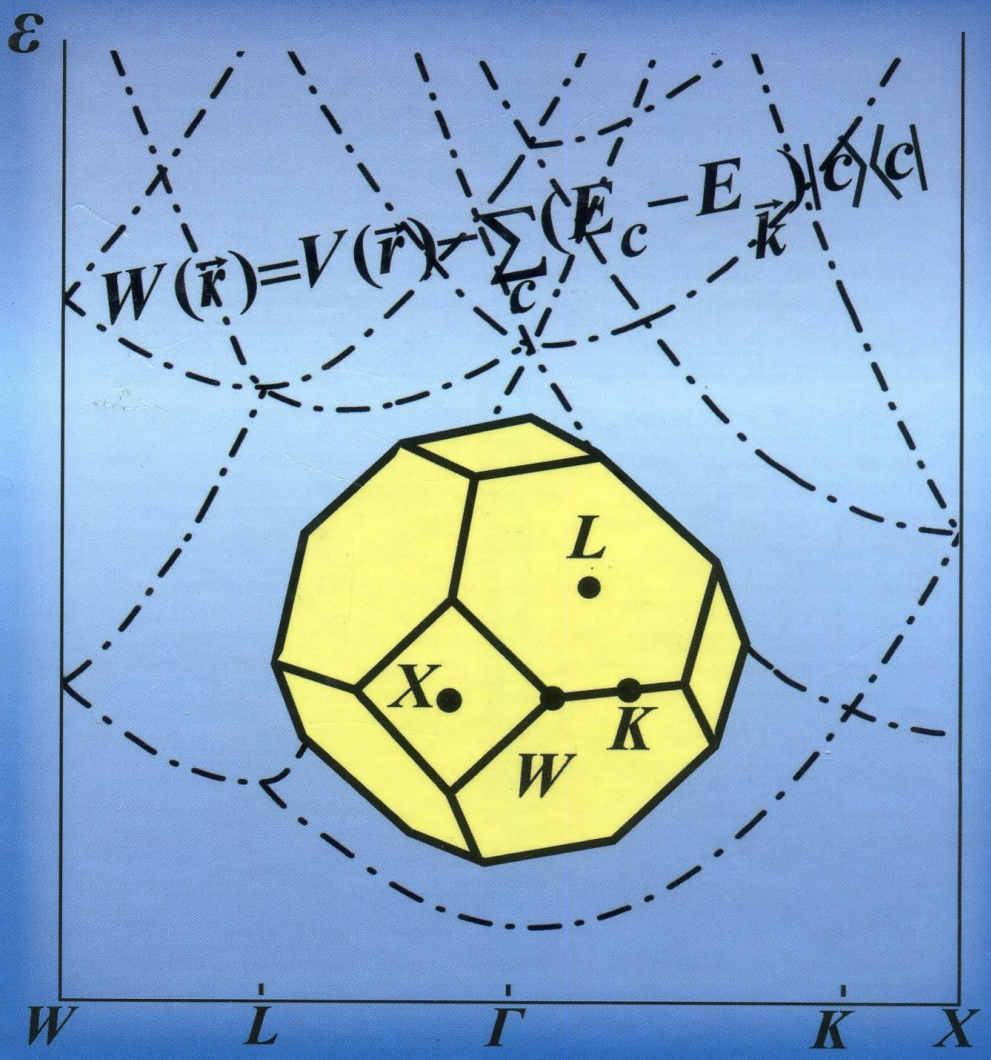
П. М. Якібчук, В. Т. Швець

МОДЕЛЬНІ МЕТОДИ У ФІЗИЦІ МЕТАЛІВ



Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України
Львівський національний університет імені Івана Франка

П. М. Якібчук, В. Т. Швець

Модельні методи у фізиці металів

Монографія

Львів
2012

УДК 538.9.01
ББК В 378
Я 45

Рецензенти:
д-р фіз.-мат. наук, проф. *С. В. Козицький*
(Національна морська академія, м. Одеса);
д-р фіз.-мат. наук, проф. *П. П. Кострубій*
(Національний університет «Львівська політехніка»);
д-р фіз.-мат. наук, проф. *Ю. П. Красний*
(Міжнародний гуманітарний університет, м. Одеса);
д-р фіз.-мат. наук, проф. *М. В. Токарчук*
(ІФКС НАН України, м. Львів)

Рекомендовано Вченою Радою
Львівського національного університету
імені Івана Франка
(протокол № 34/11 від 16.11.2011 р.)

