



HAL
open science

**Pseudopotentiel de Bachelet, Hamann et Schlüter :
calcul du facteur de forme et des propriétés de métaux
et alliages liquides**

Nabila Koubaa Gargouri Koubaa

► **To cite this version:**

Nabila Koubaa Gargouri Koubaa. Pseudopotentiel de Bachelet, Hamann et Schlüter : calcul du facteur de forme et des propriétés de métaux et alliages liquides. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paul Verlaine - Metz, 1990. Français. NNT : 1990METZ006S . tel-01775855

HAL Id: tel-01775855

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01775855>

Submitted on 24 Apr 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

THESE

DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE METZ BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE
- METZ

EN GENIE PHYSIQUE ET MECANIQUE

N° inv.

19900145

Cote

S/M₃ 90/6

présentée par

Nabila KOUBAA épouse **GARGOURI**

loc

Magasin

PSEUDOPOTENTIEL DE BACHELET, HAMANN ET SCHLÜTER

CALCUL DU FACTEUR DE FORME ET

DES PROPRIETES DE METAUX

ET ALLIAGES LIQUIDES

Soutenue le 9 avril 1990, devant la commission d'examen :

Président : **M. J. P. GASPARD** Professeur (Université de Liège)

Examineurs : **M. J. G. GASSER** Professeur (Université de Metz)

M. R. KLEIM Professeur (Université de Metz)

M. Y. LIMOGÉ Docteur ès Sciences (C E A Saclay)

M. C. REGNAUT Maître de Conférences (Saint Quentin)

UNIVERSITE DE METZ

Président : M. DURAND Dominique

U F R Sciences (Sci. F.A. et M.I.M)

Directeurs : M. REMY-VINCENT Joël et M. CROCHARD Claude

Professeurs

MATHEMATIQUES

M. ARNAL	Didier
M. CHIPOT	Michel
M. DAX	Jean-Pierre
M. RHIN	Georges
M. ROUX	André
M ^{me} SAINT JEAN PAULIN	Jeanine
M. SALLET	Gauthier
M. SCHMITT	Bruno

INFORMATIQUE

M. GARDAN	Yvon
M. GOVAERT	Gérard

MECANIQUE

M. BUISSON	Manuel
M. FERRON	Gérard
M. FRESSENGEAS	Claude
M. MOLINARI	Alain
M. PLUVINAGE	Guy
M. POTIER-FERRY	Michel
M. WEBER	Jean-Daniel

SCIENCES PHARMACOLOGIQUES

M. BLOCK	Jean-Claude
M. PELT	Jean-Marie
M ^{me} VASSEUR	Paule

BIOLOGIE

M. NOURRISSON	Michel
M. PIHAN	Claude

PHYSIQUE - ELECTRONIQUE

M. BARO	Raymond
M. BRETONNET	Jean-Louis
M. CARABATOS	Constantin
M. CERTIER	Michel
M. CHARLIER	Alphonse
M. DURAND	Dominique
M. ESLING	Claude
M. FONTANA	Marc
M. GASSER	Jean-Georges
M. HEIZMANN	Jean-Julien
M. KLEIM	Roland
M. KUGEL	Godefroy
M. LAURENT	Claude
M. LEPLEY	Bernard
M. LOULERGUE	Jean-Claude
M ^{me} PHILIPPE	Marie-Jeanne
M. STEBE	Bernard
M. TAVARD	Claude
M. UZAN	Edmond

CHIMIE

M ^{me} CAGNIANT	Denise
M. FALLER	Pierre
M. LECUIRE	Jean-Marie
M. MULLER	Jean-François
M. PAQUER	Daniel
M. WENDLING	Edgar

A mon mari, avec tout mon amour.

*A mes parents, mes frères et sœurs et à toute ma famille,
avec mon affection.*

A mes amis.

A tous ceux qui me sont chers.

Remerciements

Le présent travail a été effectué au Laboratoire de Physique des Liquides et Interfaces à l'Université de Metz.

Je voudrais particulièrement remercier Monsieur le Professeur R. KLEIM de m'avoir accueillie dans ce laboratoire et d'avoir aimablement accepté d'être le rapporteur de ce travail.

Je ne saurais jamais oublier l'aide efficace de Monsieur le Professeur J.G. GASSER qui a dirigé cette thèse. Il m'a guidée et conseillée tout au long de ce travail, sans peine ni relâche. Qu'il trouve ici l'expression de ma profonde reconnaissance.

Je suis heureuse de témoigner toute ma gratitude à Monsieur C. REGNAUT, Maître de Conférences à l'Université de Saint Quentin pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail. Il a aussi eu l'amabilité de participer au jury et d'être le rapporteur de cette thèse.

Monsieur J.P. GASPARD, Professeur à l'Université de Liège m'a fait le grand honneur d'avoir accepté d'être le président du jury de cette thèse. Qu'il me soit permis de lui exprimer mes vifs remerciements.

Monsieur Y. LIMOGÉ, Docteur ès Sciences à Saclay (C E A) a fait également parti de la commission d'examen, malgré ses multiples tâches. Je le prie d'accepter le témoignage de ma reconnaissance.

Il m'est agréable d'adresser mes sincères remerciements à tous mes collègues du laboratoire et de l'Université pour leurs nombreux encouragements et le soutien moral, dont ils n'ont pas cessé de témoigner à mon égard.

Enfin, je voudrais dire à toutes les personnes qui ont participé à la réalisation pratique de ce travail, que leur précieuse collaboration m'a beaucoup touchée. Qu'ils trouvent ici l'expression de toute ma reconnaissance.

TABLE DES MATIERES

	<u>Page</u>
<u>Introduction</u>	1
<u>Chapitre I</u>	3
<u>THEORIE DES PSEUDOPOTENTIELS ET DES MODELES DE POTENTIEL DANS LES METAUX</u>	
I - 1 - Introduction.	3
I - 2 - Approximations de la théorie.	4
I - 3 - Modèle de potentiel dans le métal.	4
I - 4 - Modèle de potentiel de HEINE-ABARENKOV (H-A).	6
I - 5 - Modèle de potentiel d'ASHCROFT.	8
I - 6 - Modèle de potentiel de SHAW.	8
I - 7 - Lacune de charge ("depletion hole").	10
I - 8 - Ecrantage autocohérent du modèle de potentiel.	11
I - 9 - Corrections des masses effectives.	18
I - 10 - Corrections d'échange et corrélation.	20
I - 11 - Expressions des facteurs de forme à partir des modèles de SHAW et de H-A.	22
I-11-1 Facteur de forme de SHAW.	22
I-11-2 Facteur de forme de H-A.	26
I-11-3 Modèle de potentiel de HEINE-ABARENKOV à écrantage local ("SIMPLE-MODEL-POTENTIEL") : S.M.P.	27
I - 12 - La caractéristique énergie-vecteur de transfert ("energy wave-number characteristic").	28
I-12-1 Corrections des masses effectives.	31
I-12-2 Corrections d'échange et corrélation.	31
I-12-3 Corrections des masses effectives et d'échange et corrélation.	32
<u>Chapitre II</u>	33
<u>MODELE DE PSEUDOPOTENTIEL DE BACHELET, HAMANN et SCHLÜTER</u>	
II - 1 - Introduction.	33
II - 2 - Propriétés des pseudopotentiels de BACHELET, HAMANN et SCHLÜTER (B.H.S).	33
II - 3 - Calcul du modèle de pseudopotentiel de B.H.S.	35

II - 4 - Calcul du facteur de forme analytique obtenu à partir du modèle de pseudopotentiel de B.H.S.	40
II - 5 - Résultats et discussion des facteurs de forme de B.H.S.	43
II-5-1 Ecrantage du modèle de pseudopotentiel de B.H.S.	44
II-5-2 Facteurs de forme pour 25 éléments.	46

Chapitre III

56

CALCUL DES PROPRIETES DE TRANSPORT ELECTRONIQUE

III - 1 - Introduction.	56
III - 2 - Equation de BOLTZMANN.	56
III - 3 - La conductivité électrique.	57
III - 4 - Le temps de relaxation.	58
III - 5 - La résistivité électrique.	60
III - 6 - Le pouvoir thermoélectrique absolu.	61
III - 7 - La fonction d'interférence.	63
III - 8 - Résistivité et pouvoir thermoélectrique des alliages.	65

Chapitre IV

67

CALCUL DE LA RESISTIVITE ET DU POUVOIR THERMOELECTRIQUE ABSOLU A PARTIR DU MODELE DE B.H.S

IV - 1 - Introduction.	67
IV - 2 - Résistivités de 22 métaux liquides purs.	67
IV - 3 - Le système gallium-germanium.	69
IV-3-1 Résistivité du gallium et du germanium purs.	69
IV-3-2 Pouvoir thermoélectrique du gallium et du germanium purs.	71
IV-3-3 Résistivité et pouvoir thermoélectrique du système Ga-Ge.	72

Chapitre V

73

CALCUL DU POTENTIEL EFFECTIF A PARTIR DU MODELE DE PSEUDOPOTENTIEL DE B.H.S

V - 1 - Introduction.	73
V - 2 - Le potentiel effectif dans les corps purs.	74
V - 3 - Effet de la fonction diélectrique sur le potentiel effectif.	77
V - 4 - Le potentiel effectif dans l'alliage.	79
V - 5 - Effet d'alliage sur le potentiel effectif.	81
V - 6 - Conclusion.	83

<u>Conclusion</u>	84
<u>Annexe A</u>	86
<u>CALCUL DU FACTEUR DE FORME ANALYTIQUE A PARTIR DU MODELE DE PSEUDOPOTENTIEL DE B.H.S</u>	
I - Partie locale.	86
II - Partie non locale.	89
<u>Annexe B</u>	100
<u>PROGRAMMES DE CALCUL RELATIFS AU MODELE DE PSEUDOPOTENTIEL DE B.H.S</u>	
I - Calcul du pseudopotentiel.	100
II - Calcul du facteur de forme, de la résistivité et du pouvoir thermoélectrique absolu.	107
III - Calcul de la fonction énergie-vecteur de transfert et du potentiel effectif.	125
<u>Bibliographie</u>	144

INTRODUCTION

Dans la théorie de l'état solide, on ne recherche pas des "lois fondamentales" de la physique, mais on essaye de comprendre les propriétés de systèmes solides ou liquides en appliquant des principes physiques bien connus.

