

- [5] Генкин В. М. // ЖЭТФ. 1970. Т. 58. № 6. С. 2005—20011.
- [6] Ключихин А. А., Пермогоров С. А., Резницкий А. Н. // ЖЭТФ. 1976. Т. 71. № 6. С. 2230—2251.
- [7] Рьера Р., Сотолонго Коста О., Траллеро Гинер К., Ланг И. Г., Павлов С. Т. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 8. С. 83—88.
- [8] Trallero Giner C., Riera R. // Proc. XI Int. Conf. Raman Spectroscopy. London, 1988. P. 319—320.
- [9] Trallero Giner C., Riera R. // Phys. St. Sol. (b). 1989. V. 152. P. 357—367.
- [10] Goltsev A. V., Lang I. G., Pavlov S. T., Bryzhina M. F. // J. Phys. C: Sol. St. Phys. 1983. V. 16. N 21. P. 4221—4241.
- [11] Zeyher R. // Sol. St. Comm. 1975. V. 16. N 1. P. 49—55.
- [12] Беллицкий В. И., Гольцев А. В., Ланг И. Г., Павлов С. Т. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 4. С. 1224—1226; 1984. Т. 26. № 7. С. 2182—2185; ЖЭТФ. 1984. Т. 86. № 1. № 1. С. 272—286.
- [13] Belitsky V. I., Goltsev A. V., Lang I. G., Pavlov S. T. // Phys. St. Sol. (b). 1984. V. 122. N 2. P. 581—590.
- [14] Ruf T., Cardona M. // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 63. N 20. P. 2288—2290.
- [15] Сейсян Р. П., Юлдашев Ш. У. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 1. С. 12—22.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
15 июня 1990 г.

УДК 538.915 · 669'35'24

© Физика твердого тела, том 32, № 11, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 11, 1990

ОБОБЩЕНИЕ МЕТОДА ЛМТО — ФУНКЦИИ ГРИНА НА СЛУЧАЙ КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ В ПРИБЛИЖЕНИИ КОГЕРЕНТНОГО ПОТЕНЦИАЛА

И. А. Абрикосов, Ю. Х. Векилов, А. В. Рубан

Расчеты равновесных и кинетических свойств неупорядоченных материалов, выполненные в приближении когерентного потенциала (ПКП), по сравнению с другими одноузельными приближениями в наибольшей степени соответствуют результатам экспериментов. Однако эти расчеты проводились либо с использованием достаточно грубых моделей, например однозонной модели сплава в приближении сильной связи, либо было чрезвычайно трудоемкими, как метод Кона, Корринга и Ростокера—ПКП (ККР—ПКП) [1, 2].

В настоящей работе предлагается более эффективный, но достаточно точный по сравнению с ККР—ПКП метод расчета электронной структуры неупорядоченных твердых растворов. Он основан на обобщении метода линейных МТ-орбиталей — функции Грина (ЛМТО—ФГ), применяемого для расчета электронной структуры одиночной примеси, на случай концентрированных систем. Простота вычислений достигается за счет использования удобных процедур параметризации метода ЛМТО [3], энергетически независимых структурных констант, интегрирования по зоне Бриллюэна с использованием равномерного распределения Вейля для k -точек с одновременным итерационным решением уравнений ПКП.

Уравнения предлагаемого метода ЛМТО—ПКП могут быть получены, если рассматривать атомы компонентов твердого раствора А и В как примеси в идеальном кристалле, свойства которого соответствуют эффективной среде [4]. Тогда их функции Грина могут быть найдены из уравнения Дайсона, имеющего для метода ЛМТО—ФГ вид [3]

$$g_{LL}^i(E) = [g_{LL}^{\bar{1}}(E) + (P_i^i(E) - P_L(E))^{-1}], \quad (1)$$

где $i=A, B$; $g_{LL}^i(E)$ — функция Грина эффективной среды (для кубических кристаллов диагональна по $L=(l, m)$; l, m — квантовые числа; в дальнейшем L и E используются только в тех случаях, когда они необходимы); g определяется как

$$g_{LL'}(E) = V^{-1} \int_V d^3k \{ [P(E) - S(k)]^{-1} \}_{LL'}. \quad (2)$$

Здесь V — объем зоны Бриллюэна; $P_i(E)$ — потенциальная функция метода ЛМТО [3], которая для атомов А и В может быть найдена как точно