Якібчук П. М.
Я 45 Модельні методи у фізиці металів : монографія / П. М. Якібчук, В. Т. Швець. – Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. – 652 с.

ISBN 978-966-613-960-6.

Розглянуто широке коло питань, пов'язаних із застосуванням традиційних методів розрахунку зонної структури твердих тіл: метод лінійної комбінації атомних орбіталей, метод комірок, метод приєднаних плоских хвиль, метод плоских, ортогоналізованих та повністю ортогоналізованих плоских хвиль тощо. Детально розглянуто метод псевдопотенціалу та модельного потенціалу (МП), проаналізовані й МП, які широко застосовують для дослідження властивостей металів і сплавів. Особливу увагу акцентовано на побудові та розрахунку нового нелокального МП та його використання в дослідженні електронних і атомних властивостей металів. Предметом розгляду монографії є також властивості електронної та іонної підсистем металу, розглянуто також електронні явища переносу.

УДК 538.9.01
ББК В 378

© Якібчук П.М., Швець В.Т., 2012
© Львівський національний університет імені Івана Франка, 2012

ISBN 978-966-613-960-6

ЗМІСТ

ПЕРЕДМОВА 7

РОЗДІЛ 1. Метод модельних потенціалів у теорії металів 13
§ 1.1. Методи розрахунку зонної структури твердих тіл 13
1.1.1. Наближення самоузгодженого поля 13
1.1.2. Модель майже вільних електронів 19
1.1.3. Наближення сильного зв'язку 25
1.1.4. Метод лінійної комбінації атомних орбіталей (ЛКАО) 28
1.1.5. Метод комірок 33
1.1.6. Метод приєднаних плоских хвиль 37
1.1.7. Метод функції Гріна 42
1.1.8. Метод плоских хвиль 45
1.1.9. Метод ортогоналізованих плоских хвиль 47
1.1.10. Метод повністю ортогоналізованих плоских хвиль 50
§ 1.2. Метод функціоналу густини 54
1.2.1. Наближення Томаса–Фермі 54
1.2.2. Наближення для функціонала густини 58
1.2.3. Самоузгоджені рівняння Кона–Шема 64
1.2.4. Модифікований статистичний метод 67
§ 1.3. Метод модельних потенціалів у теорії металів 75
1.3.1. Формалізм методу псевдопотенціалу 75
1.3.2. Розрахунок псевдопотенціалів з «перших принципів» 78
1.3.3. Метод модельних потенціалів у теорії металів 84
1.3.4. МП, що зберігають норму 101
1.3.5. Побудова та обчислення матричних елементів 104
§ 1.4. Побудова та розрахунок нелокального модельного потенціалу 113
1.4.1. Обґрунтування вибору моделі 113
1.4.2. Визначення параметрів МП 116
1.4.3. Розрахунок параметрів МП за допомогою теорії розсіювання 120
1.4.4. Визначення формфакторів екранованого МП 128
1.4.5. Дослідження нелокальних властивостей МП 136
Список використаної літератури 141

РОЗДІЛ 2. Формування методу модельних потенціалів для перехідних та рідкісноземельних металів 149
§ 2.1. Сучасний стан теорії псевдопотенціалу для перехідних металів ... 149
§ 2.2. Псевдопотенціал у методі фазових функцій. Зв'язок між амплітудою розсіяння і формфактором псевдопотенціалу 158
§ 2.3. Побудова нелокального модельного потенціалу перехідних та рідкісноземельних металів з використанням базису ПОПХ 162
§ 2.4. Врахування спін-орбітальної взаємодії 182
§ 2.5. Вплив некулонівської частини МП на зміщення енергетичних рівнів 191
§ 2.6. Визначення формфакторів МП з урахуванням спін-орбітальної взаємодії 199
§ 2.7. Статична діелектрична функція екранування в перехідних та рідкісноземельних металах 208
Список використаної літератури 219