En effet, on pense que la matière condensée peut être décrite à l'aide d'une équation de Schroedinger, qui prend en compte l'énergie cinétique de tous les ions et électrons et leurs interactions. Pour un échantillon macroscopique, le problème est très complexe vu le nombre de particules qu'il contient. Cependant, il faut faire des approximations.

Le problème peut être ramené à une équation de Schroedinger relative aux électrons de conduction. A ce stade on n'a pas tout résolu, car la contribution des ions est donnée par un potentiel qui est très profond au voisinage du cœur ionique.

La théorie des pseudopotentiels ou des modèles de potentiel consiste à remplacer le potentiel ionique par un modèle peu profond en conservant les propriétés de diffusion des électrons. Cette théorie semble assez intéressante, dans la mesure où elle permet de calculer des propriétés de structure électronique des métaux.

En général, un modèle de potentiel est non local (son action sur une fonction d'onde n'est pas un simple produit) et ses paramètres dépendent de l'énergie. Ceci complique le calcul des propriétés physiques.

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés au modèle de pseudopotentiel de BACHELET, HAMANN et SCHLÜTER (B.H.S) [1], qui est indépendant de l'énergie, transférable et conservant la norme... Ces caractéristiques devraient permettre de mieux décrire les propriétés électroniques des alliages.

Dans le premier chapitre, nous développons la théorie des modèles de potentiel dans les métaux.

Au cours du second chapitre, nous déterminons le modèle de pseudopotentiel de B.H.S et nous calculons le facteur de forme déduit de

ce modèle d'une manière analytique. Ce calcul est original et à notre connaissance, il n'a pas été réalisé auparavant. Nous comparons les facteurs de forme de B.H.S pour 25 éléments purs avec ceux obtenus à partir du S.M.P [2] (modèle de potentiel de HEINE-ABARENKOV à écrantage local).

Au troisième chapitre, nous rappelons la théorie de ZIMAN [3], qui permet de déterminer les propriétés de transport électronique.

Au quatrième chapitre, nous réalisons le calcul de la résistivité et du pouvoir thermoélectrique de quelques métaux et alliages liquides avec le modèle de B.H.S et le S.M.P. Nous comparons nos résultats théoriques à l'expérience.

Le cinquième chapitre est réservé au calcul du potentiel effectif.

Au cours de l'annexe A, nous développons les calculs du facteur de forme analytique de B.H.S.

L'annexe B est réservé aux listings des programmes de calcul.

CHAPITRE I

THEORIE DES PSEUDOPOTENTIELS ET DES MODELES DE POTENTIEL DANS LES METAUX

I - 1 - INTRODUCTION

Un métal peut être considéré comme un ensemble d'ions positifs, noyés dans un nuage d'électrons. La distribution de ces ions et électrons et leur mouvement déterminent l'ensemble des propriétés du métal.

Les pseudopotentiels ont été introduits pour simplifier les calculs des propriétés électroniques en éliminant la nécessité d'inclure les états du cœur des atomes et le potentiel profond, responsable de la structure du cœur. Deux approches ont été utilisées. L'une, celle des "modèles de pseudopotentiels" ou ("potentiels modèles"), est une théorie de type "premiers principes". On fabrique un "potentiel modèle" non local et dépendant de l'énergie, dont les paramètres sont ajustés au moyen de données expérimentales, fournies par la physique atomique. Cette approche a été développée par ABARENKOV, ANIMALU, HEINE, SHAW, HARRISON, SO, MOORE, WANG....[2,4,5,6,7,8,9,10]. Une autre approche est celle des pseudopotentiels obtenus par orthogonalisation des fonctions d'onde des électrons de valence sur les états du cœur (méthode O.P.W). Cette approche a été développée en particulier par AUSTIN, HEINE, WEAIRE, SHAM [11, 12,13] et pour les métaux liquides par HAFNER [14].

Dans la théorie des pseudopotentiels, comme dans la théorie des modèles de potentiel, l'idée fondamentale est de remplacer le potentiel ionique du cœur qui est assez profond par un potentiel faible tout en conservant l'énergie des états électroniques.

I - 2 - APPROXIMATIONS DE LA THEORIE

Le métal est décrit par une équation de Schroedinger qui prend en compte l'énergie cinétique de tous ses ions et électrons et l'interaction entre eux.

a) L'approximation adiabatique ou l'approximation de BORN-OPPENHEIMER

Les ions sont des particules lourdes, par contre les électrons sont des particules légères. Cette approximation consiste à supposer que les ions sont immobiles et permet donc de résoudre l'équation de Schroedinger décrivant le mouvement des électrons dans le champ de potentiel des ions fixes.

b) Approximation du champ autocohérent

Elle permet de remplacer l'interaction entre les électrons par une interaction moyenne. Cela revient à dire que chaque électron se déplace dans un potentiel moyen dû à tous les autres électrons.

c) L'approximation des petits cœurs

Dans cette approximation, on suppose que les niveaux d'énergie électronique sont séparés en états de cœur et en états de conduction. Les propriétés qui en découlent sont les suivantes :

- Il n'y a pas de recouvrement entre les cœurs voisins, de façon que les interactions soient coulombiennes.

- Le potentiel dans le cœur produit par les électrons de conduction et les cœurs voisins est supposé constant.

Cette approximation n'est pas valable pour les métaux nobles ou de transition du fait du recouvrement entre ions voisins.

I - 3 - MODELE DE POTENTIEL DANS LE METAL

En tenant compte des approximations précédentes, l'équation de Schroedinger qui décrit un électron du métal s'écrit :

$$(T + V + V_e) |\psi_k\rangle = E_k |\psi_k\rangle \quad (1-3-1)$$

où T est l'énergie cinétique de l'électron, V l'énergie d'interaction entre l'électron et l'ensemble des ions du métal et V_e le potentiel autocohérent dû à tous les autres électrons de conduction.

ψ_k et E_k sont respectivement la fonction d'onde et l'énergie de l'électron dans l'état \vec{k} .

Le premier but de la théorie des métaux est de trouver les fonctions d'onde et les relations de dispersion en énergie pour les électrons dans le métal. A partir de ces grandeurs, les propriétés du métal peuvent se calculer aisément.

La résolution de l'équation (1-3-1) est encore difficile et la théorie des perturbations ne s'applique pas dans ce cas du fait que le potentiel $V(r)$ est profond au voisinage d'un ion (voir fig. 1-1). Dans cette région la fonction d'onde électronique ψ_k oscille fortement.

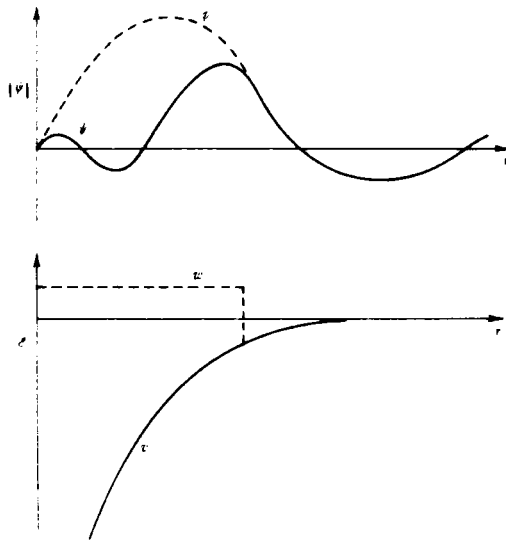


Fig. 1-1 (ZIMAN "Principles of the theory of solids" [3]).

V et ψ : Potentiel et fonction d'onde réels, w et ϕ : Pseudopotential et pseudofonction d'onde.

L'idée fondamentale de la théorie des pseudopotentiels ou des modèles de potentiel est de remplacer le potentiel profond $V(r)$ du cœur de l'ion par un "modèle de potentiel" peu profond $W(r)$, et la fonction d'onde $\psi_k(r)$ par une pseudofonction d'onde $\chi_k(r)$. Le potentiel $W(r)$ est appelé "modèle de potentiel nu" et il est construit de façon à conserver le spectre d'énergie électronique E_k . La pseudofonction d'onde $\chi_k(r)$ devient monotone et variera d'une manière plus plus douce dans la région du cœur ionique (Fig. 1-1). Dans ces conditions, l'équation (1-3-1) devient :

$$(T + W(r) + V_e) |\chi_k\rangle = E_k |\chi_k\rangle \quad (1-3-2)$$

Le potentiel $W(r)$ est assez faible pour pouvoir appliquer la théorie des perturbations. La fonction d'onde χ_k peut être développée en ondes planes. Dans le calcul des propriétés physiques il est suffisant de donner la fonction χ_k et l'énergie E_k au 2^{ème} ordre.

I - 4 - MODELE DE POTENTIEL DE HEINE-ABARENKOV (H-A)

La procédure de construction d'un modèle de potentiel a été introduite par HEINE et ABARENKOV [4,5]. On construit le modèle de potentiel pour l'ion libre, c'est-à-dire on ignore les effets des électrons de conduction. On place ensuite l'ion dans la matière condensée, on tient compte des interactions entre les électrons de conduction et les électrons du cœur, ce qui donne un décalage de l'énergie (core shift). Les paramètres du modèles seront modifiés. Enfin, on prend en compte les interactions entre les électrons de conduction dans l'écrantage autochérent du potentiel.

HEINE et ABARENKOV ont choisi un rayon $R_M > R_C$ (rayon du cœur ionique), au delà duquel le potentiel est purement coulombien. A l'intérieur de la sphère de rayon R_M , et pour chaque valeur du moment angulaire l , ils ont supposé que le potentiel est constant. L'expression du modèle de potentiel de H-A pour l'ion libre comprend deux termes :

- un terme local coulombien

$$W_L(r) = \begin{cases} 0 & r < R_M \\ -Z/r & r > R_M \end{cases} \quad (1-4-1)$$

Z est le nombre d'électrons de valence participant à la conduction.

