

ГУСТИНИ СТАНІВ НЕВПОРЯДКОВАНИХ МЕТАЛІВ У МЕТОДІ ТЕОРІЇ РОЗСІЯННЯ

П. М. Якібчук, О. В. Волков, С. О. Вакарчук

*Львівський національний університет імені Івана Франка,
кафедра фізики металів, вул. Кирила і Мефодія, 8, Львів, 79005, Україна*

(Отримано 6 травня 2004 р.)

Запропоновано метод визначення густини станів, що базується на формалізмі T -матриці, згідно з яким густина станів електронів провідності виражається через аргумент конфігураційно засередненої T -матриці розсіяння електронів на йонній підсистемі непорядкованого металу. Для знаходження T -матриці розсіяння використано наближення слабкого зв'язку та розклад за парціальними складовими. Парціальні фазові зсуви розсіяння електрона на окремому йоні металу розраховано з використанням рівнянь Ліпмана–Швінгера для парціальних складових розсіяної хвильової функції. Електрон-йонну взаємодію описано нелокальним модельним потенціалом, а структурний фактор непорядкованого металу визначено в наближенні твердих сфер за моделлю Перкуса–Євіка.

Ключові слова: густина станів, фазові зсуви, модельний потенціал, псевдоцилина.

PACS number(s): 43.38.Kw

ВСТУП

Розрахунки електронних характеристик непорядкованих металів пов'язані з низкою проблем. По-перше, через відсутність дальнього порядку в йонній підсистемі не можна використовувати методи трансляційної симетрії, що добре зарекомендували себе в зонній теорії кристалічних твердих тіл. По-друге, унаслідок відсутності чітких зон в енергетичній структурі непорядкованого металу залежність енергії електрона провідності від хвильового вектора k не можна використовувати як характеристичну функцію такої системи [1]. Отже, енергетична структура таких систем описується залежністю густини станів від енергії $N(E)$.

Як відзначено у праці [2], теорія збурень Бріллюена–Вігнера за псевдопотенціалом у третьому порядку добре описує властивості металів з низькими валентностями, але вже для металів з валентностями III або більшими існує лише якісна збіжність. У свою чергу варіаційні розрахунки густини станів сильно залежать від вибору пробних функцій. У цьому підході зроблено спробу отримати аналітичні вирази для визначення характеристик непорядкованих систем, що мають загальніший характер порівняно з результатами теорії збурень Релея–Шредингера та Бріллюена–Вігнера [3]. Проте ці методи є придатними для дослідження металічних систем без урахування квазізв'язаних (резонансних) станів, тобто без урахування особливостей електронної будови d - та f -перехідних металів.

Метою нашої роботи є розробка загальнішого методу розрахунку густини станів непорядкованого металу, який був би позбавлений недоліків, властивих указаним методам.

Показавши, що метод T -матриць Ллойда–Займана можна узагальнити на багатовузловий випадок, ми

отримали новий вираз для густини станів електронів провідності в непорядкованому металі. При цьому використання T -матриці замість потенціалів електрон-йонної взаємодії дає змогу застосувати цей підхід до систем із резонансними потенціалами. Зауважмо, що в межах такого методу отримуємо пряму залежність густини станів від енергії електронів у зоні провідності і це дозволяє уникнути зонних розрахунків.

I. ГУСТИНА СТАНІВ ТА T -МАТРИЦЯ РОЗСІЯННЯ НЕВПОРЯДКОВАНОГО МЕТАЛУ

Як відомо [4], густину станів електронів провідності в непорядкованому металі можна зобразити через уявну частину повної функції Гріна цієї системи, засередненої за всіма можливими конфігураціями.

$$N(E) = -\frac{2}{\pi} \text{Sp Im} \langle G^{\pm}(E, k) \rangle_{\text{conf}}. \quad (1)$$

Зазначимо, що необхідність проведення засереднення за конфігураціями зумовлена розупорядкованістю йонної підсистеми рідкого або ж аморфного металу [1].

