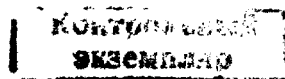


02.00.04
3 199



На правах рукописи

БОЛОТНИКОВА Надежда Александровна

**РАСЧЕТ КОНТАКТНОЙ ПЛОТНОСТИ И СДВИГА НАЙТА
В ЖИДКИХ МЕТАЛЛАХ МЕТОДОМ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА**

Специальность 02.00.04 - Физическая химия

А в т о р е ф е р а т
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико - математических наук

Челябинск, 1998

Работа выполнена на кафедре "Общей и теоретической физики"
Южно - Уральского государственного университета

Научные руководители: член - корреспондент РАН,
доктор химических наук,
профессор ВЯТКИН Г.П.,
доктор физико-математических наук,
профессор БЕСКАЧКО В.П.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор ПОЛУХИН В.А.,
доктор физико-математических наук,
профессор БЕРЕЗИН В.М.

Ведущее предприятие: Курганский государственный
университет

Защита состоится 18 марта 1998 года в 14.00
на заседании диссертационного совета Д 053.13.03
при Южно-Уральском государственном университете.

Адрес: 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76,
ЮУрГУ, Ученый Совет университета, тел. 39-91-23

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ЮУрГУ.

Автореферат разослан февраля 1998 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
доктор физ.-мат. наук,



профессор Гельчинский Б.Р

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Интерес к изучению микроскопической структуры и динамики металлических расплавов обусловлен практической необходимостью совершенствования металлургических технологий и общезначимой проблемой изучения структурно неупорядоченных конденсированных фаз. С помощью метода псевдопотенциала (ПП) удалось построить достаточно ясную и простую модель жидкометаллического состояния, успешно описывающую большую совокупность его свойств. Вместе с тем анализ применений метода позволяет высказать следующие соображения, послужившие мотивацией к выполнению настоящей работы.

1. В большинстве случаев метод ПП применялся для интерпретации свойств металлов в твердом состоянии. Здесь существует гораздо больше возможностей для экспериментального определения параметров электронной структуры, непосредственно связанных с эффективным потенциалом электрон-ионного взаимодействия - псевдопотенциалом. Поэтому здесь существует и больше возможностей для совершенствования теории путем сравнения ее предсказаний с экспериментом. В случае жидких металлов по принципиальным или техническим причинам доступны для экспериментального наблюдения немногие из этих параметров, что не позволяет проверить работоспособность теории столь же непосредственно. В связи с этим мы обращаем внимание на ядерно-физические методы, возможности которых в физике жидких металлов использованы по нашему мнению далеко не полностью.
2. С помощью метода ядерного магнитного резонанса (ЯМР) к настоящему времени уже накоплен большой массив данных о сдвигах Найта для большинства чистых металлов и ряда многокомпонентных систем. В металлах величина сдвига определяется плотностью электронов проводимости на ядре (контактной плотностью - КП). Для оценки КП предложены схемы расчета, справедливые в случае сплавов в локальном приближении для ПП, а в полной нелокальной теории - только для чистых металлов.
3. Все известные нам расчеты КП выполнены с помощью модельных ПП и указывают на важность учета нелокальной природы псевдопотенциала. Априорный подход, являясь обоснованием модельному, долгое время уступал последнему в отношении качества предсказаний, требуя при этом гораздо большего объема вычислений. Однако, за последнее время, с одной стороны, этот подход был значительно усовершенствован, а с другой - вычислительные ресурсы стали более доступными и дешевыми. Это позволяет сейчас априорным методам расчета конкурировать с модельными в пред-

сказании свойств. Тем не менее, доля априорных расчетов остается небольшой и почти все они выполнены одной группой авторов.

Таким образом, необходимость в более детальных сведениях об электронной и атомной структуре расплавов заставляет нас обратиться к новым источникам экспериментальной информации, например, к ядерно-физическим, и к разработке теоретических схем интерпретации соответствующих опытных данных. В частности, представляется своевременным исследовать возможности различных формулировок метода псевдопотенциала в истолковании уже накопленного массива данных ЯМР по сдвигам Найта в простых металлах и их сплавах.

Целью работы является систематическое исследование возможностей оценки параметров, возникающих при интерпретации опытных данных о сдвиге Найта в простых чистых металлах и их сплавах, с помощью метода псевдопотенциала. Для достижения этой цели поставлены следующие задачи.

1. Реализовать априорную схему расчета характеристик псевдопотенциала для чистых простых металлов и их сплавов, обеспечив, насколько это возможно, ее вычислительную эффективность.
2. Создать эффективные схемы расчета характеристик нелокальных модельных потенциалов в тех случаях (МП Шоу), когда эти характеристики не могут быть определены аналитически.
3. Обобщить существующую методику расчета контактной плотности на случай сплавов простых металлов и нелокальных псевдопотенциалов, реализовать соответствующую численную схему.
4. Выполнить расчеты контактной плотности в простых металлах и их сплавах с использованием модельных и априорных псевдопотенциалов в локальном приближении и в полной нелокальной теории. Сравнить результаты расчетов друг с другом и с экспериментом, если это возможно.
5. Проанализировать влияние на результаты расчетов тех факторов, которые участвуют в расчетах в качестве исходных данных, но не определяются в рамках самого метода псевдопотенциала: структурных характеристик расплава, способов описания многоэлектронных эффектов, качества описания основных состояний и т.п.

Научная новизна. Существовавшие ранее схемы вычисления контактной плотности обобщены на случай, когда псевдопотенциалы компонентов сплава являются нелокальными. Предложены и реализованы способы повышения эффективности расчетов характеристик псевдопотенциалов и контактной плотности. Впервые выполнены расчеты контактной плотности в простых металлах и их сплавах методом априорного псевдопотенциала. Изучен вопрос о надежности предсказаний контактной плотности в смысле зависимости результа-

тов расчета от тех параметров расчетной схемы, в выборе которых есть произвол – начиная от способа конструирования псевдопотенциала и заканчивая структурными характеристиками расплавов. В полной нелокальной теории сделаны предсказания относительно поведения контактной плотности в сплавах простых металлов, которые, будучи сопоставлены с экспериментом (пока отсутствующим), могли бы подтвердить преимущества одной из реализованных схем перед другой.

Практическая ценность работы заключается в создании средств интерпретации данных ЯМР-экспериментов над жидкими металлами, а разработанные схемы и программы расчетов представляют непосредственный интерес в практике научных исследований в указанной области. Предлагаемый комплекс программ позволяет рассчитывать контактную плотность в первом порядке теории возмущений по псевдопотенциалу, как в локальном приближении для него, так и в полной нелокальной теории, включая расчеты из первых принципов. При этом предоставляется возможность выбора способов описания основных состояний (аналитическим образом или численно), структуры расплава (эмпирические или модельные структурные факторы), многоэлектронных эффектов. Следует отметить, что некоторые вычислительные проблемы, рассмотренные в работе, связаны скорее с реализацией теории возмущений, нежели со спецификой вычислений контактной плотности. Поэтому предлагаемые способы повышения эффективности расчетов представляют интерес для более широкого круга задач, связанных с применением метода псевдопотенциала.