(Dans ce chapitre on utilise les unités atomiques : $\hbar = m = e = 1$, les énergies sont en doubles-Rydbergs. Les vecteurs sont notés par le signe \sim).

- et un terme non local

$$W_{NL}(r) = \begin{cases} - \sum_{l=0}^{\infty} A_l(E) P_l & r < R_M \\ 0 & r > R_M \end{cases} \quad (1-4-2)$$

P_l est l'opérateur de projection qui donne la composante correspondant au nombre quantique l , dans l'espace des harmoniques sphériques Y_l^m .

$$P_l = \sum_{m=-l}^l |Y_l^m\rangle \langle Y_l^m|$$

Les paramètres $A_l(E)$ doivent être ajustés de façon à permettre au modèle de potentiel d'avoir le même spectre d'énergie que le vrai potentiel. Ceci est réalisé en appliquant la méthode du défaut quantique (HAM [15]). Cette méthode consiste à égaliser les dérivées logarithmiques des fonctions d'ondes externes et internes au cœur de l'ion en R_M .

Pour une valeur l du moment angulaire, les fonctions d'onde doivent satisfaire les équations de Schroedinger radiales suivantes :

$$\frac{d^2}{dr^2} \chi_l(r) - \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - 2 \frac{Z}{r} - 2E \right] \chi_l(r) = 0 \quad \text{si } r < R_M \quad (1-4-3)$$

$$\frac{d^2}{dr^2} \psi_l(r) - \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - 2A_l(E) - 2E \right] \psi_l(r) = 0 \quad \text{si } r > R_M \quad (1-4-4)$$

Les fonctions d'ondes internes solutions de l'équation (1-4-3) sont des fonctions de Bessel sphériques et les fonctions d'onde externes solutions de l'équation (1-4-4) sont des fonctions de Whittaker (SHAW [16]). Pour les valeurs de $A_l(E)$ on peut trouver une infinité de solutions qui correspondent chacune à une fonction d'onde avec un nombre de nœuds différent. Le plus simple est de prendre la valeur de $A_l(E)$ qui donne la fonction d'onde sans nœuds. Dans ce cas la valeur de $A_l(E)$ est la plus faible, ce qui justifie l'emploi de la théorie des perturbations. En général, la relation qui donne A_l en fonction de l'énergie est linéaire. Le terme $A_l(E)$ peut-être déterminé par interpolation-extrapolation (ANIMALU [7]).

HEINE et ABARENKOV n'ont utilisé que trois coefficients $A_0(E)$, $A_1(E)$ et $A_2(E)$ dans leur modèle de potentiel. Ils ont supposé que $A_l = A_2$ pour $l > 2$ vu qu'il n'y a pas de valeurs expérimentales fournies par la spectroscopie pour $l > 2$. Dans ces conditions, et en utilisant la relation de fermeture pour les opérateurs de projection, le modèle de potentiel de H-A devient :

$$W_L(r) = \begin{cases} 0 & r < R_M \\ -Z/r & r > R_M \end{cases} \quad (1-4-5)$$

$$\text{et } W_{NL}(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r > R_M \\ -(A_0 - A_2)P_0 - (A_1 - A_2)P_1 - A_2 & \text{si } r < R_M \end{cases} \quad (1-4-6)$$

I - 5 - MODELE DE POTENTIEL D'ASHCROFT

ASHCROFT [17] a repris le modèle de potentiel de H-A et l'a simplifié. Son modèle, pour lequel l'interaction est purement coulombienne à l'extérieur du cœur et nulle à l'intérieur, possède un seul paramètre, le rayon du cœur R_C .

$$W_0(r) = \begin{cases} 0 & r < R_C \\ -Z/r & r > R_C \end{cases} \quad (1-5-1)$$

ASHCROFT a donc pris une valeur nulle pour toutes les constantes A_i à l'intérieur du cœur ionique. Ce modèle est local et son unique paramètre est déterminé par ajustement d'une propriété macroscopique, comme par exemple la résistivité ou le pouvoir thermoélectrique de métaux liquides. C'est en fait un modèle phénoménologique et non de type "premiers principes". Le modèle de potentiel de H-A ainsi simplifié par ASHCROFT est local et ne dépend pas de l'énergie.

Cependant, le paramètre R_C peut être rendu dépendant de l'énergie. C'est le travail d'ASHCROFT [18]; il a calculé des propriétés physiques de métaux liquides, et la dépendance en énergie ainsi introduite intervient explicitement dans le calcul du pouvoir thermoélectrique des métaux liquides. Il y a donc moyen d'affiner les calculs à partir de modèles très simples en introduisant une dépendance en énergie des paramètres.

I - 6 - MODELE DE POTENTIEL DE SHAW

Le modèle de potentiel de HEINE-ABARENKOV a été repris et amélioré par plusieurs auteurs. SHAW [19] a introduit une condition d'optimisation. HALLERS [20] a utilisé une combinaison du modèle de H-A et de SHAW. WOO, WANG et MATSUURA [21] ont développé une version indépendante de l'énergie (EIMP) et l'ont utilisée pour faire des calculs de résistivités et de potentiels effectifs d'alliages métalliques liquides (WANG, LAI et SO [22,23]).

SHAW a repris le modèle de potentiel de H-A et a proposé deux modifications. Dans la première, il suggère de remplacer le potentiel dans le cœur par $A_l(E)$ uniquement si les valeurs expérimentales le permettent ($l \leq l_0$, $l_0 = l \text{ max}$). Pour les valeurs de $l > l_0$, il utilise le vrai potentiel. Il dit que ce potentiel quand $l > l_0$ est assez faible pour appliquer la théorie des perturbations. Il constate que les fonctions d'onde de la bande de conduction pour $l > l_0$ n'ont pas de nœuds à l'intérieur de R_M et qu'il n'y a par conséquent pas lieu d'affaiblir d'avantage le potentiel en le modélisant. Pour la majorité des métaux normaux $l_0 = 2$, cela élimine le problème du choix des paramètres pour $l > 2$.

Dans leur modèle, H-A ont utilisé un seul rayon R_M qui est constant pour toutes les valeurs de l .

La deuxième modification de SHAW consiste à prendre un rayon $R_l(E)$ différent pour chaque valeur de l et dépendant de l'énergie. Ceci conduit à la relation d'optimisation :

$$A_l(E) = \frac{Z}{R_l(E)} \quad (1-6-1)$$

qui réduit les oscillations du facteur de forme en supprimant la discontinuité non physique en R_M . En tenant compte de ces deux modifications, le modèle de potentiel de SHAW pour l'ion libre s'écrit :

$$W_0(r) = V_b(r) - \sum_{l=0}^{l_0} \theta(R_l - r) (A_l(E) + V_b(r)) P_l \quad (1-6-2)$$

$$\theta(r) \text{ est la fonction échelon : } \theta(r) = \begin{cases} 1 & \text{si } r > 0 \\ 0 & \text{si } r < 0 \end{cases}$$

$V_b(r)$ est le potentiel de l'ion nu :

$$V_b(r) = -\frac{Z}{r} \quad \text{pour } r > R_l$$

En prenant un potentiel de cœur :

$$V_{\text{cœur}}(r) = V_b(r) + \frac{Z}{r} \quad (1-6-3)$$

et un rayon de cœur R_C , l'expression du potentiel devient :

$$W_0(r) = -Z/r - \sum_{l=0}^{l_0} \theta(R_l - r) (A_l(E) - Z/r) P_l + \sum_{l=l_0+1}^{\infty} \theta(R_C - r) V_{\text{cœur}}(r) P_l \quad (1-6-4)$$

SHAW a montré que le dernier terme de W_0 a une contribution négligeable, ce qui rend son modèle plus simple. L'expression finale du modèle de SHAW optimisé (O.M.P) pour l'ion non écrané est :

$$W_0(r) = -\frac{Z}{r} - \sum_{l=0}^{l_0} \theta(R_l - r) (A_l(E) - Z/r) P_l \quad (1-6-5)$$

I - 7 - LACUNE DE CHARGE ("DEPLETION HOLE")

Pour déterminer l'écrantage autocohérent du modèle de potentiel, il faut calculer la densité électronique de conduction qui est donnée par :

$$n(\vec{r}) = \sum_{k \leq k_F} \psi_k^*(\vec{r}) \psi_k(\vec{r}) \quad (1-7-1)$$

k_F est le nombre d'onde de FERMI.

Comme la fonction d'onde ψ_k n'est pas connue, $n(\vec{r})$ peut s'écrire :

$$n(\vec{r}) = \sum_{k \leq k_F} (\chi_k^*(\vec{r}) \chi_k(\vec{r})) + \rho(\vec{r}) \quad (1-7-2)$$

où $\rho(\vec{r})$ est la densité de lacune de charge qui est une conséquence du remplacement de la vraie fonction d'onde par une fonction d'onde de modèle (SHAW et HARRISON [8]). La lacune de charge ρ provient de l'absence des oscillations de la fonction d'onde dans le cœur ionique, et la seule information dont on dispose est qu'elle est nulle à l'extérieur du cœur. La lacune de charge totale s'écrit :

$$\rho = \sum_{k \leq k_F} \int_{\Omega_M} d^3r \left[\psi_k^*(\vec{r}) \psi_k(\vec{r}) - \chi_k^*(\vec{r}) \chi_k(\vec{r}) \right] \quad (1-7-3)$$

Ω_M est le volume de la sphère de rayon R_M . SHAW et HARRISON [8] ont montré que la lacune de charge peut s'exprimer uniquement en fonction du modèle de potentiel par la relation suivante :

$$\rho = \sum_{k \leq k_F} \int_{\Omega_M} d^3r \chi_k^*(r) \frac{\partial W(E_k)}{\partial E_k} \chi_k(r) \quad (1-7-4)$$

Dans l'écrantage autocohérent du modèle de potentiel nous aurons besoin de la transformée de Fourier de la lacune de charge. SHAW l'a exprimée en fonction de la lacune de charge totale par :

$$\rho(q) = \frac{\rho}{\Omega_0} M(q, R_C) \quad (1-7-5)$$

$$\Omega_0 = \frac{\Omega}{N} = \text{volume d'un ion}$$

$M(q, R_C)$ est une fonction de modulation pour laquelle plusieurs formes ont été proposées. L'influence de cette fonction sur le facteur de forme est inférieure à un pour cent. SHAW a constaté que le plus simple est de supposer que toute la lacune de charge est concentrée en $r = 0$. Ce qui donne :

$$M(q, R_C) = 1$$

I - 8 - ECRANTAGE AUTO-COHERENT DU MODELE DE POTENTIEL

Dans le métal, les électrons de conduction forment un nuage électronique autour de l'ion. Ceci se traduit par un potentiel d'écran autocohérent V_e , ressenti par un électron et dû à tous les autres électrons de conduction. L'écrantage autocohérent a été explicité par SHAW et HARRISON [8].