Проінтегрувавши за енергією вираз для густини електронних станів (1), визначимо кількість електронних станів у металі в діапазоні енергій від 0 до E :

$$\aleph_E = \int_0^E N(E) dE. \quad (2)$$

Формально повну функцію Гріна можна виразити че-

рез гамільтоніан системи \hat{H} , що описує взаємодію електрона провідності з просторово непорядкованою системою йонів металу:

$$G^\pm(E, k) = (E - \hat{H})^{-1} = (E - \hat{H}_0 - \hat{W})^{-1}, \quad (3)$$

де \hat{H}_0 — вільноелектронний гамільтоніан, а $\hat{W}(\mathbf{r}) = \sum \hat{w}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ — потенціал електрон-йонної взаємодії в металі.

Урахувавши співвідношення (1)–(3), для \aleph_E одержуємо такий вираз:

$$\aleph_E = \frac{2}{\pi} \text{Sp} \text{Im} \text{Ln} (E - \hat{H}_0 - \hat{W}) + \text{const.} \quad (4)$$

Цей вираз можна розкласти на складові та визначити з нього густину станів

$$N(E) = \frac{d\aleph_E}{dE} = -\frac{2}{\pi} \text{Sp} \text{Im} G_0(E, k) + \frac{2}{\pi} \text{Sp} \text{Im} \frac{d}{dE} \text{Ln} (1 - G_0(E, k) \hat{W}), \quad (5)$$

де $G_0(E, k) = (E - \hat{H}_0)^{-1}$ — вільноелектронна функція Гріна.

З іншого боку, використавши рівняння Ліпмана–Швінгера [5] для хвильової функції розсіяної частинки на потенціалі W

$$\varphi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = \phi_k(\mathbf{r}) + G_0(E) \hat{W}(\mathbf{r}) \varphi_k^{(+)}(\mathbf{r}) \quad (6)$$

та співвідношення для амплітуди розсіяння електрона

$$f(\theta) = -\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \langle \phi_{k'} | \hat{W} | \varphi_k^{(+)} \rangle = -\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \langle \phi_{k'} | \hat{T}(E) | \phi_k \rangle, \quad (7)$$

можна записати інтегральне рівняння, що пов'язує між собою T -матрицю розсіяння та потенціал, на якому воно відбувається:

$$\hat{T} = \hat{W} + \hat{W} G_0 \hat{T}. \quad (8)$$

У виразах (6) та (7) $\phi_k(\mathbf{r})$ — хвильова функція падаючої частинки, а $\varphi_k^\pm(\mathbf{r})$ — хвильова функція розсіяння.

Зауважимо, що, згідно з виразом (1.8), $1 - \hat{W} G_0 = \hat{W} \hat{T}^{-1}$. Тому з рівняння (5) знаходимо

$$N(E) = N_0(E) - \frac{2}{\pi} \text{Sp} \frac{d}{dE} \text{Im} \langle \text{Ln} \hat{T}(E) \rangle_{\text{conf}}, \quad (9)$$

де $N_0(E)$ — густина станів вільних електронів.

На підставі рівняння Дайсона для функції Гріна та розкладі T -матриці в ряд за потенціалом можна показати, що існує можливість перенесення конфігураційного усереднення під логарифм. Отже, з (9) для густини станів отримаємо

$$N(E) = N_0(E) - \frac{2}{\pi} \text{Sp} \frac{d}{dE} \text{Im} \text{Ln} \langle \hat{T}(E) \rangle_{\text{conf}}, \quad (10)$$

Оскільки уявною частиною логарифма комплексного числа є аргумент цього числа, то:

$$N(E) = N_0(E) - \frac{2}{\pi} \text{Sp} \frac{d}{dE} \text{Arg} \langle \hat{T}(E) \rangle_{\text{conf}}. \quad (11)$$

Розсіяння електрона провідності на непорядкованій підсистемі йонів металу аналогічне до розглянутого в теорії розсіяння процесу розсіяння окремої частинки на мішені з багатьох частинок, які якісно відрізняються від розсіяної частинки. Унаслідок малости співвідношення мас електрона та йонів ефектами віддачі можна знехтувати, а малість кінетичної енергії електронів провідності (порівняно з енергією йонізації) дозволяє використовувати імпульсне наближення, тобто вважати процес розсіяння пружним [6].