Работа выполнялась в соответствии с планом научного совета РАН по комплексной проблеме “Физико-химические основы металлургических процессов”.

Публикации и апробация работы. Основные результаты диссертации опубликованы в десяти работах. Материалы доложены и обсуждены на восьми научно – технических конференциях: V, VII Всесоюзной и VIII Всероссийской конференции по строению и свойствам металлических и шлаковых расплавов, Свердловск, 1983, Челябинск, 1990, Екатеринбург, 1994; Первой Украинской конференции по структуре и физическим свойствам неупорядоченных систем, Львов, 1993; Третьем Российском семинаре по компьютерному моделированию физико – химических свойств стекол и расплавов, Курган, 1996; ежегодных научно – технических конференциях ЮУрГУ, Челябинск, 1985 – 1997.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы из 159 наименований, содержит 199 страниц общего текста, включая 57 рисунков и 14 таблиц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении кратко излагаются состояние и перспективы исследований в области физической химии металлических расплавов, исходя из оценки которых поставлены цели настоящей работы.

Первая глава посвящена построению априорного ПП для сплавов и разработке эффективных методов вычисления характеристик ПП в нелокальном случае.

Метод МП для сплавов встречает известные концептуальные трудности, связанные с конструированием полного ПП решетки из индивидуальных ПП ионов. В то же время, априорный метод может быть непосредственно обобщен¹ на случай сплавов без использования дополнительных предположений к исходной формулировке метода для чистых металлов². С целью введения основных понятий и приближений, а также восстановления детальной схемы расчетов (отсутствующей в¹), в работе воспроизведены все рассуждения, ведущие к окончательной формулировке задачи. Результат этих рассуждений для центральной в теории ПП величины - матричного элемента (формфактора) эффективного потенциала взаимодействия электрона проводимости с ионом сорта *A* в сплаве *AB* при концентрации с второго компонента - формально может быть записан в том же виде, что и для чистого металла:

$$\langle k+q | w_A | k \rangle = \frac{u_A^a(q) + u_A^b(q) + u_A^c(q) + u_A^{OH}(q)}{\epsilon(q)} + \langle k+q | w_A^R | k \rangle + \frac{u_A^f(q)}{\epsilon(q)}. \quad (1)$$

Здесь первое и последнее слагаемые зависят лишь от абсолютной величины импульса $|q|$, переданного электрону при рассеянии на ионе, и составляют локальную часть экранированного формфактора псевдопотенциала иона. Второе слагаемое зависит от импульсов k и $k+q$ электрона до и после рассеяния и отвечает нелокальной его части. Величины u^i ($i=a, b, c, OH$) есть потенциалы валентного заряда иона (u_A^a); электронейтрального комплекса, состоящего из заряда ядра за вычетом валентного заряда и электронов остова, (u_A^b); обменного взаимодействия между электронами проводимости и электронами остова (u_A^c); электронов проводимости в одноволновом приближении - так называемый потенциал ортогонализационной дырки (u_A^{OH}). Для последнего, например, справедливо выражение:

$$u_A^{OH}(q) = -\frac{8\pi z_A n_A(q)}{\Omega_0 q^2 n_A(0)} \left[z_A^* / z_A - 1 \right]$$

¹ Hafner J. - J. Phys. F: Metal Phys., 1976, vol. 6, N7, p.1243-1257.

² Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. - М.: Мир, 1968, 366 с.

Здесь z_A - валентность рассматриваемого иона, Ω_0 - средний атомный объем сплава, $n_A(q)$ - фурье-компонента плотности электронов остова, z_A^* - эффективная валентность, которая через $P_{A(B)}$ - оператор проектирования на остовные состояния иона сорта $A(B)$ - записывается как:

$$z_A^* = z_A + \frac{1}{N} \sum \frac{\langle \mathbf{k} | P_A | \mathbf{k} \rangle}{1 - \langle \mathbf{k} | P | \mathbf{k} \rangle}, \quad P = P_A + P_B.$$

Нелокальная часть ПП в явном виде представляется:

$$\langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | w_A^R | \mathbf{k} \rangle = \sum_{n(l,A)} \left\{ k^2 + f_n^A + (1-c)M_A + cM_B \right\} (2l+1) \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | n l 0 \rangle \langle \mathbf{k} | n l 0 \rangle P_l(\cos \theta),$$

$$M_A = \left\{ \sum_{n(l,A)} (k^2 + f_n^A) (2l+1) \langle \mathbf{k} | n l 0 \rangle^2 \right\} / (1 - \langle \mathbf{k} | P | \mathbf{k} \rangle),$$

где $\langle \mathbf{k} | n l 0 \rangle$ - коэффициенты ортогональности между плоской волной $|\mathbf{k}\rangle$ и состоянием остова $|n l 0\rangle$ иона A , характеризуемому квантовыми числами n, l

$$\langle \mathbf{k} | n l 0 \rangle = (4\pi / \Omega_0)^{1/2} \int_0^{\infty} r J_l(kr) P_n(r) dr, \quad (2)$$

$J_l(x)$ и $P_l(\cos \theta)$ - сферические функции Бесселя и полиномы Лежандра порядка l соответственно, θ - угол между векторами \mathbf{k} и $\mathbf{k} + \mathbf{q}$, а f_n^A есть

$$f_n^A = \langle \mathbf{k} | U | \mathbf{k} \rangle - E_n \approx -9\bar{z}^* e^2 / (5r_0) + \bar{u}^b + \bar{u}^c - \varepsilon_n^A - u_{OPW}^A,$$

где r_0 - радиус атомной сферы, отвечающей среднему атомному объему сплава; \bar{z}^* , \bar{u}^b , \bar{u}^c - средние (по составу сплава) эффективная валентность и отвечающие $q = 0$ вклады от потенциала электронейтрального комплекса и обменного потенциала; ε_n^A - энергии остовных электронов в свободном ионе, u_{OPW}^A - потенциал, создаваемый на ядре собственной ортогонализационной дыркой

$$u_{OPW}^A = -\frac{3}{2} z_A \sum_{n,l} u_{nl}^A \int_0^1 x^2 \langle k_F x | n l 0 \rangle^2 dx, \quad u_{nl}^A = 2(2l+1) \int \frac{P_n^2(r)}{r} dr. \quad (3)$$

Здесь u_{nl}^A - потенциал на ядре от электронов оболочки nl , $P_n(r)$ - радиальные части остовных волновых функций (иона A).