Nous allons calculer le potentiel V_e dans l'approximation de HARTREE, qui consiste à ignorer l'échange et la corrélation entre les électrons. Nous verrons plus loin les changements introduits si on tient compte de ces interactions. Le potentiel V_e est déterminé à partir de la densité électronique de conduction $n(\vec{r})$ donnée par (1-7-2). La densité $n(\vec{r})$ est calculée par la théorie des perturbations appliquée à l'équation de Schroedinger électronique du modèle de potentiel (1-3-2).

Nous pouvons voir que V_e dépend de $n(\vec{r})$ et $n(\vec{r})$ dépend de V_e d'où l'autocohérence. L'équation de Schroedinger du modèle s'écrit :

$$(T + W) |\chi_k\rangle = E_k |\chi_k\rangle \quad (1-8-1)$$

avec : $W = W_0 + V_e$

W_0 est le modèle de potentiel des ions nus.

V_e est le potentiel autocohérent.

La fonction d'onde du modèle peut être développée en ondes planes :

$$|\chi_k\rangle = |\bar{k}\rangle + \sum_q a_q(\bar{k}) |\bar{k} + \bar{q}\rangle \quad (1-8-2)$$

Les $a_q(\bar{k})$ sont les coefficients du développement au premier ordre fournis par la théorie des perturbations :

$$a_q(\bar{k}) = \frac{2 \langle \bar{k} + \bar{q} | W | \bar{k} \rangle}{k^2 - |\bar{k} + \bar{q}|^2} \quad \text{pour } q \neq 0 \quad (1-8-3)$$

Le coefficient $a_0(\bar{k})$ ne peut pas être obtenu par la théorie des perturbations. SHAW [19] l'a exprimé en fonction du modèle de potentiel :

$$a_0(\bar{k}) = \frac{N}{2} \langle \bar{k} | \frac{\partial W}{\partial E_k} | \bar{k} \rangle_{\Omega_M} \quad (1-8-4)$$

où N est le nombre de sites ioniques.

Les éléments de matrice $\langle \bar{k} | \frac{\partial W}{\partial E_k} | \bar{k} \rangle$ sont traités comme des quantités du premier ordre.

Evaluons maintenant l'expression de la densité électronique de charges :

$$\begin{aligned} n(\bar{r}) &= \sum_{k \leq k_F} \chi_k^*(\bar{r}) \chi_k(\bar{r}) + \rho(\bar{r}) \\ &= \sum_{k \leq k_F} \chi_k^*(\bar{r}) \chi_k(\bar{r}) + \rho \sum_i \delta(\bar{r} - \bar{r}_i) \end{aligned} \quad (1-8-5)$$

Nous avons adopté la notation de Dirac pour indiquer que la lacune de charge est localisée sur les sites ioniques.

A l'aide des relations (1-8-2), (1-8-3) et (1-8-4), $n(\bar{r})$ prend la forme suivante au premier ordre :

$$\begin{aligned} n(\bar{r}) &= \sum_{k \leq k_F} \frac{1}{\Omega} + \sum_{k \leq k_F} \frac{N}{\Omega} \langle \bar{k} | \frac{\partial W}{\partial E_k} | \bar{k} \rangle_{\Omega_M} \\ &\quad + \frac{2}{\Omega} \sum_{k \leq k_F} \sum_{q \neq 0} a_q(\bar{k}) e^{i\bar{q}\bar{r}} + \rho \sum_i \delta(\bar{r} - \bar{r}_i) \end{aligned} \quad (1-8-6)$$

Ω est le volume du métal.

On peut noter qu'au premier ordre :

$$\rho = - \sum_{k \leq k_F} \langle \bar{k} | \frac{\partial W}{\partial E_k} | \bar{k} \rangle_{\Omega_M} \quad (1-8-7)$$

Dans l'équation (1-8-6), le premier terme est une distribution de charge uniforme qui compense exactement les charges ioniques positives. Le deuxième terme est aussi une densité uniforme qui est annulé par la somme de toutes les lacunes de charge, quand il est intégré sur le volume du métal. Les deux derniers termes sont les plus intéressants vu que leurs distributions varient dans l'espace. Notons que le troisième terme est la densité de charge d'écran.

Pour le calcul de V_e , il est plus commode de travailler dans l'espace réciproque.

La transformée de Fourier de la partie oscillante de $n(\vec{r})$ s'écrit :

$$n(q) = \frac{1}{\Omega} \int n(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} d^3r = \frac{2}{\Omega} \sum_{k \leq k_F} a_q(\vec{k}) + \frac{\rho}{\Omega_0} S(q) \quad (1-8-8)$$

$S(q)$ est le facteur de structure défini par :

$$S(q) = \frac{1}{N} \sum_i e^{-i\vec{q}\vec{r}_i} \quad (1-8-9)$$

La relation (1-8-8) est donnée dans le cas où la lacune de charge est centrée en $r = 0$ ($M(q, R_C) = 1$). Si on veut utiliser une distribution particulière, on doit multiplier le dernier terme par $M(q, R_C)$.

Dans l'expression de $n(q)$, on peut remplacer $a_q(\vec{k})$ par sa valeur donnée par (1-8-3). On obtient :

$$n(q) = \frac{4}{\Omega} \sum_{k \leq k_F} \frac{\langle \bar{k} + \vec{q} | W | \bar{k} \rangle}{k^2 - |\bar{k} + \vec{q}|^2} + \rho \frac{S(q)}{\Omega_0} \quad (1-8-10)$$

L'élément de matrice peut-être remplacé par :

$$\langle \bar{k} + \vec{q} | W | \bar{k} \rangle = \langle \bar{k} + \vec{q} | W_0 | \bar{k} \rangle + V_e(q) \quad (1-8-11)$$

$n(\mathbf{q})$ devient :

$$n(\mathbf{q}) = \frac{4}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \leq k_F} \frac{\langle \bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}} | W_0 | \bar{\mathbf{k}} \rangle}{k^2 - |\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}|^2} + \frac{4}{\Omega} V_e(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k} \leq k_F} \frac{1}{k^2 - |\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}|^2} + \rho \frac{S(\mathbf{q})}{\Omega_0} \quad (1-8-12)$$

On peut maintenant passer de la somme discrète sur tous les états occupés à une intégrale :

$$n(\mathbf{q}) = \frac{4}{\Omega} \frac{2\Omega}{8\pi^3} \int_{\mathbf{k} \leq k_F} d^3k \frac{\langle \bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}} | W_0 | \bar{\mathbf{k}} \rangle}{k^2 - |\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}|^2} + \frac{4}{\Omega} \frac{2\Omega}{8\pi^3} V_e(\mathbf{q}) \int_{\mathbf{k} \leq k_F} d^3k \frac{1}{k^2 - |\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}|^2} + \rho \frac{S(\mathbf{q})}{\Omega_0} \quad (1-8-13)$$

Dans l'espace réciproque, la densité de charge est reliée au potentiel autocohérent par l'équation de Poisson :

$$V_e(\mathbf{q}) = \frac{4\pi}{q^2} n(\mathbf{q}) \quad (1-8-14)$$

A l'aide de (1-8-14), l'équation (1-8-13) devient :

$$V_e(\mathbf{q}) = \frac{4}{\pi^2 q^2} \int_{\mathbf{k} \leq k_F} d^3k \frac{\langle \bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}} | W_0 | \bar{\mathbf{k}} \rangle}{k^2 - |\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}|^2} + \frac{4}{\pi^2 q^2} V_e(\mathbf{q}) \int_{\mathbf{k} \leq k_F} d^3k \frac{1}{k^2 - |\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}|^2} + \frac{4\pi}{q^2} \rho \frac{S(\mathbf{q})}{\Omega_0} \quad (1-8-15)$$

D'où le potentiel autocohérent $V_e(\mathbf{q})$ est donné par :

$$V_e(\mathbf{q}) \left(1 - \frac{4}{\pi^2 q^2} \int_{\mathbf{k} \leq k_F} \frac{d^3k}{k^2 - |\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}|^2} \right) = \frac{4}{\pi^2 q^2} \int_{\mathbf{k} \leq k_F} d^3k \frac{\langle \bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}} | W_0 | \bar{\mathbf{k}} \rangle}{k^2 - |\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}}|^2} + \frac{4\pi}{q^2} \rho \frac{S(\mathbf{q})}{\Omega_0} \quad (1-8-16)$$

Dans (1-7-16), l'expression :

$$1 - \frac{4}{\Pi^2 q^2} \int_{k \leq k_F} \frac{d^3 k}{k^2 - |\vec{k} + \vec{q}|^2}$$

est la fonction diélectrique statique
de HARTREE (LINDHARDT [24]).

$$\begin{aligned} \epsilon_H(q) &= 1 - \frac{4}{\Pi^2 q^2} \int_{k \leq k_F} \frac{d^3 k}{k^2 - |\vec{k} + \vec{q}|^2} \\ &= 1 + \frac{1}{2 \Pi k_F x^2} \left(\frac{1 - x^2}{2x} \text{Log} \left| \frac{1+x}{1-x} \right| + 1 \right) \end{aligned} \quad (1-8-17)$$

avec $x = q/2k_F$.