РОЗДІЛ 3. Вироджений ідеальний електронний газ 223
§ 3.1. Загальна, передувальна і причинна функції Гріна електрона 223
§ 3.2. Функція розподілу і густина станів електронів 230
§ 3.3. Внутрішня енергія, тиск і ентропія електронного газу 240
§ 3.4. Магнітні властивості електронного газу 245
§ 3.5. Хімічний потенціал і теплоємність електронного газу 261
§ 3.6. Поляризаційна функція електронів 273
§ 3.7. Колективні ефекти в електронному газі 293
§ 3.8. Двочастинковий структурний фактор електронів 305
§ 3.9. Електронний триполюсник виродженого електронного газу 314
Список використаної літератури 351

РОЗДІЛ 4. Електронний газ у наближенні випадкових фаз 353
§ 4.1. Гамільтоніан електронної підсистеми в металі 353
§ 4.2. Діелектрична і магнітна проникності взаємодіючого електронного газу 361
§ 4.3. Діелектрична проникність електронного газу в полі іонів 371
§ 4.4. Структурні функції та структурні фактори електронів 376
§ 4.5. Відгук густини електронів на зовнішнє збурення 392
§ 4.6. Термодинамічний потенціал електронів у металі 402
Список використаної літератури 413

РОЗДІЛ 5. Термодинамічні властивості металів у методі МП 416
§ 5.1. Термодинамічний потенціал і вільна енергія електрон-іонної моделі металу 416
§ 5.2. Енергетичний спектр електронів провідності 426
§ 5.3. Повна енергія зв'язку та рівноважні атомні радіуси 429
§ 5.4. Розрахунок теплот плавлення неперехідних металів 442
§ 5.5. Побудова нелокальної теорії для повної енергії з'язку 446
§ 5.6. Ефективні потенціали міжіонної взаємодії 452
§ 5.7. Міжіонні силові сталі 462
§ 5.8. Пружні сталі кубічних металів 466
§ 5.9. Швидкість звуку і температура Дебая 468
Список використаної літератури 471

РОЗДІЛ 6. Електронні явища переносу у простих рідких металах 475
§ 6.1. Прості рідкі метали у моделі майже вільних електронів 476
§ 6.2. Модельний гамільтоніан та оператори потоків електронної підсистеми 479
§ 6.3. Електрична провідність металу 485
§ 6.4. Електронний внесок у теплопровідність та термо-е.р.с 505
§ 6.5. Електропровідність у магнітному полі 511
§ 6.6. Теорія збурень для електроопору в методі кінетичного рівняння 527
§ 6.7. Електроопір бінарних сплавів 542
Список використаної літератури 547

РОЗДІЛ 7. Електронні явища перенесення в аморфних металах 550
§ 7.1. Багаточастинкова теорія електропровідності простих металів 551
§ 7.2. Температурні поправки до електропровідності 557
§ 7.3. Багаточастинкова теорія теплопровідності простих металів 563
§ 7.4. Теорія збурень для електроопору в методі асимптотичного наближення 575
§ 7.5. Електропровідність перехідних немагнітних металів 583
§ 7.6. Електроопір перехідних магнітних металів 589
§ 7.7. Теплоопір перехідних магнітних металів 596
§ 7.8. Магнітний внесок в електроопір у двозонній моделі 599
Список використаної літератури 608

РОЗДІЛ 8. Застосування МП до дослідження властивостей топологічно невпорядкованих металічних систем 611
§ 8.1. Особливості будови топологічно невпорядкованих металічних систем 611
§ 8.2. Варіаційний розрахунок енергетичного спектра і густини електронних станів 612
§ 8.3. Розрахунок енергетичного спектра електронів провідності та густини станів методом теорії збурень 617
§ 8.4. Густина станів перехідних та рідкісноземельних металів у методі теорії розсіювання 623
Список використаної літератури 641
Предметний покажчик 643