Экранирование локальных вкладов в формфактор осуществляется делением на диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(q)$, которая без учета многоэлектронных эффектов обмена и корреляции (приближение Хартри) имеет вид:

$$\varepsilon(q) = 1 + \frac{m e^2}{2\pi k_F \hbar^2 \eta^2} \left(\frac{1 - \eta^2}{2\eta} \ln \left| \frac{1 - \eta}{1 + \eta} \right| + 1 \right), \quad \eta = \frac{q}{2k_F}. \quad (4)$$

$u^f(q)$ в (1) описывает эффекты экранирования нелокального члена в псевдопотенциале голого иона

$$u^f(q) = -\frac{4}{\pi^2 q^2} \int_{q < q_f} \frac{d^3 k (k+q | u_A^R | k)}{k^2 - (k+q)^2} \quad (5)$$

Приближенный учет многоэлектронных эффектов в полосе проводимости обычно осуществляют модификацией функции (4)

$$\varepsilon^*(q) = 1 - [1 - \varepsilon(q)] [1 - f(q)]$$

Выбор модифицирующей функции $f(q)$ может быть сделан многими способами, преимущества которых друг перед другом не очевидны.

При реализации изложенной выше схемы определения форм-факторов наибольшие трудности в вычислительном плане сопряжены с оценкой величины вклада в экранирование от нелокальной части ПП $u^f(q)$ ввиду необходимости выполнения объемного интегрирования функции, содержащей особенность и самой определенной с помощью ряда квадратур. Это обстоятельство является причиной относительной непопулярности расчетов с использованием нелокальных ПП вообще и априорных в частности. Для построения эффективной вычислительной схемы важна всякая возможность сокращения объема вычислений. Один из способов достижения этой цели заключается в замене численных квадратур аналитическими. В работе показано, что это можно сделать, в частности, при вычислении коэффициентов ортогональности (2), если для волновых функций осевых электронов использовать аналитические представления в слэтеровском базисе

$$P_{nl}(r) = \sum_i C_i N_i r^n e^{-\xi_i r} \quad (6)$$

Здесь C_i, ξ_i - некоторые параметры, табулированные в³, а N_i - зависящие от них нормировочные коэффициенты. Например, для состояния с квантовыми числами $n=3, l=1$ результат имеет вид:

$$\langle k | 3p0 \rangle = 16 \left(\frac{\pi}{\Omega_0} \right)^{1/2} k \sum_i \frac{C_i N_i}{(\xi_i^2 + k^2)^2} \left[5 - \frac{6k^2}{\xi_i^2 + k^2} \right]$$

Возможность повышения эффективности расчетов в полной нелокальной теории может быть реализована и для модельных потенциалов, в частности, в случае МП Шоу⁴. Нелокальная часть псевдопотенциала Шоу

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = -\frac{4\pi}{\Omega} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) A_l(E) R_l^3(E) P_l(\cos \theta) \int_0^1 dx x(x-1) j_l(k' R_l x) j_l(k R_l x) \quad (7)$$

³ Clementi E., Roetti C. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1974, v. 14, N3-4, p. 177-457.

⁴ Shaw R.W. Jr. - Phys. Rev.B., 1968, v. 174, N3, p. 769-781.

не может быть вычислена явно (здесь $k' = |k+q|$, A_1 , R_1 - параметры теории, определяемые подгонкой под эксперимент). Однако, в работе показано, как можно избежать численного интегрирования в (7), сводя дело к расчету элементарных функций и "хорошо вычисляемой" специальной функции - интегрального косинуса, для которого известны весьма точные представления с помощью аппроксимант Паде.

Описанные только что приемы позволяют снизить размерность требуемого в (5) интегрирования на единицу. Остается, однако, другая трудность вычислительного характера - сингулярность, связанная с присутствием в (5) энергетического знаменателя $k^2 - (k+q)^2$. Для аккуратного решения этой проблемы мы реализовали процедуру, аналогичную предложенной в ⁵. Не останавливаясь на ее описании, заметим только, что без соблюдения этих предосторожностей удовлетворительная по точности оценка величины $u^f(q)$ вряд ли возможна.

Дальнейшее повышение эффективности расчетов формфакторов достигается за счет следующей организации работы созданного пакета программ. В первом модуле вычисляются те характеристики ПП, которые не зависят от концентрации компонентов в сплаве и его атомного объема и являются, таким образом, индивидуальными характеристиками компонентов. Они могут быть вычислены раз и навсегда, сохранены и использованы в расчетах любых систем с участием данного иона. В следующем модуле выполняется расчет $u^f(q)$, результаты которого табулируются вместе с оставшимися локальными вкладами в формфактор. Наконец, в последнем модуле сама процедура вычисления формфактора сводится фактически к интерполяции найденных ранее данных и может быть выполнена очень быстро, что важно в связи с последующими расчетами контактной плотности.

В схеме расчета предусмотрена возможность описания остовных состояний не только аналитическими волновыми функциями, но и заданными численно, например, с помощью известной процедуры Германа - Скилмана⁶. Это мы использовали при обсуждении влияния внутриатомных эффектов (в рамках X_α - метода) на результаты расчетов в чистых металлах.

С помощью разработанного пакета программ выполнены расчеты формфакторов априорного псевдопотенциала для простых металлов и их сплавов с целью качественного анализа эффектов нелокальности (последние наиболее сильны в L_i) и влияния на результаты расчетов приближений, находящихся за пределами самого метода ПП (выбор остовных орбиталей и их параметров).

⁵ Animalu A.O.E. - Prog. Roy. Soc., 1966, v. 294, p. 376-392.

⁶ Herman F., Skillman S. Atomic Structure Calculations. - Printice-Hall, Englewood Cliffs (N.J.), 1963.

Во второй главе кратко обсуждаются имеющиеся данные о сдвигах Найта и связанных с ним величинах, предлагается схема не-локальных расчетов контактной плотности для сплавов.

В настоящее время сдвиг Найта (СН) измерен для большинства металлов и для ряда сплавов. Его величина лежит в интервале от долей процента до нескольких процентов, в целом увеличивается с ростом атомного номера элемента, имеет близкие значения для металлов из одного периода Периодической системы, мало изменяется при плавлении и изменении температуры. Подробно исследованы сплавы щелочных металлов (ЩМ), где установлено, что: а) в бинарном сплаве АВ сдвиг Найта $K_{A(B)}$ для каждого из компонентов практически линейно зависит от концентрации; б) при любой c_B (концентрация более тяжелого компонента) справедливо $K_A^{-1} dK_A / dc_B = K_B^{-1} dK_B / dc_B$; в) производные dK_A / dc_B и dK_B / dc_B положительны. Эти правила выполняются для сплавов тяжелых ЩМ и нарушаются в сплавах с участием лития и натрия.

