

Влияние поправок обмена и корреляции на расчет физических свойств простых металлов.

Сунцова Марина Владимировна

аспирант

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: shankova_m@mail.ru

В работе предложены расчеты ряда физических свойств простых металлов (на примере алюминия) с использованием компьютерного моделирования. Целью данной работы было изучения влияния поправок на обмен и корреляцию в газе электронов проводимости на свойства, рассчитанные теоретическим способом, сопоставление результатов расчета с экспериментальными данными и нахождение поправок на обмен и корреляцию, которые наилучшим образом описывают все рассмотренные свойства. Для этого был использован модельный локальный псевдопотенциал Хейне-Абаренкова-Анималу. Метод определения данного псевдопотенциала в металлах является обобщением метода квантовых дефектов, где информация о потенциале и волновых функциях электронов внутренних оболочек получается из спектроскопических данных об атомных уровнях энергии. Такой псевдопотенциал обладает тем преимуществом, что включает в себя экспериментальные поправки, учитывающие обменное взаимодействие и корреляцию между электронами проводимости и электронами внутренних оболочек.

В настоящее время существует большое количество поправок на обмен и корреляцию, в данной работе я привела наиболее распространенные из них, а именно: поправка на обмен и корреляцию Хаббард и Шем (HS), поправка на обмен и корреляцию Гелдарта и Воско (GV), поправка на обмен и корреляцию Кляйнмана и Лангреса (KL), поправка на обмен и корреляцию Сингви, Тоси, Ланда и Сьеландер (STLS), поправка на обмен и корреляцию Шоу (S), поправка на обмен и корреляцию Вашишта и Сингви (VS). На рис.1 приведены поправки на обмен и корреляцию $f(q)$ в зависимости от волнового вектора q для Al.

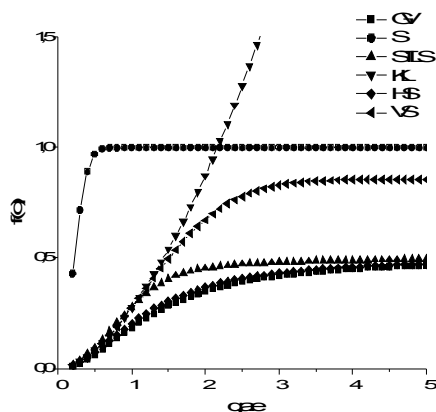


Рис.1. Зависимость поправок на обмен и корреляцию от модуля волнового вектора.

В настоящей работе приведен расчет следующих свойств: фононный спектр, силовые и упругие постоянные, полная энергия, а так же сравнительный анализ формафакторов, характеристических функций зонной структуры, потенциалов парного взаимодействия. Выявлено, что существуют наиболее чувствительные свойства к поправке на обмен и корреляцию, и наименее чувствительные. К наиболее чувствительным свойствам к поправкам на обмен и корреляцию относятся силовые и упругие постоянные, фононный спектр, а к наименее чувствительным — полная энергия.

Наилучшее согласие рассчитываемых значений силовых и упругих постоянных, а так же некоторых спектров с экспериментальными достигается при использовании поправки на обмен и корреляцию предложенную Гелдартом и Воско.

Литература

1. Heine V., Abarenkov I., A new method for the electronic structure of metals, Phil. Mag., v.4, p451, 1964.
2. Harrison W.A. Pseudopotentials in Theory of Metals, N.Y., 1966(перев.:

Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. Изд. «Мир», М., 1968)