Les éléments de matrice $\langle \vec{k} + \vec{q} | W_0 | \vec{k} \rangle$ peuvent-être factorisés de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \langle \vec{k} + \vec{q} | W_0 | \vec{k} \rangle &= \frac{1}{\Omega} \int e^{i(\vec{k} + \vec{q})\vec{r}} \sum_i W_0(\vec{r} - \vec{r}_i) e^{i\vec{k}\vec{r}} d^3 r \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_i e^{i\vec{q}\vec{r}} \int e^{-i(\vec{k} + \vec{q})(\vec{r} - \vec{r}_i)} W_0(\vec{r} - \vec{r}_i) e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}_i)} d^3 r \\ &= S(q) N \langle \vec{k} + \vec{q} | W_0 | \vec{k} \rangle \end{aligned} \quad (1-8-18)$$

$S(q)$ est le facteur de structure défini en (1-8-9).

$$N \langle \vec{k} + \vec{q} | W_0 | \vec{k} \rangle = W_q^0(\vec{k}) \quad (1-8-19)$$

$W_q^0(\vec{k})$ est le facteur de forme non écranté ou nu.

L'expression finale de $V_e(q)$ devient :

$$\begin{aligned} V_e(q) &= \frac{1}{\epsilon_H(q)} \frac{4 S(q)}{\Pi^2 q^2} \int_{k \leq k_F} d^3 k \frac{N \langle \vec{k} + \vec{q} | W_0 | \vec{k} \rangle}{k^2 - |\vec{k} + \vec{q}|^2} \\ &+ \frac{4 \Pi}{\epsilon_H(q) q^2} \rho \frac{S(q)}{\Omega_0} \end{aligned} \quad (1-8-20)$$

Le potentiel autocohérent $V_e(q)$ peut être factorisé de la même façon que le modèle W_0 :

$$V_e(q) = v_e(q) S(q) \quad (1-8-21)$$

Le facteur de forme écranté s'écrit :

$$\begin{aligned} W_q(\bar{k}) &= W_q^0(\bar{k}) + v_e(q) \\ &= W_q^0(\bar{k}) + \frac{4}{\Pi^2 q^2 \epsilon_H(q)} \int_{k \leq k_F} d^3k \frac{W_q^0(\bar{k})}{k^2 - |\bar{k} + \bar{q}|^2} + \frac{4 \Pi}{q^2 \epsilon_H(q)} \frac{\rho}{\Omega_0} \end{aligned} \quad (1-8-22)$$

Pour le modèle de SHAW [19], le facteur de forme nu est:

$$W_q^0(\bar{k}) = V_q + f(\bar{k}, \bar{q}) \quad (1-8-23)$$

Avec la partie locale :
$$V_q = -N \langle \bar{k} + \bar{q} | \frac{Z}{r} | \bar{k} \rangle = -\frac{4 \Pi Z}{\Omega_0 q^2} \quad (1-8-24)$$

Et la partie non locale :

$$f(\bar{k}, \bar{q}) = -N \sum_{l=0}^{l_0} \langle \bar{k} + \bar{q} | \theta(R_l - r) (A_l - Z/r) P_l | \bar{k} \rangle \quad (1-8-25)$$

Avec les relations (1-8-17) et (1-8-23) on peut simplifier l'intégrale de l'équation (1-8-22).

$$\begin{aligned} \int_{k \leq k_F} d^3k \frac{W_q^0(\bar{k})}{k^2 - |\bar{k} + \bar{q}|^2} &= \int_{k \leq k_F} d^3k \frac{V_q + f(\bar{k}, \bar{q})}{k^2 - |\bar{k} + \bar{q}|^2} \\ &= \frac{V_q (1 - \epsilon_H(q)) \Pi^2 q^2}{4} + \int_{k \leq k_F} d^3k \frac{f(\bar{k}, \bar{q})}{k^2 - |\bar{k} + \bar{q}|^2} \end{aligned} \quad (1-8-26)$$

Le résultat final du facteur de forme écranté devient :

$$W_q(\bar{k}) = \frac{V_q + V_{dq}}{\epsilon_H(q)} + f(\bar{k}, \bar{q}) + g(q) \quad (1-8-27)$$

V_{dq} est le potentiel local provenant de la lacune de charge :

$$V_{dq} = \frac{4 \Pi \rho}{\Omega_0 q^2} \quad (1-8-28)$$

$g(q)$ est le terme qui donne l'écrantage de la partie non locale du modèle de potentiel nu.

$$g(q) = \frac{4}{\Pi^2 q^2 \epsilon_H(q)} \int_{k \leq k_F} d^3k \frac{f(\vec{k}, \vec{q})}{k^2 - |\vec{k} + \vec{q}|^2} \quad (1-8-29)$$

On constate que pour la partie locale et la lacune de charge, l'écrantage est réalisé en divisant V_q et V_{dq} par la fonction diélectrique statique.

Par contre, pour la partie non locale $f(\vec{k}, \vec{q})$ l'écrantage est plus complexe. Il est effectué en ajoutant un terme $g(q)$ qui est obtenu dans le cas général par une intégration numérique.

Dans son étude, SHAW [16] a donné des résultats intéressants concernant la limite du facteur de forme pour les petits q .

$$\epsilon_H(q) \rightarrow \frac{6 \Pi Z}{\Omega_0 q^2} \frac{1}{E_F} \quad \text{si } q \rightarrow 0 \quad (1-8-30)$$

$$V_q \rightarrow - \frac{4 \Pi Z}{\Omega_0 q^2} \quad \text{si } q \rightarrow 0 \quad (1-8-31)$$

$$\frac{V_q + V_{dq}}{\epsilon_H(q)} \rightarrow - \frac{2}{3} E_F \left(1 - \frac{\rho}{Z}\right) \quad \text{si } q \rightarrow 0 \quad (1-8-32)$$

$$f(\vec{k}, \vec{q}) + g(q) \rightarrow f(k) - f(k_F) - \frac{2}{3} E_F \frac{\rho}{Z} \quad \text{si } q \rightarrow 0 \quad (1-8-33)$$

$$\text{D'où } \lim_{q \rightarrow 0} W_q(\vec{k}) = - \frac{2}{3} E_F + f(k) - f(k_F) \quad (1-8-34)$$

Pour le calcul de résistivité, dans le cas de diffusion sur la sphère de Fermi on obtient :

$$\lim_{q \rightarrow 0} W_q(\vec{k}) = - \frac{2}{3} E_F \quad (1-8-35)$$

I-9 - CORRECTIONS DES MASSES EFFECTIVES

Dans le calcul des coefficients $a_q(\bar{k})$ par la théorie des perturbations, l'énergie a été prise à l'ordre zéro, or le terme d'ordre 1 est aussi important que celui d'ordre zéro. De même, le coefficient $a_0(\bar{k})$ est trop grand pour être considéré comme un terme d'ordre 1. Ceci a conduit SHAW [25] à modifier la théorie des perturbations. Sa nouvelle approche introduit des corrections sur l'énergie électronique, le facteur de forme écranté etc...

Dans cette partie nous donnerons juste les résultats, pour les détails des calculs il faut se référer à la publication de SHAW [25]. Pour simplifier le problème, on doit supposer que le modèle de potentiel est une fonction linéaire de l'énergie.

$$W(E_k) = W_0 + E_k \frac{\partial W}{\partial E_k} \quad (1-9-1)$$

Les deux masses effectives $m_E(\bar{k})$ et m_k sont alors définies par les relations suivantes :

$$m_E(\bar{k}) = 1 - \langle \bar{k} | \frac{\partial W}{\partial k} | \bar{k} \rangle \quad (1-9-2)$$

$$\text{et} \quad \frac{k^2}{2 m_k} = \frac{k^2}{2} + \langle \bar{k} | W_0 | \bar{k} \rangle \quad (1-9-3)$$

On peut voir que pour un potentiel indépendant de l'énergie $m_E = 1$ et pour un potentiel local $m_k = 1$. L'expression de l'énergie au 2^{ème} ordre devient :

$$E_k = \frac{k^2}{2m_k m_E(\bar{k})} + \sum_{q \neq 0} \frac{\langle \bar{k} | W(E_k^0) | \bar{k} + \bar{q} \rangle \langle \bar{k} + \bar{q} | W(E_k^0) | \bar{k} \rangle}{m_E(\bar{k}) m_E(\bar{k} + \bar{q}) (E_k^0 - E_{k+q}^0)} \quad (1-9-4)$$

$$\text{avec} \quad E_k^0 = \frac{k^2}{2m_k m_E(\bar{k})} \quad (1-9-5)$$

On rappelle que l'énergie E_k , avant l'introduction du procédé des masses effectives était :

$$E_k = \frac{k^2}{2} + \langle \bar{k} | W | \bar{k} \rangle + 2 \sum_{q \neq 0} \frac{\langle \bar{k} | W | \bar{k} + \bar{q} \rangle \langle \bar{k} + \bar{q} | W | \bar{k} \rangle}{k^2 - |\bar{k} + \bar{q}|^2} \quad (1-9-6)$$

Le facteur de forme écranté corrigé avec les masses effectives s'écrit :

$$W_q^* (\bar{k}) = \frac{V_q + V_{dq}^*}{\mathcal{E}_H^* (q)} + f(\bar{k}, \bar{q}) + g^* (q) \quad (1-9-7)$$

(On utilise le signe étoile pour distinguer les anciens résultats des nouveaux, corrigés par les masses effectives).