Відомо [5], що T -матриця розсіяння частинки на багаточастинковій мішені має вигляд:

$$\hat{T}(E) = \sum_i \hat{T}_i(E) \hat{\Omega}_i(E), \quad (12)$$

де $\hat{T}_i(E)$ — T -матриця розсіяння електрона на окремому йоні металу, а $\hat{\Omega}_i(E)$ — оператор, що визначає внесок i -ого центра в процес розсіяння. Він визначається з такого рівняння [6]:

$$\hat{\Omega}_i(E) = 1 + \hat{G}_0(E) \sum_{i \neq j} \hat{T}_j(E) \hat{\Omega}_j(E). \quad (13)$$

Якщо врахувати, що $\hat{W}(\mathbf{r}) = \sum \hat{w}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$, то рівняння (12) та (13) отримуються з інтегрального рівняння для T -матриці (8). Такий запис T -матриці розсіяння враховує й багаторазове розсіяння, проте у випадку непорядкованих систем з малим (щодо довжини хвилі розсіяного електрона) кореляційним радіусом можна застосувати наближення слабкого зв'язку і знехтувати багаторазовим розсіянням. У цьому наближенні T -матрицю непорядкованого металу можна записати так:

$$\hat{T}(E) = \sum_j \hat{T}_{\text{single}}(E) \delta^3(\mathbf{r}_j), \quad (14)$$

де $\hat{T}_{\text{single}}(E)$ — T -матриця окремого йона. Отже T -матрицю розсіяння системи можна знайти зі співвідношення (14), якщо відомі T -матриці розсіяння окремих йонів металу та просторовий розподіл йонів у

непорядкованому металі.

Зуважимо, що аргумент T -матриці можна записати так:

$$\text{Arg} \langle \hat{T}(E) \rangle_{\text{conf}} = \arctg \left(\frac{\text{Im} \langle \hat{T}(E) \rangle_{\text{conf}}}{\text{Re} \langle \hat{T}(E) \rangle_{\text{conf}}} \right) + \pi N. \quad (15)$$

Оскільки T -матриця не залежить від \mathbf{r} , а є лише функцією енергії, то

$$\langle \hat{T}(E) \rangle_{\text{conf}} \rightarrow C(k) \times \{ \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | T(E) | \mathbf{k} \rangle_{\text{conf}} \}_{\text{ang}}, \quad (16)$$

де $C(k)$ — дійсна величина, ang означає засереднення за кутовими координатами, а conf — конфігураційне

засереднення.

Об'єднавши вирази (14)–(16) та ввівши позначення:

$$\rho_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_i},$$

отримаємо:

$$\begin{aligned} \text{Arg} \langle \hat{T}(E) \rangle_{\text{conf}} &= \text{Im} \text{Ln} \langle \hat{T}(E) \rangle_{\text{conf}} \\ &= \text{Im} \text{Ln} \{ \rho_q \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | T_{\text{single}}(E) | \mathbf{k} \rangle \}_{\text{ang}}. \end{aligned} \quad (17)$$

Оскільки ймовірність існування всіх дозволених просторових конфігурацій йонної підсистеми є однаковою, то:

$$\begin{aligned} \text{Arg} \langle \hat{T}(E) \rangle_{\text{conf}} &= \frac{1}{2} \text{Im} \left(\text{Ln} \rho_q \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | T_{\text{single}}(E) | \mathbf{k} \rangle \right. \\ &\quad \left. + \text{Ln} \rho_{-q} \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | T_{\text{single}}(E) | \mathbf{k} \rangle \right) = \frac{1}{2} \text{Im} \text{Ln} S_q \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | T_{\text{single}}(E) | \mathbf{k} \rangle^2, \end{aligned} \quad (18)$$

де $S_q = \langle \rho_q \rho_{-q} \rangle_{\text{conf}}$ — структурний фактор непорядкованого металу [7].

Ураховуючи, що потенціал електрон-йонної взаємодії є центрально-симетричним, для знаходження T -матриці розсіяння окремого йона використаємо розклад хвильової функції за парціальними хвилями [6]. Тоді

$$\langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | T_{\text{single}}(E) | \mathbf{k} \rangle = \frac{4\pi}{V_0 \sqrt{2E}} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l(E)} \sin \delta_l(E) P_l(\cos \theta), \quad (19)$$

де V_0 — атомний об'єм металу, $\delta_l(E)$ — парціальний фазовий зсув, а θ — кут між векторами \mathbf{k} та $\mathbf{k} + \mathbf{q}$.