В бинарных металлических системах, не содержащих переходных элементов, величина СН на ядрах сорта А представима в виде⁷:

$$K = \frac{8}{3} \pi \chi_p \left\langle \left| \psi_{\mathbf{k}_f} \left(R_f^A, c_B \right) \right|^2 \right\rangle \Lambda_A, \quad (8)$$

где χ_p - паулиевская парамагнитная восприимчивость единицы объема (в единицах СГС), $\psi_{\mathbf{k}_f} \left(R_f^A, c_B \right)$ - значение волновой функции электрона проводимости с волновым вектором на поверхности Ферми ($\mathbf{k} = \mathbf{k}_f$) в месте расположения R_f^A l-го ядра сорта А, Λ_A - поляризационный фактор. Усреднение $\langle \dots \rangle$ выполняется по ансамблю ядерных конфигураций и по поверхности Ферми. Величина в угловых скобках называется контактной плотностью (КП) электронов проводимости.

Магнитная восприимчивость Паули χ_p доступна для прямых измерений лишь в исключительных случаях; обычно наблюдаемой величиной является полная магнитная восприимчивость χ , включающая помимо паулиевской также диамагнитные восприимчивости коллективизированных электронов и ионных остовов. Для выделения χ_p из χ используют теоретические или полуэмпирические методы.

Поляризационный фактор Λ описывает изменение КП на ядре электронов собственного остова вследствие их обменного взаимодействия с поляризованной магнитным полем полосой проводимости. Он также недоступен непосредственным экспериментам, а известные

⁷ Perdew J.P., Willkins J.W. - Phys. Rev. B., 1973, v. 7, N 6, p. 2461-2473.

теоретические оценки для Λ приводят к величинам порядка единицы. Поскольку, например, в ряду ЦМ χ_p изменяется от металла к металлу в полтора-два раза, а сдвиг Найта - в десятки (до 50) раз, то естественно полагать, что поведение СН определяется, в основном, контактной плотностью.

В первом порядке теории возмущений по псевдопотенциалу выражение для КП на ядрах компонента A сплава имеет вид:

$$\left\langle \left| \psi_{k_F} \left(R_I^A, c_B \right) \right|^2 \right\rangle_{c\phi} = \left| \psi_{k_F}^{1-OPW} \left(R_I^A, c_B \right) \right|^2 \frac{1 + \sum_A (k_F) + \Delta_{AB}(k_F, c_B)}{1 + \delta N_{k_F}(c_B) / N_{k_F}^0(c_B)}. \quad (9)$$

Здесь $\left| \psi_{k_F}^{1-OPW} \left(R_I^A, c_B \right) \right|^2$ есть КП в одноволновом приближении, величина Σ_A описывает эффекты экранирования иона сорта A , когда он находится в однородном электронном газе, а Δ_{AB} - поправка, вызванная присутствием соседних ионов. Остальные члены в правой части (9) связаны с нормировкой волновой функции. Известна схема расчета участвующих в (9) величин в локальном приближении для ПП. В настоящей работе она обобщается на случай псевдопотенциала, содержащего наряду с локальной (w_I) и нелокальную (w_{NL}) части

$$(\mathbf{k} + \mathbf{q} | w_{AB} | \mathbf{k}) = w_L^{A(B)}(q) + w_{NL}^{A(B)}(q, k, |\mathbf{k} + \mathbf{q}|).$$

Тогда после усреднения по поверхности Ферми (в предположении сферичности последней) для величин $\Sigma_A(k_F)$ и $\Delta_{AB}(k_F)$ получим

$$\Sigma_A(k_F) = 2\phi \int_0^{\infty} q^2 dq \left(\frac{q}{2k_F} \right) \left[\bar{w}_L^A(q) R_A + R_{AA} \right], \quad (10)$$

$$\Delta_{AB}(k_F) = 2\phi \int_0^{\infty} q^2 dq \left(\frac{q}{2k_F} \right) \left[(S_{AA} - 1) (\bar{w}_L^A R_A + R_{AA}) + S_{AB} \left(\frac{c_B}{1 - c_B} \right)^{1/2} (\bar{w}_L^B R_A + R_{AB}) \right], \quad (11)$$

$$R_A = \phi \int \frac{d\hat{q}}{2\pi} \frac{\gamma_A(\mathbf{k}_F + \mathbf{q})}{\gamma_A(k_F) (k_F^2 - (\mathbf{k} + \mathbf{q})^2)}, \quad R_{AB} = \phi \int \frac{d\hat{q}}{2\pi} \frac{\gamma_A(\mathbf{k}_F + \mathbf{q}) (\mathbf{k}_F + \mathbf{q} | \bar{w}_{NL}^B | \mathbf{k}_F)}{\gamma_A(k_F) (k_F^2 - (\mathbf{k} + \mathbf{q})^2)}.$$

Здесь \bar{w} - формфакторы, нормированные так, что $\bar{w}(0) = -z$, $d\hat{q}$ означает интегрирование по угловым переменным, а γ_A - фактор ортогональности. Поправка к нормирующему множителю теперь имеет вид:

$$\delta N_{k_F}(c_B) = -\frac{2}{\Omega_0} \int_0^{\infty} q^2 \left(\frac{dq}{2k_F} \right) \left\{ (1 - c_B) S_{AA}(q) [T_{AA}^L + T_{AA}^{NL}] + c_B S_{BB}(q) [T_{BB}^L + T_{BB}^{NL}] + (c_B(1 - c_B))^{1/2} S_{AB}(q) [T_{AB}^L + T_{AB}^{NL} + T_{BA}^L + T_{BA}^{NL}] \right\}, \quad (12)$$

$$T_{IJ}^L = \overline{w}_L^I(q) \oint \frac{d\hat{q} \langle \mathbf{k}_F | p_J | \mathbf{k}_F + \mathbf{q} \rangle}{2\pi k_F^2 - (\mathbf{k}_F + \mathbf{q})^2}, \quad T_{IJ}^{NL} = \oint \frac{d\hat{q} \langle \mathbf{k}_F | p_I | \mathbf{k}_F + \mathbf{q} \rangle \langle \mathbf{k}_F + \mathbf{q} | \overline{w}_{NL}^J | \mathbf{k}_F \rangle}{2\pi k_F^2 - (\mathbf{k}_F + \mathbf{q})^2}.$$

При $c_B = 0$ формулы (10-12) совпадают с таковыми, найденными ранее для чистых металлов в нелокальной теории⁸, а при $w_{NL}^{A(B)} = 0$ - с полученными для сплава в локальном приближении⁷. Учитывая объем расчетов, требуемый для определения характеристик нелокальных ПП, и вид формул (10-12), становится очевидной необходимость повышения эффективности расчетов и на стадии определения контактной плотности. Для этого мы реализовали следующие возможности.