Les nouvelles expressions de $\mathcal{E}_H^* (q)$, V_{dq}^* et $g^* (q)$ sont données par :

$$\mathcal{E}_H^* (q) = 1 - \frac{2}{\Pi^2 q^2} \int_{k \leq k_F} d^3 k \frac{1}{m_E(\bar{k}) m_E(\bar{k} + \bar{q}) (E_k^0 - E_{k+q}^0)} \quad (1-9-8)$$

$$V_{dq}^* = \frac{4\Pi\rho^*}{\Omega_0 q^2} \quad (1-9-9)$$

$$\text{où } \rho^* = - \sum_{k \leq k_F} \frac{1}{m_E(\bar{k})} \langle \bar{k} | \frac{\partial W}{\partial E} | \bar{k} \rangle \Omega_M \quad (1-9-10)$$

$$g^* (q) = \frac{1}{\mathcal{E}_H^* (q)} \frac{2}{\Pi^2 q^2} \int_{k \leq k_F} d^3 k \frac{f(\bar{k}, \bar{q})}{m_E(\bar{k}) m_E(\bar{k} + \bar{q}) (E_k^0 - E_{k+q}^0)} \quad (1-9-11)$$

Dans son travail, SHAW a constaté qu'il faut faire des approximations pour poursuivre les calculs. Il a suggéré de remplacer les masses effectives par des constantes, ce qui permet d'écrire :

$$\mathcal{E}_H^* (q) = 1 + \frac{m_k}{m_E} (\mathcal{E}_H(q) - 1) \quad (1-9-12)$$

$$\rho^* = \frac{\rho}{m_E} \quad (1-9-13)$$

$$g^* (q) = \frac{\mathcal{E}_H(q)}{\mathcal{E}_H^* (q)} \frac{m_k}{m_E} g(q) \quad (1-9-14)$$

En utilisant ces résultats, le facteur de forme écranté devient :

$$W_q^* (\bar{k}) = W_q (\bar{k}) + \Delta W \quad (1-9-15)$$

avec ΔW = la correction due aux masses effectives donnée par :

$$\Delta W = \left(\frac{m_k}{m_E} - 1 \right) \frac{v_{sc}}{\epsilon_H^*(q)} + \left(\frac{1}{m_E} - 1 \right) \frac{V_{dq}}{\epsilon_H^*(q)} \quad (1-9-16)$$

où v_{sc} est un potentiel dû à l'écrantage et est défini par :

$$v_{sc} = \frac{1 - \epsilon_H(q)}{\epsilon_H(q)} (V_q + V_{dq}) + g(q) \quad (1-9-17)$$

Notons, que dans le cadre de son modèle optimisé, SHAW a montré qu'il convient de prendre pour les masses effectives, leurs valeurs en k_F .

Pour clore ce paragraphe on peut constater que la limite du facteur de forme pour les petits q change. Elle devient :

$$\lim_{q \rightarrow 0} W_q^* (\bar{k}) = - \frac{2}{3} \frac{E_F}{m_k} \left(1 + \frac{\rho^*}{Z} \right) \quad (1-9-18)$$

(pour une diffusion sur la sphère de Fermi).

I - 10 - CORRECTIONS D'ECHANGE ET CORRELATION

Si on tient compte des effets d'échange et corrélation entre les électrons de conduction, le potentiel autocohérent devient :

$$V_e^{xc}(q) = \frac{\epsilon_H(q)}{\epsilon(q)} (1 - G(q)) V_e(q) \quad (1-10-1)$$

$\epsilon(q)$ est la fonction diélectrique statique donnée par :

$$\epsilon(q) = 1 + (\epsilon_H(q) - 1) (1 - G(q)) \quad (1-10-2)$$

$V_e(q)$ est le potentiel autocohérent dans l'approximation de HARTREE.

$G(q)$ est la fonction qui décrit l'échange et la corrélation.

En répétant les mêmes calculs que dans le paragraphe (I-7) on aboutit au facteur de forme écranté corrigé par l'échange et la corrélation.

$$W_q^{xc}(\bar{k}) = W_q(\bar{k}) + \Delta W^{xc}(q) \quad (1-10-3)$$

$W_q(\bar{k})$ est donné par la relation : (1-8-27).

$$\Delta W^{xc}(q) = -\frac{G(q)}{\mathcal{E}(q)} (W_q(\bar{k}) - W_q^0(\bar{k})) \quad (1-10-4)$$

$W_q^0(\bar{k})$ a été défini par : (1-8-23).

On peut faire à la fois les corrections des masses effectives et d'échange et corrélation. Dans ce cas, le facteur de forme écranté devient :

$$W_q^{xc,*}(\bar{k}) = W_q^*(\bar{k}) + \Delta W^{xc,*}(q) \quad (1-10-5)$$

où $W_q^*(k)$ est le facteur de forme écranté, incluant les effets des masses effectives seules et est donné par : (1-9-13).

$$\Delta W^{xc,*}(q) = \frac{G(q)}{\mathcal{E}^*(q)} (W_q^*(\bar{k}) - W_q^0(\bar{k})) \quad (1-10-6)$$

$$\text{avec } \mathcal{E}^*(q) = 1 + (\mathcal{E}_H^*(q) - 1) (1 - G(q)) \quad (1-10-7)$$

De nombreuses fonction $G(q)$ décrivant l'échange et la corrélation ont été proposées dans la littérature. Citons en quelques unes :

- SINGWI - SJÖLANDER - TOSI - LAND (SSTL) [26] :

$$G(q) = A \left(1 - \exp\left(-\frac{Bq^2}{k_F^2}\right) \right) \quad (1-10-8)$$

A et B sont deux paramètres tabulés qui dépendent de la densité électronique.

- VASHISHTA - SINGWI [27] :

$$G(q) = A \left(1 - \exp\left(-\frac{Bq^2}{k_F^2}\right) \right) \quad (1-10-9)$$

C'est la même expressions que (SSTL) mais les valeurs tabulées de A et B sont différentes.

- TOIGO - WOODRUFF [28] :

G (q) est une fonction tabulée.

- SINGWI - TOSI - LAND - SJÖLANDER (STLS) [29] :

$$\begin{aligned}
 G(q) = & \frac{9}{32} \left(\frac{q}{k_F}\right)^2 \left(\frac{2}{105} \left(24 \left(\frac{k_F}{q}\right)^2 + 44 + \left(\frac{q}{k_F}\right)^2\right) \right. \\
 & - 2 \frac{k_F}{q} \left(\frac{8}{35} \left(\frac{k_F}{q}\right)^2 - \frac{4}{15} + \frac{1}{6} \left(\frac{q}{k_F}\right)^2\right) \text{Log} \left| \frac{q + 2 k_F}{q - 2 k_F} \right| \\
 & \left. + \left(\frac{q}{k_F}\right)^2 \left(\frac{1}{210} \left(\frac{q}{k_F}\right)^2 - \frac{2}{15}\right) \text{Log} \left| \frac{q^2 - 4 k_F^2}{q^2} \right| \right) \quad (1-10-10)
 \end{aligned}$$

- ICHIMARU - UTSUMI [30] :

$$\begin{aligned}
 G(q) = & A \left(\frac{q}{k_F}\right)^4 + B \left(\frac{q}{k_F}\right)^2 + C \\
 & + \left(A \left(\frac{q}{k_F}\right)^4 + \left(B + \frac{8}{3} A\right) \left(\frac{q}{k_F}\right)^2 - C \right) \left(\frac{4 - \left(\frac{q}{k_F}\right)^2}{4 \frac{q}{k_F}}\right) \text{Log} \left| \frac{2 + q/k_F}{2 - q/k_F} \right| \quad (1-10-11)
 \end{aligned}$$

A, B et C sont des paramètres tabulés.

I-11 - EXPRESSIONS DES FACTEURS DE FORME A PARTIR DES MODELES DE SHAW ET DE H-A

Le facteur de forme nu ou non écranté est défini par la transformée de Fourier du modèle de potentiel. Pour tenir compte des interactions entre les électrons de conduction du métal, on passe du facteur de forme nu au facteur de forme écranté. Le facteur de forme joue un rôle important dans la théorie des pseudopotentiels.

I-11-1 Facteur de forme de SHAW

Le modèle de potentiel ionique de SHAW s'écrit :

$$W(r) = -\frac{Z}{r} - \sum_{l=0}^{l_0} \theta(R_l - r) (A_l(E) - Z/r) P_l + v_e(r) \quad (1-11-1)$$

Avec la condition d'optimisation :

$$A_l(E) = \frac{Z}{R_l(E)} \quad (1-11-2)$$

$v_e(r)$ est le potentiel autocohérent qui assure l'écrantage et qui ne dépend pas de l'énergie.

Le facteur de forme écranté $W_q(\bar{k})$ est donné par la relation suivante (dans le cas de l'approximation de HARTREE) :

$$W_q(\bar{k}) = \frac{V_q + V_{dq}}{\epsilon_H(q)} + f(\bar{k}, \bar{q}) + g(q) \quad (1-11-3)$$

$(V_q + V_{dq})$ est la partie locale du facteur de forme : V_q est la transformée de Fourier du potentiel coulombien $-Z/r$ et V_{dq} provient de la lacune de charge.

$$V_q = \frac{-4\pi Z}{\Omega_0 q^2} \quad (1-11-4)$$

$$V_{dq} = \frac{4\pi\rho}{\Omega_0 q^2} \quad (1-11-5)$$

$f(\bar{k}, \bar{q})$ est la partie non locale du facteur de forme.

$$f(\bar{k}, \bar{q}) = -N \sum_{l=0}^{l_0} \langle \bar{k} + \bar{q} | \theta(R_l - r) (A_l - Z/r) P_l | \bar{k} \rangle \quad (1-11-6)$$

$g(q)$ est le terme qui donne l'écrantage de la partie non locale.

$$g(q) = \frac{4}{\pi^2 q^2 \epsilon_H(q)} \int_{k \leq k_F} d^3k \frac{f(\bar{k}, \bar{q})}{k^2 - |\bar{k} + \bar{q}|^2} \quad (1-11-7)$$

Dans cette partie nous allons expliciter la lacune de charge ρ , la partie non locale $f(\bar{k}, \bar{q})$ et le terme $g(q)$.