З парціального розкладу рівняння Ліпмана–Швінгера [5] отримаємо інтегральне рівняння для парціальних радіальних складових хвильової функції розсіяного електрона:

$$R_l^{(+)}(\kappa, r) = j_l(\kappa r) + 2\kappa n_l(\kappa r) \int_0^r j_l(\kappa r') w_l(r') R_l^{(+)}(\kappa, r') r'^2 dr' + 2\kappa j_l(\kappa r) \int_r^\infty n_l(\kappa r') w_l(r') R_l^{(+)}(\kappa, r') r'^2 dr', \quad (20)$$

де $w_l(r')$ — парціальна складова потенціалу електрон-йонної взаємодії окремого йона, а $\kappa = \sqrt{2E}$.

Беручи до уваги асимптотичний розв'язок рівняння (16) при $r \rightarrow \infty$,

$$R_l^{(+)}(\kappa, r \rightarrow \infty) = j_l(\kappa r) - \text{tg} \delta_l(\kappa) n_l(\kappa r),$$

й умову зшиття асимптотичного та внутрішнього розв'язків поблизу радіуса дії потенціалу,

$$\frac{\partial R_l^{(+)}(\kappa, r \rightarrow \infty)}{R_l^{(+)}(\kappa, r \rightarrow \infty) \partial r} = \frac{\partial [j_l(\kappa r) - \text{tg} \delta_l(\kappa) n_l(\kappa r)]}{[j_l(\kappa r) - \text{tg} \delta_l(\kappa) n_l(\kappa r)] \partial r} \Big|_{r \rightarrow \infty},$$

фазовий зсув можна записати так [6]:

$$\delta_l(\kappa) = \arctg \left(\frac{j_l(\kappa R_{\text{core}}) - R_l^{(+)}(R_{\text{core}})}{n_l(\kappa R_{\text{core}})} \right), \quad (21)$$

де R_{core} — радіус дії потенціалу.

Отже, розв'язавши рівняння (20), можна, згідно з (21), знайти парціальні фазові зсуви та побудувати T -матрицю розсіяння окремого йона (19).

Узагальнюючи попередні вирази для визначення функції розподілу густини станів неупорядкованого металу в межах теорії розсіяння, об'єднаймо співвідношення (8), (18) та (19). Тоді, враховуючи вираз для вільноелектронного наближення густини станів $N_0(E) = V_0\sqrt{2E}/\pi^2$, одержимо:

$$N(E) = \frac{V_0\sqrt{2E}}{\pi^2} - \frac{1}{\pi} \frac{d}{dE} \arctg \left[\frac{\{S_q [\operatorname{Re} T(E, q)^2 - \operatorname{Im} T(E, q)^2]\}_\theta}{\{2S_q \operatorname{Im} T(E, q) \operatorname{Re} T(E, q)\}_\theta} \right], \quad (22)$$

де

$$\operatorname{Im} T(E, q) = \sum_l (2l+1)(2l+1) \sin 2\delta_l(\kappa) P_l(\cos \theta)|_{\kappa=\sqrt{2E}},$$

$$\operatorname{Re} T(E, q) = \sum_l (2l+1)(1 - \cos 2\delta_l(\kappa)) P_l(\cos \theta)|_{\kappa=\sqrt{2E}}.$$

Тут потрібно врахувати, що при пружному розсіянні на еквіпотенціальній поверхні $|\mathbf{k} + \mathbf{q}| = |\mathbf{k}| = \kappa = \sqrt{2E}$, а $\cos \theta = 1 - q^2/2\kappa^2$ та $q \in [0, 2\kappa]$.

Потрібне значення енергії Фермі визначали з умови:

$$Z = \int_0^{E_F} N(E) dE, \quad (23)$$

тут Z — валентність йона.

Густина заповнених електронами провідності станів при температурі T визначається:

$$N_T(E) = \frac{N(E)}{1 + e^{\frac{E-E_F}{k_B T}}}. \quad (24)$$

Потрібний для розрахунків потенціал електрон-йонної взаємодії будемо апроксимувати нелокальним модельним потенціалом (МП)[8]:

$$w^{(0)}(r) = -\frac{Z}{r} + \sum_l e^{-\frac{r}{R_l}} \left(\frac{Z}{r} + A_l \right) P_l, \quad (25)$$

тут A_l, R_l — параметри МП, а P_l — проєкційний оператор.