1. Используя в качестве остовных аналитические волновые функции слетеровского типа, фактор ортогональности γ_A можно вычислить точно: $\gamma(k) = 1 - \sum_n \chi_{n0}(0) b_{n0}(0)$, где функции $b_{nl}(k)$ с точностью до не-

которых коэффициентов совпадают с коэффициентами перекрытия (2), найденными нами ранее, а величины $\chi_{n0}(0)$ - непосредственно определяются параметрами волновых функций.

2. В работе найдена возможность аналитического расчета интегралов в R_A и T_{IJ}^L путем сведения их к интегралам другого вида

$$C_l(N, \alpha, k, q) = \int_{-1}^1 dy P_l \left(\frac{k - qy}{[k^2 + q^2 - 2kqy]^{1/2}} \right) \frac{B_l(N, \alpha, [k^2 + q^2 - 2kqy]^{1/2})}{(2k/q)y - 1},$$

которые могут быть вычислены точно (функции B_l известны в явном виде и возникают при вычислении $b_{nl}(k)$). Например, в простейшем случае для $C_0(1, \xi, k, q)$ (здесь $\alpha = (k^2 - q^2) / (2\xi k)$) получено:

$$C_0(1, \xi, k, q) = \frac{4\pi q}{k^3 \xi} [3I_1^* - 7I_2^* + 4I_3^*], \quad \text{где } I_i^* = \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{(x+1)(x-\xi^2/k^2)}$$

- интегралы, легко вычисляемые аналитически.

3. Для оставшихся интегралов типа R_{AB} и T_{IJ}^{NL} аналитический расчет невозможен (или по крайней мере необозрим). Однако, мы упростили до некоторой степени вычисления с помощью рассуждений, подобных выполненным в аналогичной ситуации для чистых металлов⁸.

Отказ от использования волновых функций остова, заданных аналитически, ведет к необходимости выполнять численно все возникающие квадратуры, начиная с величин $b_{nl}(k)$. Так мы и поступали в ряде расчетов СН в чистых металлах, когда использовали остовные волновые функции, рассчитанные с помощью программы⁶.

В третьей главе изложенная выше схема расчетов применяется в простейшем случае локальных однопараметрических модельных потенциалов Ашкрофта, а также Линга-Гелатта (13) и Такура (14):

$$w_{Л-Г}(q) = -4\pi z e^2 \sin(\pi x) / (\Omega q^2 \pi x), \quad x = q/q_0, \quad (13)$$

$$w_T(q) = -2\pi z e^2 / (\Omega q^2) [\cos(qR_C) + \sin(qR_C) / (qR_C)] \cdot \exp(-0,026q^4), \quad (14)$$

где q_0 , R_C - подгоночные параметры. Поскольку истинный псевдопотенциал является нелокальным, то возникает вопрос о том, насколько параметры ПП в локальном приближении оказываются зависящими от выбора термодинамического состояния образца и свойства, под которое осуществляется подгонка параметров. Анализ литературных данных показывает, что по крайней мере для ПП Ашкрофта в зависимости от этого выбора величина R_C изменяется существенно. По этой причине мы заново произвели подгонку параметров всех трех модельных ПП под электросопротивление жидких металлов, используя формулу Займана и два вида структурных факторов (СФ): экспериментальные и модельные - системы твердых сфер.

Таблица 1

КП, вычисленные с использованием локальных МП

Литий $T = 470$ К, $P_F^{\text{exp}} = 0,10$; $\Lambda = 1,20 + 1,25$			
ПП	обменно-корреляционные поправки по		
	Шоу ⁹	Хаббарду-Шэму ¹⁰	без обмена
Ашкрофт	0,530 (0,717)	0,510 (0,685)	0,496 (0,663)
Линг-Гелатт	0,483 (0,653)	0,470 (0,627)	0,460 (0,609)
Такур	0,567 (0,725)	0,547 (0,694)	0,532 (0,672)
Натрий $T = 378$ К, $P_F^{\text{exp}} = 0,45$; $\Lambda = 1,228$			
Ашкрофт	0,410 (0,440)	0,413 (0,441)	0,416 (0,442)
Линг-Гелатт	0,595 (0,623)	0,584 (0,609)	0,576 (0,600)
Такур	0,473 (0,502)	0,472 (0,499)	0,471 (0,496)
Калий $T = 343$ К, $P_F^{\text{exp}} = 0,66$; $\Lambda = 1,485$			
Ашкрофт	0,563 (0,620)	0,571 (0,622)	0,577 (0,625)
Линг-Гелатт	1,407 (1,407)	1,314 (1,314)	1,257 (1,350)
Такур	0,664 (0,718)	0,669 (0,711)	0,663 (0,708)

В таблице 1 представлены результаты расчетов приведенной КП (отнесенной к атомному объему) для ряда простых металлов, отвечающие модельному, а в скобках - экспериментальному СФ. Структурные факторы использовались согласованным образом: один и тот же $S(q)$ применялся при подгонке параметров МП и в расчетах са-

⁹ Shaw R.W.Jr. - J.Phys.C: Sol. Stat. Phys., 1970, v. 3, p. 1140-1158.

¹⁰ Sham L.J. - Prog Roy Soc. London, 1965, v. A283, p. 33-49.

мой КП. Оценки P_F^{exp} получены с помощью опытных данных по СН и известных значений χ_r . Эффекты поляризации остова не учитывались, приведены лишь значения Λ , найденные в литературе.

Анализ полученных результатов позволяет заключить следующее:

1. Переход от одного МП к другому может изменить величину контактной плотности в несколько раз при прочих равных условиях.
2. Хотя все модельные ПП для лития предсказывают близкие (в пределах 10%) значения КП, все они намного (в 4-7 раз) уклоняются от эмпирической оценки этой величины.
3. Разница в контактных плотностях, вычисленных с использованием жесткосферных и опытных СФ, обусловлена скорее разницей в параметрах модельных потенциалов, нежели отличиями в самих СФ.
4. Выбор способа описания обменно-корреляционных поправок мало влияет на результаты расчета контактной плотности и более существенен для легких ЦМ ($\approx 5\pm 7\%$ для Li), чем для тяжелых.

Дополнительную информацию о возможностях локальных МП можно получить, рассматривая зависимости СН от температуры. Расчеты $P_F(T)$ в Li с использованием МП Ашкрофта приводят к противоположным предсказаниям знака температурного коэффициента $P_F^{-1} dP_F / dT$ для экспериментальных и твердосферных структурных факторов: для первых он отрицателен (что противоречит опытным данным), а для последних составляет $3,2 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$. Это примерно вдвое превышает полуэмпирическую оценку. Ситуация сохраняется и при использовании МП другой формы. В Na и K использование твердосферных СФ предсказывает линейную температурную зависимость с положительным коэффициентом, а при использовании экспериментальных СФ такой зависимости практически нет. В поливалентных металлах (Mg , Al) отрицательный температурный коэффициент предсказывается независимо от природы используемого СФ.

