттєву роль зонних носіїв, виникнення стану проміжного перевпорядкування може бути кваліфіковане як фазове перетворення, зумовлене конфігураційними взаємодіями та гібридизацією зонних станів.

- [1] Dovhyi Ya.O., Franiv A.V., Ternavska S.V. Izostructural phase transition in  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{J}$  system // Ukr. J.Phys. Opt.– 2001.– vol.2, №3.– P.141–147.
- [2] Довгий Я.О., Тернавська С.В., Франів А.В. Явище автоінтеркаляції у шаруватих кристалах  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{J}$ // Український фізичний журнал.– 2002.- №1.– С.46-50.
- [3] Довгий Я.О., Тернавська С.В., Франів А.В. Фононні спектри твердих розчинів заміщення  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{J}$ // Фізичний збірник НТШ. –2002.–Т.5.– С.206–236.

## РОЗРАХУНОК ПАРАМЕТРІВ МІЖАТОМНИХ ПОТЕНЦІАЛІВ ДВОКОМПОНЕНТНИХ СИСТЕМ ЗА ДОПОМОГОЮ МЕТОДУ ДОВГИХ ХВИЛЬ

Кнігініцький О.В.

Львівський національний університет ім. Івана Франка, Львів, Україна

E-mail: knih@kthfranko.lviv.ua

При дослідженнях властивостей неупорядкованих систем атомів важливими є уявлення про те, як взаємодіють між собою окремі атоми чи кластери, котрі є структурними елементами в певній обраній моделі. Така інформація не завжди є однозначною та достатньою мірою точною, що серед інших причин зумовлює існування великої кількості методів, зокрема, у теоретичних розрахунках. Деякі з таких методів використовують припущення, що у межах певної кількості координатних сфер взаємодію між атомами наближено можна вважати такою ж, як у періодичних структурах, доповнюючи її певним впливом неупорядкованості. У зв'язку з цим пропонується спосіб розрахунку параметрів потенціалів міжатомної взаємодії на основі наближення довгих хвиль у динамічній теорії кристалічної ґратки, яке дає змогу встановити зв'язок між мікро- та макроскопічними характеристиками сукупності атомів та твердого тіла в цілому. У даному наближенні від рівнянь руху атома сорту  $k$  в елементарній комірці  $l$ :

$$m_k u_\alpha \begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix} = - \sum_{l'k'} \Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} l & l' \\ k & k' \end{pmatrix} u_\beta \begin{pmatrix} l' \\ k' \end{pmatrix} \quad (1)$$

де  $u_\alpha(\dots)$  – відхилення атома від положення рівноваги,  $\Phi_{\alpha\beta}(\dots)$  – силові константи, можна перейти [1] до сукупності рівнянь, які пов'язують між собою пружні модулі кристалу та міжатомні силові константи. Доповнюючи цю сукупність умовами, які повинна задовільняти потенціальна енергія кристалу, отримуємо систему рівнянь (у найпростішому випадку лінійних), розв'язуючи котру, можна одержати міжатомні силові константи чи, в залежності від обчислювальної схеми, параметри потенціалів взаємодії між атомами. Вихідними величинами при цьому будуть пружні постійні. Використовуючи даний підхід, розраховано параметри двочастинкового потенціалу міжатомної взаємодії у двосортній кубічній ґратці типу  $NaCl$  для перших та других найближчих сусідів. Ці дані можна використовувати як початкове наближення при розрахунках у неупорядкованих системах.

[1] М. Борн, Х. Кунь, Динамическая теория кристаллических решеток (ИЛ, Москва, 1958).