У [8] наведено вираз для екранованого формфактора такого МП, який ураховує нелокальність електрон-йонної взаємодії.

$$w(q) = -\frac{4\pi Z}{q^2 V_0 \epsilon^*(q)} + f(k, q) - \left(1 - \frac{\varphi(q)}{\epsilon^*(q)} \right) \frac{4}{\pi q^3 \epsilon(q)} \int_0^{k_F} f(k, q) \ln \left| \frac{k-2q}{k+2q} \right| k dk. \quad (26)$$

Тут уведено позначення:

$$f(k, q) = \frac{4\pi}{V_0} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) P_l(\cos \theta) \times \int_0^\infty e^{-\frac{r}{R_l}} \left(\frac{Z}{r} + A_l \right) j_l(kr) j_l(|\mathbf{k} + \mathbf{q}|r) r^2 dr, \\ \epsilon(q)^* = 1 - (1 - \varphi(q))(\epsilon(q) - 1),$$

де $\varphi(q)$ — поправка на локальне поле, а $\epsilon(q)$ — діелектрична проникність металу.

Отриманий унаслідок нелокальності формфактор має вигляд

$$w(k, q) = \int_0^\infty K(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, r) W(r) dr,$$

де $K(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, r)$ — ядро інтегрального перетворення (слід зауважити, що через наявність у потенціалі проєкційного оператора інтегральне перетворення не буде перетворенням Фур'є).

Потенціал електрон-йонної взаємодії знаходять з формфактора зворотним інтегральним перетворенням. Екранований потенціал доцільно записати у вигляді

$$w(r) = w^{(0)}(r) + w^{\text{screen}}(r),$$

де $w^{\text{screen}}(r)$ — екрануюча складова.

У такому разі екрануючим внеском у формфактор з (26) буде:

$$w^{\text{screen}}(q) = \frac{4\pi Z(\epsilon^*(q) - 1)}{q^2 V_0 \epsilon^*(q)} - \left(1 - \frac{\varphi(q)}{\epsilon^*(q)} \right)$$

$$\times \frac{4}{\pi q^3 \epsilon(q)} \int_0^{k_F} f(k, q) \ln \left| \frac{k-2q}{k+2q} \right| k dk. \quad (27)$$

$$+ \frac{V_0}{2\pi^2} \int_0^\infty w^{\text{screen}}(q) q^2 \frac{\sin(qr)}{qr} dq. \quad (28)$$

Очевидно, що екрануюча складова формфактора має локальний характер (немає залежності від k), тому для знаходження $w^{\text{screen}}(r)$ можна використати зворотнє фур'є-перетворення.

Розрахувавши екрануючу складову формфактора МП, отримаємо потрібний нам вираз для парціальних складових екранованого потенціалу електрон-йонної взаємодії в металі, що використовується при розрахунку парціальних фаз розсіяння згідно з (20):

$$w_l(r) = -\frac{Z}{r} + e^{-\frac{r}{R_l}} \left(\frac{Z}{r} + A_l \right)$$

II. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Розраховані за формулами (22)–(24) густини заповнених станів $N_T(E)$ при температурах, близьких до температур плавлення, для низки металів наведено на рис. 1. Суцільна лінія відповідає на графіках розрахункові за теорією розсіяння, штрихова — вільно-електронному наближенню.