Сплавы. Полуэмпирический анализ показал, что в ЦМ тяжелее Li величина χ_r пропорциональна электронной плотности с одинаковым для всех этих металлов коэффициентом пропорциональности. Тогда по опытным данным о $K(c)$ и $\Omega(c)$ можно найти отношение $q = P_F(1) / P_F(0)$, как меру концентрационной зависимости $P_F(c)$. Если под c понимать концентрацию более тяжелого элемента сплава, то оказалось, что в бинарных системах ЦМ, не содержащих натрия, величина $q > 1$ и изменяется от системы к системе в пределах от 1,02 (Rb в $K-Rb$) до 1,12 (Cs в $Rb-Cs$). В сплавах натрия q заметно меньше единицы (от 0,82 для Rb в сплаве $Na-Rb$ до 0,89 для K в сплаве $Na-K$).

В таблице 2 приведены теоретические (с использованием МП Ашкрофта) и эмпирические оценки параметра q для сплава $K-Rb$ и

для двух сплавов с участием наиболее интересных в рассматриваемом отношении компонентов - натрия и лития.

Таблица 2

Параметр $q = P_F(1) / P_F(0)$ для компонентов сплавов ЦМ

	Эмпирич. оценка	Расчет
<i>K</i> в сплаве <i>K-Rb</i>	1,04	1,07(0,90)
<i>Rb</i> в сплаве <i>K-Rb</i>	1,02	0,99(0,91)
<i>Na</i> в сплаве <i>Na-K</i>	0,85	0,91
<i>K</i> в сплаве <i>Na-K</i>	0,89	0,94
<i>Li</i> в сплаве <i>Li-Na</i>	1,35	0,78+0,83
<i>Na</i> в сплаве <i>Li-Na</i>	1,19	0,82+1,000

Видно, что полуэмпирические значения q удовлетворительно воспроизводятся для сплавов *K-Rb* и *Na-K* и плохо воспроизводятся в сплаве *Li-Na*. Для сплава *K-Rb* показано, насколько это согласие зависит от выбора модельного параметра. Если вместо R_C , подогнанного под электросопротивление жидкого рубидия (2,12 а.е.), использовать значение, подогнанное под данные о поверхности Ферми в твердом состоянии (2,61 а.е.), то согласие с опытом нарушается (см. результаты в скобках). В сплаве *Li-Na* не удается достичь полуэмпирических оценок ни выбором R_C , ни выбором обменно-корреляционных поправок: в зависимости от выбора поправок величина q изменяется в приведенном в таблице интервале. Следует отметить, что, несмотря на некоторые удовлетворительные результаты для q , абсолютные значения P_F оказываются в большей зависимости от выбора R_C : в сплаве *K-Rb*, например, P_F на ядрах рубидия уменьшается в 4 раза при увеличении R_C от 2,12 до 2,61.

В сплаве *Li-Rb* (видимо, не исследованном экспериментально) независимо от выбора параметра R_C предсказывается сильная концентрационная зависимость P_F на ядрах обоих компонентов с величиной q , существенно меньшей единицы: $q \approx 0,5$ для лития и $q \approx 0,25+0,6$ для рубидия (в зависимости от выбора R_C). Для *Rb* эта зависимость нелинейна. Аналогичные результаты получаются и для сплавов *Li* с поливалентными металлами (*Mg* и *Al*), причем для последних концентрационная зависимость сильнее, чем на литии, и нелинейна.

Еще более драматическими являются предсказания локальной теории в сплавах поливалентных металлов с более тяжелыми ЦМ. В этих случаях расчеты для сплавов *Na-Mg*, *Na-Al*, *Mg-Al* выявили области концентрации, где локальная теория приводит к явно нереалистичным результатам - отрицательной контактной плотности.

В четвертой главе представлены результаты расчетов КП и сдвигов Найта в полной нелокальной теории. Анализ данных, полученных с использованием МП Шоу, показал следующее.

1. Учет зависимости его параметров от термодинамического состояния системы (сводящийся к их интер- или экстраполяции к значениям E_F в данном состоянии) при не слишком больших перегревах над температурой плавления изменяет КП лишь в пределах 1-2%.
2. Использование модельных структурных факторов (твердосферных) по сравнению с опытными приводит к погрешностям в контактной плотности для чистых металлов в пределах 5-6 процентов.
3. Выбором способа описания обменно-корреляционного взаимодействия в полосе проводимости КП может изменяться на 10-30%.

Использование нелокального подхода в чистых простых металлах явно улучшило результаты только для Li : теперь без учета поляризационного фактора расхождение с эмпирической оценкой P_F составляет не несколько сотен, а примерно 50%. С учетом Λ это расхождение будет около 70%. Для остальных элементов нелокальные оценки P_F точнее или хуже лучших из локальных в зависимости от выбора структурного фактора и вида обменно-корреляционных поправок.

На рис.1 представлены результаты расчета $P_F(T)$ в литии. Кривая с пометкой "экспер." построена по экспериментальным данным о сдвиге Найта и паулиновской восприимчивости¹¹. При оценке мы полагаем $\Lambda = 1$, так что "истинная" кривая, вероятно, пойдет еще ниже.

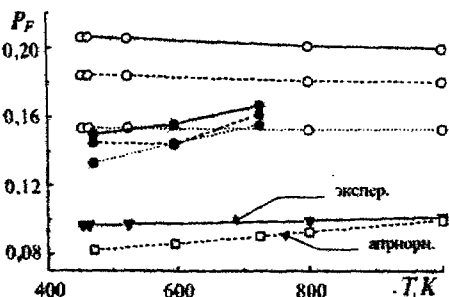


Рис.1. Температурная зависимость контактной плотности лития
 ● - использовались экспериментальные СФ, ○ - СФ твердых сфер;
 сплошные кривые - без учета обменно-корреляционных поправок,
 пунктирные - обмен по¹⁰, точечные - по⁹; ▼ - полуэмпирическая
 оценка по данным¹¹; □ - априорный расчет (обмен по¹⁰)

¹¹ Van der Marel C. and al. - Z. für Phys. Chemie, 1988, Bd. 157, s. 593-599.

Видно, что абсолютная величина P_F существенно переоценивается при всех температурах, а использование СФ твердых сфер приводит к малому отрицательному знаку температурного коэффициента независимо от выбранного приближения для обменно-корреляционных эффектов. Использование экспериментальных СФ правильно предсказывает знак $P_F^{-1} dP_F / dT$, но величина его слишком велика.