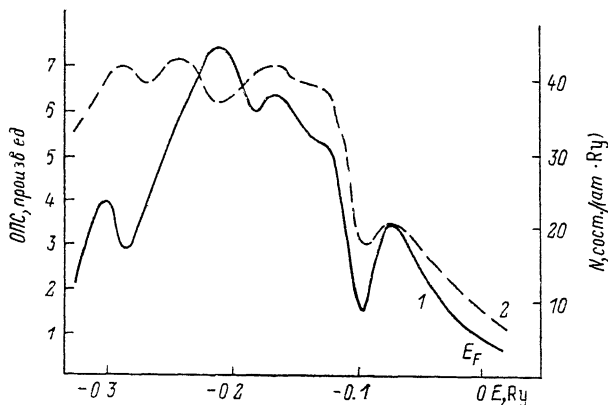


Рис. 1. Рассчитанная плотность состояний N в системе $\text{Cu}_{77}\text{Ni}_{23}$ (1) и экспериментальная оптическая плотность состояний ОПС (2) по [6].

из решения уравнения Шредингера (в релятивистском случае Дирака) для соответствующей атомной сферы при заданной энергии, так и с использованием потенциальных параметров, определяемых лишь при одном значении энергии; $S(k)$ — матрица энергетически независимых структурных констант [3].

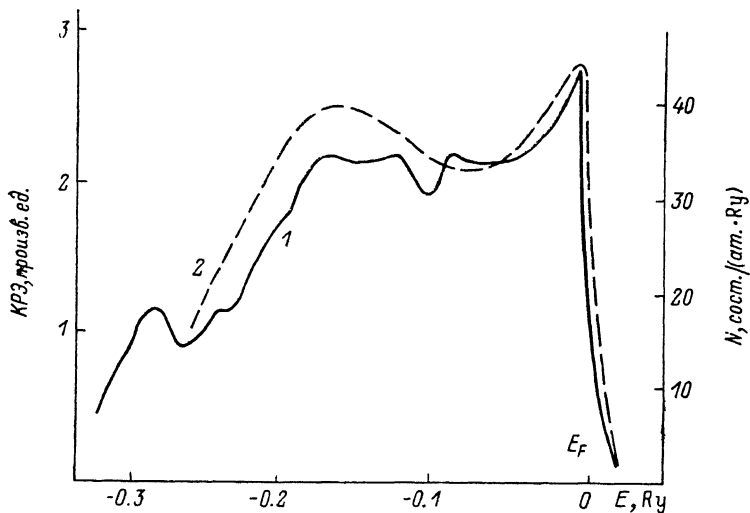


Рис. 2. Рассчитанная плотность состояний N в системе $\text{Cu}_{19}\text{Ni}_{81}$ (1) и экспериментальная кривая распределения по энергиям фотоэмитированных электронов КРЭ (2) по [7]. Энергия фотонов 10 эВ. Начало отсчета энергии экспериментальной кривой сдвинуто таким образом, чтобы высокоэнергетические пики для обеих кривых совпадали.

Из условия отсутствия рассеяния в системе в среднем при замене атомной сферы, описываемой когерентной потенциальной функцией, на атомную сферу $i=A, B$ следует самосогласованное уравнение для определения когерентной потенциальной функции

$$c[g^{-1} + P^A - P]^{-1} + (1-c)[g^{-1} + P^B - P]^{-1} = g. \quad (3)$$

Можно показать, что полученное здесь уравнение (3) преобразуется к уравнениям метода ПКП в приближении атомной сферы (ПКП—ПАС) [5].