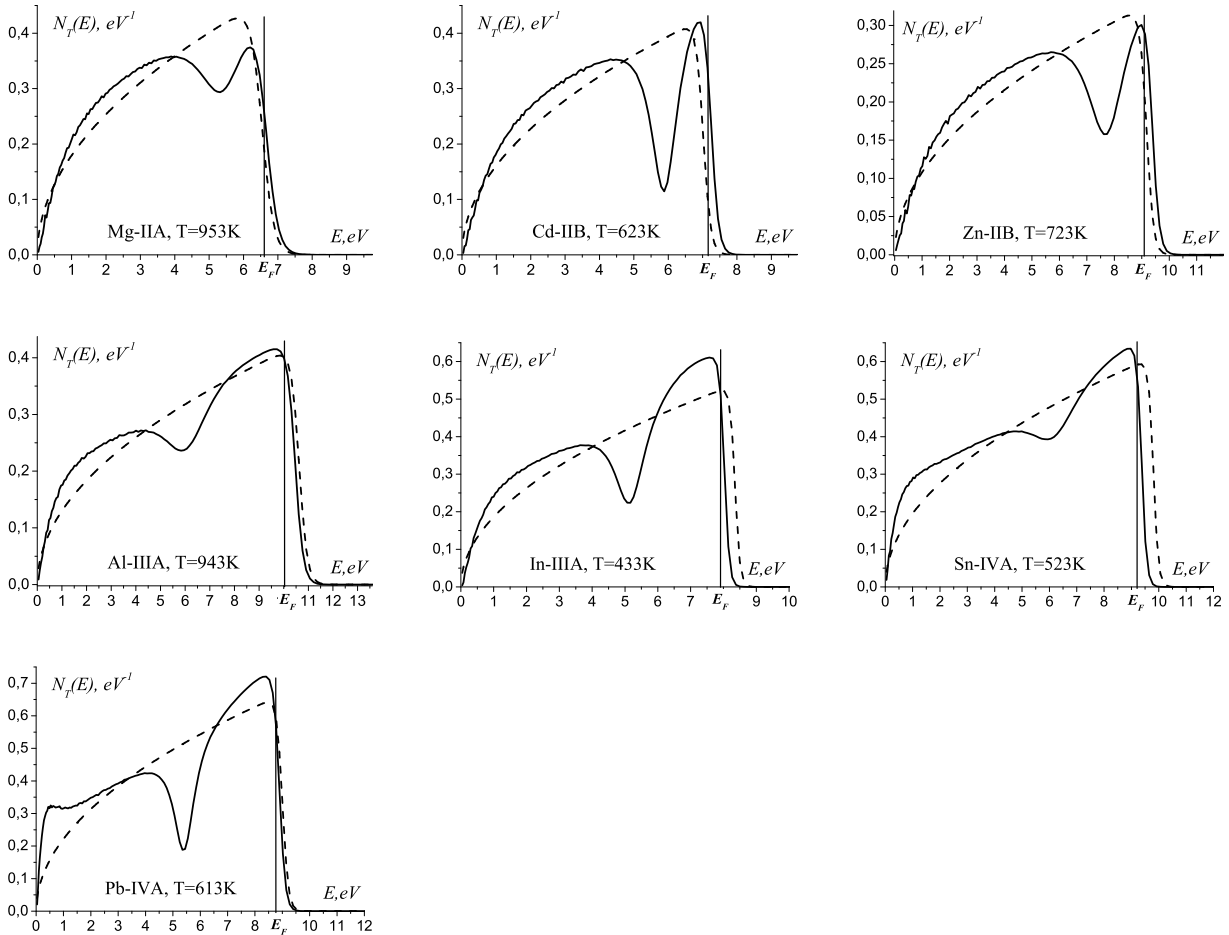


Рис. 1. Густина станів непорядкованих металів.

Для опису структури непорядкованого металу використано теоретичні структурні фактори моделі твердих сфер Ашкрофта–Лекнера, значення параметрів упакування якого наведено разом з параметрами модельного потенціалу в таблиці 1. Обмінно-

кореляційні ефекти враховано за допомогою поправки на локальне поле, взятої в наближенні Гелдарт–Воско. Згідно з [4], одновалентні метали групи IA мають найпростішу зонну структуру, й електронні характеристики таких металів задовільно описуються в

межах вільноелектронного наближення (графіки залежностей $N_T(E)$ для цих металів не наведені). Вільноелектронний характер залежності густини станів від енергії зумовлений особливостями просторового розподілу йонної підсистеми таких металів. У кристалічному стані сфера Фермі таких металів лежить у середині першої зони Бріллюена, внаслідок чого ефекти, пов'язані з перекриттям різних зон, не спостерігаються. У неупорядкованому стані бачимо подібну картину. Тут визначальну роль в утворенні псевдощільни відіграють положення першого максимуму структурного фактора та положення точки перетину ефективної фази значень, кратних π , тобто положення псевдозв'язаного стану [9]. В одновалентних металах перший пік структурного фактора $S(q)$ перебуває в точці $q_{\max} > 2k_F$, що приводить до розміщення псевдощільни далеко поза сферою Фермі і значного зменшення її величини.