La lacune de charge ρ a été donnée par (1-8-7) :

$$\rho = - \sum_{k \leq k_F} \langle \bar{k} | \frac{\partial W}{\partial E} | \bar{k} \rangle_{\Omega_M} \quad (1-11-8)$$

Cherchons la dérivée du modèle de potentiel par rapport à l'énergie :

$$\frac{\partial W}{\partial E} = - \sum_{l=0}^{l_0} \delta(R_l - r) \frac{\partial R_l}{\partial E} (A_l - Z/r) P_l - \sum_{l=0}^{l_0} \theta(R_l - r) \frac{\partial A_l}{\partial E} P_l \quad (1-11-9)$$

δ est la distribution Dirac :

$$\delta(R_l - r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r_l \neq r \\ 1 & \text{si } r_l = r \end{cases}$$

Avec la condition d'optimisation (1-11-2) et la propriété de la distribution de Dirac on obtient :

$$\frac{\partial W}{\partial E} = - \sum_{l=0}^{l_0} \theta(R_l - r) \frac{\partial A_l}{\partial E} P_l \quad (1-11-10)$$

La lacune de charge devient :

$$\rho = \sum_{k \leq k_F} \langle \bar{k} | \sum_{l=0}^{l_0} \theta(R_l - r) \frac{\partial A_l}{\partial E} P_l | \bar{k} \rangle \quad (1-11-11)$$

On passe de la somme discrète sur les états \bar{k} à une intégrale :

$$\rho = \frac{2\Omega}{8\pi^3} 4\pi \int_0^{k_F} k^2 dk \langle \bar{k} | \sum_{l=0}^{l_0} \theta(R_l - r) \frac{\partial A_l}{\partial E} P_l | \bar{k} \rangle \quad (1-11-12)$$

On utilise maintenant le développement d'une onde plane en harmoniques sphériques :

$$\langle \bar{r} | \bar{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\bar{k}\bar{r}} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_l (2l+1) i^l j_l(kr) P_l \quad (1-11-13)$$

j_l est la fonction de Bessel sphérique. (Voir l'annexe A pour les expressions de j_l et de P_l).

d'où ρ s'écrit :

$$\rho = \frac{\Omega}{\Pi^2} \int_0^{k_F} k^2 dk \frac{1}{\Omega} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) 4 \Pi \int_0^{R_l} r^2 dr j_l^2(k) \frac{\partial A_l}{\partial E} \quad (1-11-14)$$

Le calcul de la lacune de charge doit se faire numériquement. On peut simplifier la relation (1-11-14) en posant :

$$x = \frac{k}{k_F} \quad \text{et} \quad y = \frac{r}{R_l} \quad \text{On obtient alors :}$$

$$\rho = \frac{4}{\Pi} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) \frac{\partial A_l}{\partial E} \int_0^1 x^2 dx \int_0^1 y^2 dy j_l^2(x y R_l k_F) k_F^3 R_l^3 \quad (1-11-15)$$

L'intégration sur y peut se faire en utilisant le résultat suivant :

$$\int_0^1 y^2 dy j_l^2(k y) = \frac{1}{2} (j_l^2(k) - j_{l-1}(k) j_{l+1}(k)) \quad (1-11-16)$$

Finalement ρ s'écrit :

$$\rho = \frac{2}{\Pi} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) \frac{\partial A_l}{\partial E} \int_0^1 x^2 dx k_F^3 R_l^3 (j_l^2(k_F R_l x) - j_{l-1}(k_F R_l x) j_{l+1}(k_F R_l x)) \quad (1-11-17)$$

Notons que dans les calculs il faut tenir compte de la dépendance de R_l en x . On a :

$$R_l(x) = \frac{Z}{A_l(E_F) + \frac{k_F^2}{2} (x^2 - 1) \frac{\partial A_l}{\partial E}} \quad (1-11-18)$$

La partie non locale du facteur de forme doit aussi se calculer numériquement.

Le développement de l'onde plane en harmoniques sphériques, permet de transformer la relation (1-11-6) en :

$$f(\bar{k}, \bar{q}) = - \frac{4 \Pi}{\Omega_0} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) P_l(\cos \theta) A_l(E) R_l^3(E) \int_0^1 y(y-1) dy j_l(k' R_l y) j_l(k R_l y) \quad (1-11-19)$$

$$\text{où } \tilde{k}' = \tilde{k} + \tilde{q} \quad \text{et} \quad \cos \theta = \frac{\tilde{k} \cdot \tilde{k}'}{k k'}$$

Dans le cas où $q \rightarrow 0$ on a :

$$\lim_{q \rightarrow 0} f(\tilde{k}, \tilde{q}) = f(k) = -\frac{4\Pi}{\Omega_0} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) A_l(E) R_l^3(E) \int_0^1 dy y (y-1) j_l^2(k R_l y) \quad (1-11-20)$$

Il reste à évaluer la fonction $g(q)$ qui définit l'écrantage de la partie non locale. Après avoir explicité l'intégrale de volume dans l'équation (1-11-7), on obtient :

$$g(q) = -\frac{8}{\Pi q^2 \epsilon_H(q)} \int_{-1}^1 dz \int_0^{k_F} \frac{f(\tilde{k}, \tilde{q}) k^2 dk}{q^2 + 2qkz} \quad (1-11-21)$$

avec $z = \cos \alpha$ et α l'angle entre \tilde{k} et \tilde{q} .

I-11-2 Facteur de forme de H-A

On a vu que le modèle de potentiel de H-A ne peut être décomposé en deux parties :

une partie locale :

$$W_l = \begin{cases} -Z/r & \text{si } r > R_M \\ 0 & \text{si } r < R_M \end{cases} \quad (1-11-22)$$

et une partie non locale :

$$W_{NL} = \begin{cases} 0 & \text{si } r > R_M \\ -(A_0 - A_2) P_0 - (A_1 - A_2) P_1 - A_2 & \text{si } r < R_M \end{cases} \quad (1-11-23)$$

En prenant la transformée de Fourier du modèle de potentiel, on aboutit aux expressions du facteur de forme suivantes :

$$V(q) = -\frac{4 \Pi A_2}{\Omega_0 q^3} (\sin q R_M - q R_M \cos q R_M) - \frac{4 \Pi Z}{\Omega_0 q^2} \cos q R_M \quad (1-11-24)$$

$$f(\bar{k}, \bar{q}) = -\frac{2\Pi}{\Omega_0} R_M^3 (A_0 - A_2) ((j_0(kR_M))^2 - \frac{1}{kR_M} \cos(kR_M) j_1(kR_M))$$

$$- \frac{6\Pi}{\Omega_0} R_M^3 (A_1 - A_2) (1 - \frac{q^2}{2k^2}) ((j_1(kR_M))^2 - j_0(kR_M) j_2(kR_M)) \quad (1-11-25)$$

$$f(k, k', q) = -\frac{4\Pi R_M^2 (A_0 - A_2)}{\Omega_0 (k^2 - k'^2)} (k j_1(kR_M) j_0(k'R_M) - k' j_1(k'R_M) j_0(kR_M))$$

$$- \frac{12\Pi (A_1 - A_2) R_M^2 (k^2 + k'^2 - q^2)}{\Omega_0 (k^2 - k'^2) 2kk'} (k j_2(kR_M) j_1(k'R_M) - k' j_2(k'R_M) j_1(kR_M))$$

(1-11-26)

La relation (1-11-24) donne le facteur de forme local qui dépend uniquement de q . Les relations (1-11-25) et (1-11-26) donnent le facteur de forme non local qui dépend à la fois de q , k et k' . La première relation correspond au cas où $k = k'$ et la deuxième au cas où $k \neq k'$.

Pour l'écrantage de la partie non locale, la formule (1-11-21) reste valable, mais on doit remplacer $f(\bar{k}, \bar{q})$ par sa valeur correspondante calculée à partir du potentiel de H-A. Le facteur de forme écranté s'écrit :

$$W_q(\bar{k}) = \frac{V(q)}{\epsilon_H(q)} + f(\bar{k}, \bar{q}) + g(q) \quad (1-11-27)$$

I-11-3 Modèle de potentiel de HEINE-ABARENKOV à écrantage local ("simple-model-potential" : S.M.P)

Le calcul de l'écrantage de la partie non locale du modèle de potentiel est assez complexe et il ne peut être réalisé que numériquement. Cependant, on peut simplifier les facteurs de forme non locaux en effectuant l'écrantage local du potentiel non local. On divise simplement la partie locale et la partie non locale par la fonction diélectrique. ANIMALU [2] a calculé les résistivités de quelques métaux à partir du modèle de H-A avec l'écrantage local. Il a montré que les résultats sont peu différents de ceux obtenus avec l'écrantage non local.

Dans l'écrantage local, on a l'avantage d'écrire le facteur de forme écranté sous une forme analytique. On a :

$$W_q(\bar{k}) = \frac{V(q) + f(\bar{k}, \bar{q})}{\mathcal{E}(q)} \quad (1-11-28)$$

On peut tenir compte de l'échange et la corrélation dans $\mathcal{E}(q)$.

Il est à noter que l'écrantage local ne peut pas être utilisé pour n'importe quel potentiel non local.

Pour clore ce paragraphe, on peut remarquer que le facteur de forme du modèle d'ASHCROFT peut se déduire de celui de H-A en prenant des valeurs nulles pour les A_j et un rayon R_C , qui a sensiblement la valeur du rayon de cœur ionique. On obtient :

$$W(q) = - \frac{4 \Pi Z}{\Omega_0 q^2 \mathcal{E}(q)} \cos(q R_C) \quad (1-11-29)$$

($W(q)$ est le facteur de forme écranté).