Расчеты для других металлов (с использованием экспериментальных СФ) позволяют предположить, что в ряду щелочных металлов, начиная с лития, $P_F^{-1} dP_F / dT$ уменьшается с ростом атомного номера, становясь близким к нулю для калия и отрицательным для более тяжелых ЩМ. Для поливалентных металлов температурный коэффициент отрицателен. Эти предположения нуждаются в экспериментальной проверке.

Результаты расчетов параметра q для сплавов с участием лития и натрия приведены в таблице 3.

Таблица 3

Параметр $q = P_F(1) / P_F(0)$ для компонентов сплавов $Na-K$, $Li-Na$

	эмпирические оценки	Способ учета обменно-корреляционных поправок		
		по ⁹	по ¹⁰	Хартри
Na в сплаве $Na-K$	0,85	1,11	1,01	0,96
K в сплаве $Na-K$	0,89	0,92	0,89	0,87
Li в сплаве $Li-Na$	1,35	1,24	1,10	1,04
Na в сплаве $Li-Na$	1,19	1,12	1,03	0,98

Видно, что за счет выбора вида обменно-корреляционных поправок удается удовлетворительно описать эмпирические данные по q . Однако, рекомендации по выбору таких поправок оказываются различными для разных сплавов.

При рассмотрении поведения $P_F(c)$ в сплавах щелочных металлов с поливалентными, обнаруживаются следующие закономерности.

1. Контактная плотность на ядрах поливалентных металлов максимальна, когда их содержание в сплаве мало. Для них $q < 1$ (вплоть до 0,5), тогда как на ядрах ЩМ $q > 1$.
2. На ядрах поливалентных металлов концентрационная зависимость $P_F(c)$ является нелинейной.

Сплав $Mg-Al$ подчиняется тем же закономерностям, если при их формулировке заменить слова «щелочной металл» на «металл меньшей валентности». Отметим также несомненный успех расчетов с использованием МП Шоу - отсутствие нефизических результатов для $P_F(c)$ в сплавах $Na-Mg$, $Na-Al$ и $Mg-Al$.

В таблице 4 приведены результаты априорных расчетов сдвига Найта в чистых металлах в сравнении с экспериментальными данными и расчетами, выполненными с помощью МП Шоу в настоящей работе и в работе⁸.

Таблица 4

Сдвиг Найта $K \cdot 10^3(\%)$ в жидких металлах.

Элемент	литий	натрий	калий	магний	алюминий
Априорный ПП	6(7,5)	88(108)	106(157)	74	105
ПП Шоу	28	111	282	92	109
Данные ⁸	28(35)	125(153)	357(530)	108	111
Эксперимент	26	116	265	110	164

Анализ этой таблицы показывает, что предсказания, сделанные с помощью МП Шоу в настоящей работе и в работе⁸, достаточно хорошо согласуются друг с другом для всех элементов, кроме калия. Для последнего, однако, в настоящей работе получен результат, более близкий к опытному. Заметим, что расчетные данные в таблице приведены без учета поляризационного фактора, как и в⁸. Его учет (данные в скобках) улучшает результаты априорных расчетов и ухудшает предсказания, сделанные с помощью МП Шоу.

Формальной причиной систематического занижения расчетных значений контактной плотности в априорном подходе по сравнению с модельным является, очевидно, разница в поведении формфакторов модельного и априорного ПП. Априорные формфакторы имеют более высокий первый максимум (w_{\max}), располагающийся вблизи $q \approx 2k_f$. Анализ показывает, что эта область значений q только и вносит основной вклад в величины Σ_A и Δ_{AB} (10,11). Неопределенность в величине w_{\max} обусловлена несколькими причинами. Во-первых, это точность, с которой известны энергии остоновых состояний (ϵ_n) электронов в свободном ионе. Она составляет несколько процентов для электронов внутренних оболочек и до десяти и более процентов - для внешних. Во-вторых, тем, насколько хорошо определены так называемые остоновые сдвиги - изменения в ϵ_n , происходящие при помещении иона в металл. Первая причина находится за пределами самого метода псевдопотенциала и изучается в атомных расчетах. Вторая причина связана с учетом потенциала, создаваемого в области ядра собственной ортогонализационной дыркой ψ_{OPV} (3), и учетом

обменного взаимодействия остов - полоса проводимости. В работе показано, что только за счет более корректного определения α_{OPW} удается существенно улучшить результаты расчета - избежать нефизического поведения $P_F(c)$ в сплавах.

Возвращаясь к рис. 1 в связи с температурной зависимостью P_F в Li , видим, что априорные предсказания лучше согласуются с экспериментом, чем любой вариант расчетов с использованием МП Шоу.

В сплавах $Na-K$ и $Li-Na$ априорные предсказания q (таблица 5) для более легких компонентов удовлетворительно согласуются с экспериментом и могут конкурировать с предсказаниями МП Шоу (см. таблицу 3), тогда как для тяжелых величина q оказывается неприемлемо большой. Причина этого заключается в сильной зависимости абсолютной величины P_F от энергий остовных электронов в металле, что не позволяет надеяться на улучшение результатов без достаточно точной оценки ϵ_{nl} и остовных сдвигов.

Таблица 5

Отношение $q = P_F(1) / P_F(0)$ для сплавов $Na-K$ и $Li-Na$

	Na в $Na-K$	K в $Na-K$	Li в $Li-Na$	Na в $Li-Na$
q	0,90	2,76	1,70	7,10

Сравнивая результаты концентрационной зависимости $P_F(c)$ в сплавах щелочных металлов (литий и натрий) с поливалентными (магний и алюминий) с результатами, полученными с помощью МП Шоу, мы обнаруживаем, что найденные ранее закономерности в поведении $P_F(c)$, вообще говоря, не подтверждаются. В сплаве $Li-Mg$ контактная плотность на магнии максимальна для чистого магния, а не для его примеси в литии. В сплаве $Li-Al$ P_F на чистом алюминии хотя и меньше, чем на его примеси, но незначительно. И только для сплава $Na-Al$ предсказания обоих подходов согласуются удовлетворительно. Наконец, в сплаве $Mg-Al$ априорный расчет предсказывает увеличение приведенной контактной плотности на ядре алюминия с ростом его концентрации в противоречии с результатом, полученным с использованием МП Шоу. Результаты же для магния удовлетворительно согласуются друг с другом.

В нелокальных априорных расчетах также, как и в расчетах с помощью МП Шоу, удается избежать появления нефизических результатов в предсказании $P_F(c)$ в сплавах поливалентных металлов, отмеченных нами при обсуждении локального приближения.