Метал	η	A_0	A_1	A_2	R_0	R_1	R_2
Mg	0.45	3.982	5.086		0.608	0.485	
Al	0.45	7.025	9.5		0.514	0.404	
Zn	0.45	5.262	7.7106	6.1973	0.4622	0.3233	0.3872
Cd	0.45	4.714	6.4759	4.4018	0.516	0.3835	0.5444
In	0.45	6.940	8.2521	6.6431	0.522	0.4458	0.5444
Pb	0.45	8.878	9.1264	5.0671	0.588	0.5252	0.8968
Sn	0.45	9.485	10.625	9.4969	0.506	0.4582	0.5078

Таблиця 1. Щільність упакування η та параметри МП.

У двовалентних металах груп ІА та ІВ максимум структурного фактора розташований у точці $q_{\max} \simeq 2k_F$, що зумовлює наявність псевдощільни на кривій густини станів поблизу енергії Фермі.

Для металів груп ІІА та ІІІА пік структурного фактора перебуває в точці $q_{\max} < 2k_F$. Тому псевдощільни є ближче до 0 енергії, ніж у ІІ-валентних металах. Це можна пояснити аналогічно до попередніх випадків.

ІІІ. ВИСНОВКИ

Якісний аналіз одержаних результатів свідчить, що метод розрахунку густини станів у межах теорії розсіяння приводить до результатів, які дають змогу теоретично визначити енергетичну структуру неупорядкованих неперехідних металів.

Варто зауважити, що, внаслідок використання апарату T -матриць, такий метод розрахунку густини станів можна легко поширити на перехідні метали, які характеризуються наявністю квазізв'язаних станів у зоні провідності. Подібний метод можна застосувати й до розрахунку аналогічних величин для рідких напівпровідників.

Двокомпонентні металічні сплави в межах цього методу вимагають інформацію про парціальні структурні фактори, залишаючи саму процедуру повністю аналогічною до однокомпонентного випадку. Урахування динамічних властивостей йонної підсистеми та їхній вплив на енергетичну структуру можна провести за допомогою динамічних структурних факторів.

Наведеним узагальненням розглянутої теорії та з'ясування проблем, пов'язаних з цим, будуть присвячені наступні роботи.

-
- [1] О. Маделунг, *Теория твёрдого тела* (Наука, Москва, 1980).
 - [2] Н. Мотт, *Электроны в неупорядоченных структурах* (Мир, Москва, 1969).
 - [3] С. А. Вакарчук, П. Н. Якибчук, *Укр. физ. журн.* **29**, 1272 (1984).
 - [4] Дж. Займан, *Принципы теории твёрдого тела* (Мир, Москва, 1974).
 - [5] С. Сунакава, *Квантовая теория рассеяния* (Мир, Москва, 1979).
 - [6] К. М. Goldberg, J. T. Watson, *Collision theory* (John Willey and Sons Inc, New York, 1963).
 - [7] N. W. Ashcroft, J. Lekner, *Phys. Rev. Lett.* **145**, 83 (1965).
 - [8] С. А. Вакарчук, П. Н. Якибчук, В. В. Фурман, *Физ. многочастичных систем* **15**, 27 (1989).
 - [9] Л. И. Ястребов, А. А. Кацнельсон, *Основы одноэлектронной теории твёрдого тела* (Наука, Москва, 1984).

DENSITY OF STATES OF DISORDERED METALS WITHIN SCATTERING THEORY

P. M. Yakibchuk, O. V. Volkov, S. O. Vakarchuk
*Ivan Franko National University of Lviv, Department for Physics of Metals,
8 Kyrylo i Mefodii St., Lviv, UA-79005, Ukraine
E-mail: wwwolch@icqmail.com*

Here we present the method based on formal solutions of T -matrix scattering theory. Within this approach the density of states can be presented as some function of T -matrix that describes the scattering processes of electron in the conduction band of disordered metal averaged over configuration. We use weak bond approximation and partial wave approach to get T -matrix. We get partial phase shifts from the partial mode of the Lippmann–Schwinger equation for scattered wave function where electron–ion interaction is described by a non-local model potential and we use the Percus–Yevick hard sphere model for the structure factor.