Основные трудности при реализации ПКП возникают из-за необходимости многократного интегрирования по зоне Бриллюэна. Их можно избежать, если применить описанный в [4] метод интегрирования по равномерно распределенным в зоне k -точкам (распределение Вейля); тогда выполняется условие

$$\lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \sum_{i=1}^N f(\mathbf{k}_n) = V^{-1} \int_V d^3\mathbf{k} f(\mathbf{k}), \quad (4)$$

где f — функция волнового вектора \mathbf{k} . В частности, для интеграла в формуле (2) методом математической индукции с использованием (4) можно непосредственно получить

$$g_n = (1 - n^{-1}) g_{n-1} + n^{-1} [P_n - S(\mathbf{k}_n)]^{-1}. \quad (5)$$

Здесь g_n — функция Грина эффективной среды, полученная суммированием по n точкам равномерного распределения. С другой стороны, уравнение (3) в этом случае может быть преобразовано к виду

$$c(P^A - P_n + g_n^{-1})^{-1} + (1 - c)(P^B - P_n + g_n^{-1})^{-1} = [(P_{n+1} - P_n) + g_n^{-1}]^{-1}, \quad (6)$$

совпадающему с (3) при $n \rightarrow \infty$. Таким образом, использование независимых k -точек позволяет объединить процедуру интегрирования в (2) и решения уравнения (3). Следовательно, интегрирование по зоне для каждой энергии необходимо провести лишь однократно.

Решив уравнения (5), (6) самосогласованно, можно из (1) определить функции Грина компонентов твердого раствора, а по их мнимой части — локальные плотности состояний.

Предложенным методом были рассчитаны электронные спектры двух неупорядоченных твердых растворов системы Cu—Ni: Cu₇₇Ni₂₃ и Cu₁₉Ni₈₁. Результаты расчетов в сравнении с экспериментом приведены на рис. 1, 2. Показано, что спектр системы Cu₇₇Ni₂₃ определяется медными d -состояниями и виртуальным d -состоянием Ni вблизи уровня Ферми, в то время как спектр системы Cu₁₉Ni₈₁ практически полностью определяется d -электронами Ni. Результаты находятся в хорошем согласии как с экспериментальными данными, так и с расчетами методами ККР—ПКП и ПКП в приближении атомной сферы [5]. Таким образом, предлагаемый метод позволяет проводить расчеты электронных характеристик неупорядоченных твердых растворов практически с той же трудоемкостью, что и линейные методы для упорядоченных стехиометрических соединений.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Лифшиц И. М., Гредескул С. А., Пастур Л. А., Введение в теорию неупорядоченных систем. М.: Наука, 1982. 358 с.
- [2] Faulkner T. S., Stoks G. M. // Phys. Rev. B: Condens. Matter. 1980. V. 21. N 8. P. 3222—3244.
- [3] Gunnarsson O., Jepsen O., Andersen O. K. // Phys. Rev. B: Condens. Matter. 1983. V. 27. N 12. P. 7144—7168.
- [4] Akai H. // J. Phys.: Condens. Matter. 1989. V. 1. N 43. P. 8045—8063.
- [5] Gordon B. E. A., Temmerman W. E., Gyorffy B. L. // J. Phys. F: Metal Phys. 1984. V. 11. N 4. P. 821—857.
- [6] Seib D. H., Spicer W. E. // Phys. Rev. B: Condens. Matter. 1970. V. 2. N 6. P. 1676—1693.
- [7] Seib D. H., Spicer W. E. // Phys. Rev. B: Condens. Matter. 1970. V. 2. N 6. P. 1694—1703.

Московский институт
стали и сплавов

Поступило в Редакцию
6 апреля 1990 г.
В окончательной редакции
21 июня 1990 г.