ВЫВОДЫ

В работе реализованы схемы расчетов псевдопотенциалов для простых металлов и их сплавов в полной нелокальной теории с использованием, как априорного, так и модельного подходов. Их эффективность повышена, во-первых, за счет явного вычисления квадратур везде, где это возможно, и, во-вторых, за счет выделения из всех участвующих в расчете величин тех, которые определяются только свойствами индивидуального иона и поэтому могут быть найдены раз и навсегда, сохранены и использованы в расчетах любых систем с участием данного иона. Эти меры позволили сократить необходимый объем вычислений до уровня, преодолимого даже без применения скоростной ЭВМ, например, на персональном компьютере.

С помощью разработанного пакета программ выполнены расчеты формфакторов априорного псевдопотенциала для простых металлов и их сплавов с целью качественного анализа эффектов нелокальности и влияния на результаты расчетов приближений, находящихся за пределами самого метода.

Существующая методика расчетов контактной плотности электронов проводимости и сдвигов Найта в модели ПСЭ обобщена на случай сплавов, псевдопотенциал которых рассматривается как нелокальный, и реализована соответствующая численная схема. Для повышения ее эффективности использованы те же приемы, что и описанные выше. В итоге создан комплекс программ, позволяющий оценивать интересующие нас величины при произвольном выборе вида псевдопотенциала или компонентов бинарного сплава простых металлов. С его помощью впервые выполнено систематическое исследование поведения контактной плотности на ядрах простых металлических систем в зависимости от их термодинамического состояния и в тех случаях, когда это возможно, дано сравнение с опытными данными.

По результатам расчетов можно сделать следующие заключения.

1. В случае локальных модельных потенциалов результат расчета контактной плотности наиболее существенно зависит от выбора вида МП и способа подгонки его параметров. Локальное приближение приводит к неудовлетворительным результатам для легких металлов, где эффекты нелокальности ПП наиболее ярко выражены, и для сплавов ЦМ с поливалентными ввиду нефизического поведения зависимости $P_F(c)$.
2. В полной нелокальной теории при использовании МП Шоу фактически исчезает источник неопределенности, связанный с определением его параметров. Главными причинами, влияющими на ре-

зультаты расчета КП, становятся качеством структурных данных и выбор способа описания обменно-корреляционного взаимодействия в полосе проводимости. В зависимости от последнего КП изменяется на 10-30%. По сравнению с локальным использование нелокального подхода явно улучшило результаты только в случае лития, а в сплавах позволило избежать нефизического поведения $P_F(c)$. В сплавах ЦМ предсказания МП Шоу можно согласовать с опытными данными за счет выбора вида обменно-корреляционных поправок в полосе проводимости. Этот выбор, однако, нельзя сделать одним и тем же для разных сплавов.

3. В априорных расчетах чистых металлов величина КП систематически занижена по отношению к таковой с МП Шоу и без учета поляризационного фактора приводит к худшему согласию с опытными данными о сдвигах Найта. Однако, учет фактора Λ делает преимущества модельных расчетов неочевидными. Кроме того, оказывается, что в априорном подходе весьма существенна точность в определении основных состояний в металле, в повышении которой заключается возможность улучшения предсказательной способности метода. В частности, только за счет более корректного вычисления основных сдвигов удается исключить нефизическое поведение $P_F(c)$ в сплавах и воспроизвести температурную зависимость P_F в литии.
4. Предсказания модельных и априорных вариантов нелокальных расчетов нередко находятся в противоречии друг с другом. Окончательный выбор между ними можно будет сделать после использования указанной выше возможности совершенствования априорной схемы, уточнения структурных характеристик жидких сплавов и расширения круга пригодных для анализа опытных ЯМР-данных.

Содержание диссертации изложено в следующих публикациях:

- [1] Болотникова Н.А. Априорный расчет псевдопотенциальных характеристик элементов четвертого периода. - В кн.: Автоматизация энергосистем и энергоустановок промышленных предприятий. - Челябинск. - 1985. - С. 111-114.
- [2] Болотникова Н.А., Бескачко В.П., Вяткин Г.П. Эффекты нелокальности в методе псевдопотенциала. Сравнение априорного и модельного подходов // Тезисы научных сообщений V Всесоюзной конференции. Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов. 21 - 23 сентября. Ч. 1. Теория жидких и аморфных металлов. - Свердловск: УНЦ АН СССР. - 1983. - С. 181-183
- [3] Болотникова Н.А., Бескачко В.П. Расчет сдвига Найта в жидких

металлах с использованием нелокальных псевдопотенциалов: модельный и априорный подходы // Тезисы VII Всесоюзной конференции. Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов. Челябинск. - 1990. - Т.1. - Ч.1. - С. 36-39.

[4] Болотникова Н.А., Бескачко В.П. Расчет сдвигов Найта в сплавах простых металлов методом псевдопотенциала // Тез. Першої Української конференції. Структура і фізичні властивості неупорядкованих систем. Ч.1. Теорія неупорядкованих систем. Експериментальні дослідження рідин. - Львів. - 12-16 жовтня 1993. - С. 63.

[5] Болотникова Н.А., Бескачко В.П. Расчет контактной плотности электронов на ядрах в простых металлах и их сплавах // Тезисы VIII Всероссийской конференции. Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов. Екатеринбург. 1994. - Челябинск. - 1994. - Т.1. - Ч.1. - С. 46.

[6] Бескачко В.П., Болотникова Н.А., Вяткин Г.П. Априорный расчет контактной плотности электронов в жидких металлах // Высокотемпературные расплавы. - 1996. - N 1. - С. 65-76.

[7] Болотникова Н.А., Бескачко В.П., Вяткин Г.П. Расчет контактной плотности электронов в сплавах простых металлов с использованием нелокальных псевдопотенциалов // Тезисы 3-го Российского семинара. Компьютерное моделирование физико - химических свойств стекол и расплавов. - Курган. КГУ. - 1996. - С. 55-56.

[8] Болотникова Н.А., Бескачко В.П., Вяткин Г.П. Сдвиг Найта в сплавах и его интерпретация в модели ПСЭ // Препринт ЮУрГУ, 1998, 30 с.

[9] Болотникова Н.А., Бескачко В.П., Вяткин Г.П. Контактная плотность электронов в сплавах в модели ПСЭ: расчеты в локальном приближении // Препринт ЮУрГУ, 1998, 37 с.

[10] Болотникова Н.А., Бескачко В.П., Вяткин Г.П. // Контактная плотность электронов в сплавах в модели ПСЭ: расчеты в полной нелокальной теории // Препринт ЮУрГУ, 1998, 28 с.

Вяткин

Издательство Южно - Уральского государственного
университета

ЛР N 020364 от 10.04.97. Подписано в печать 09.02.98. Формат
60*84 1/16. Печать офсетная. Усл. печ. л. 1,16. Уч. - изд. л. 1.

Тираж 100 экз. Заказ 52/70.

УОП Издательства. 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.