I - 12 - LA CARACTERISTIQUE ENERGIE - VECTEUR DE TRANSFERT ("ENERGY WAVE - NUMBER CHARACTERISTIC")

Pour calculer la caractéristique énergie-vecteur de transfert il faut évaluer l'énergie totale d'un métal liquide. Dans le métal, les ions sont considérés comme des particules immobiles noyées dans un nuage d'électrons libres. D'après la procédure de HARRISON [31], l'énergie d'un métal liquide simple, par ion s'écrit :

$$E = E_d + E_{el} - E_{ee} \quad (1-12-1)$$

Le premier terme est l'interaction directe entre deux ions, le second est l'énergie électronique et le troisième terme est l'interaction électron-électron. Dans le terme E_{el} , l'interaction de Coulomb entre deux électrons a été comptée deux fois, c'est pourquoi il convient de retrancher le terme E_{ee} . Ecrivons maintenant les trois termes qui contribuent au calcul de l'énergie totale.

$$E_d = \frac{1}{2N} \sum_{i \neq j} \frac{Z^2}{|\tilde{r}_i - \tilde{r}_j|} \quad (1-12-2)$$

Le facteur 1/2 provient du fait que les ions sont comptés deux fois lorsqu'ils sont pris deux à deux. On a divisé par N , le nombre d'ions pour avoir l'énergie totale par ion.

$$E_{el} = \frac{1}{N} \sum_{k \leq k_F} E(k) \quad (1-12-3)$$

L'énergie $E(k)$ correspond aux valeurs propres de l'équation de Schroedinger monoélectronique. elle est fournie par la théorie des perturbations et il faut la sommer sur tous les états occupés pour avoir l'énergie électronique.

$$E(k) = \frac{k^2}{2} + N \langle \bar{k} | W | \bar{k} \rangle + 2N^2 \sum_{q \neq 0} |S^2(q)| \frac{\langle \bar{k} | W | \bar{k} + \bar{q} \rangle \langle \bar{k} + \bar{q} | W | \bar{k} \rangle}{k^2 - |\bar{k} + \bar{q}|^2} \quad (1-12-4)$$

$S(q)$ est le facteur de structure et W est le modèle de potentiel ionique.

$$E_{ee} = \frac{1}{2N} \int d^3 r n(r) V_e(r) = \frac{\Omega}{2N} \sum_{q \neq 0} n^*(q) V_e(q) \quad (1-12-5)$$

$n(r)$ est la densité électronique de charge totale et $V_e(r)$ est le potentiel autocohérent des électrons de conduction.

Pour évaluer la caractéristique énergie-vecteur de transfert il faut calculer l'énergie de structure de bande qui est donnée par l'expression suivante :

$$E_{bs} = \sum_{q \neq 0} |S(q)|^2 F(q) \quad (1-12-6)$$

$F(q)$ est la caractéristique énergie-vecteur de transfert. L'énergie de structure de bande est composée de deux termes. Le terme du second ordre de E_{el} et le terme de E_{ee} qui est relatif à la densité de charge d'écran $n_{sc}(q)$. D'après la publication de SHAW [32] on a :

$$E_{bs} = 2N \sum_{k \leq k_F} \sum_{q \neq 0} \frac{|S(q)|^2 \langle \bar{k} | W | \bar{k} + \bar{q} \rangle \langle \bar{k} + \bar{q} | W | \bar{k} \rangle}{k^2 - |\bar{k} + \bar{q}|^2} - \frac{\Omega}{2N} \sum_{q \neq 0} n_{sc}^*(q) V_{sc}(q) \quad (1-12-7)$$

En s'aidant de la relation de Poisson (1-8-14) et en factorisant le potentiel $V_{sc}(q)$ en $|S(q)| v_{sc}(q)$ on obtient :

$$E_{bs} = \sum_{q \neq 0} |S(q)|^2 \left(2N \sum_{k \leq k_F} \frac{\langle \bar{k} | W | \bar{k} + \bar{q} \rangle \langle \bar{k} + \bar{q} | W | \bar{k} \rangle}{k^2 - |\bar{k} + \bar{q}|^2} - \frac{\Omega}{2N} \frac{q^2}{4\pi} v_{sc}^2(q) \right) \quad (1-12-8)$$

La caractéristique énergie-vecteur de transfert peut se déduire facilement de (1-12-8). Elle s'écrit :

$$F(q) = 2N \sum_{k \leq k_F} \frac{\langle \bar{k} | W | \bar{k} + \bar{q} \rangle \langle \bar{k} + \bar{q} | W | \bar{k} \rangle}{k^2 - |\bar{k} + \bar{q}|^2} - \frac{\Omega}{2N} \frac{q^2}{4\pi} v_{sc}^2(q) \quad (1-12-9)$$

En passant de la somme discrète à une intégrale et en remplaçant les éléments de matrice par les facteurs de forme on obtient :

$$F(q) = \frac{2\Omega_0}{(2\pi)^3} \int_{k \leq k_F} d^3k \frac{2 |W_q(\bar{k})|^2}{k^2 - |\bar{k} + \bar{q}|^2} - \frac{\Omega_0}{8\pi} q^2 v_{sc}^2(q) \quad (1-12-10)$$

La fonction $F(q)$ dépend du volume et ne dépend pas de la structure. Aux grandes valeurs de q , cette fonction tend vers zéro. Ceci facilite le calcul de l'énergie de structure de bande, qui nécessite l'intégration de $F(q)$ sur l'espace des q . Pour le modèle de SHAW et dans l'approximation de HARTREE, la caractéristique énergie-vecteur de transfert s'écrit :

$$F(q) = \frac{\Omega_0 q^2}{8\pi} \left(\frac{(1 - \epsilon_H(q))}{\epsilon_H(q)} (V_q + V_{dq})^2 + 2 g(q) (V_q + V_{dq}) + \epsilon_H(q) g^2(q) + h(q) \right) \quad (1-12-11)$$

Pour obtenir la relation précédente, il suffit de remplacer $W_q(\bar{k})$ et $v_{sc}(q)$ par les relations (1-8-27) et (1-9-17) dans (1-12-10). Les expressions de $\epsilon_H(q)$, V_q , V_{dq} et $g(q)$ ont été définies par : (1-8-17), (1-8-24), (1-8-28) et (1-8-29). La nouvelle fonction $h(q)$ est définie par :

$$h(q) = \frac{4}{\pi^2 q^2} \int_{k \leq k_F} d^3k \frac{(f(\bar{k}, \bar{q}))^2}{k^2 - |\bar{k} + \bar{q}|^2} \quad (1-12-12)$$

$f(\bar{k}, \bar{q})$ a été donnée par (1-8-25).

SHAW [32] a montré que $F(q)$ tend vers une limite finie aux grandes longueurs d'ondes ($q \rightarrow 0$). Ceci l'a amené à renormaliser la fonction $F(q)$ et à poser :

$$F_N(q) = - \frac{q^2 \Omega_0}{2\pi (Z - \rho)^2} F(q) \quad (1-12-13)$$

où $(Z - \rho)$ représente la valence effective modifiée par la lacune de charge ρ (rel (1-8-7)).

La fonction énergie-vecteur de transfert $F_N(q)$ ainsi renormalisée, tend vers l'unité quand q tend vers zéro.

Comme pour le facteur de forme, on peut introduire les corrections des masses effectives et d'échange et corrélation sur la fonction énergie-vecteur de transfert. (On adoptera des notations similaires à celles utilisées pour le facteur de forme. $(^*)$ pour la masses effectives, et (xc) pour l'échange et la corrélation).

I-12-1 Corrections des masses effectives

En tenant compte des masses effectives seules, la fonction énergie-vecteur de transfert devient (SHAW [25]) :

$$\overset{*}{F}(q) = \frac{m_k}{m_E} F(q) + \Delta F(q) \quad (1-12-14)$$

$F(q)$ a été donnée par (1-12-11).

m_E et m_k sont des masses effectives explicitées par (1-9-2) et (1-9-3).

$\Delta F(q)$ est la correction dûe aux masses effectives et s'écrit :

$$\begin{aligned} \Delta F(q) = & \frac{\Omega_0 q^2}{8\pi} \left(\frac{m_k}{m_E} \frac{\epsilon_H(q)}{\epsilon_H^*(q)} \left(\left(\frac{m_k}{m_E} - 1 \right) v_{sc}^2 + 2v_{sc} v_{dq} \left(\frac{1}{m_E} - 1 \right) \right) \right. \\ & \left. + \frac{(1 - \epsilon_H^*(q))}{\epsilon_H^*(q)} v_{dq}^2 \left(\frac{1}{m_E} - 1 \right)^2 \right) \end{aligned} \quad (1-12-15)$$

Rappelons que $\epsilon_H^*(q)$ est la fonction diélectrique de HARTREE corrigée par les masses effectives et a été donnée par (1-9-10). Pour la fonction énergie-vecteur de transfert normalisée on obtient:

$$\overset{*}{F}_N(q) = - \frac{\Omega_0 q^2}{2\pi(Z - \rho^*)^2} \overset{*}{F}(q) \quad (1-12-16)$$

où ρ^* a été définie par (1-9-11).

I-12-2 Corrections d'échange et corrélation

Avec les effets d'échange et corrélation, la fonction energie-vecteur de transfert normalisée, s'écrit (SHAW [33]) :

$$F_N^{xc}(q) = F_N(q) + \Delta F_N^{xc}(q) \quad (1-12-17)$$

$$\Delta F_N^{xc}(q) = \left(\frac{\Omega_0 q^2}{4\Pi(Z-\rho)} \right)^2 \frac{\epsilon_H(q)}{\epsilon(q)} G(q) (W_q(\bar{k}) - W_q^0(\bar{k}))^2 \quad (1-12-18)$$

Les facteurs de forme $W_q(\bar{k})$ et $W_q^0(\bar{k})$ avaient été donnés par (1-8-27) et (1-8-23). $\epsilon(q)$ est la fonction diélectrique qui contient les effets d'échange et corrélation à travers la fonction $G(q)$ (voir (1-10-2)).

I-12-3 Corrections des masses effectives et d'échange et corrélation

En tenant compte à la fois des effets des masses effectives et d'échange et corrélation on obtient :

$$F_N^{xc,*}(q) = F_N(q) + \Delta F_N^{xc,*}(q) \quad (1-12-19)$$

$$\Delta F_N^{xc,*}(q) = \left(\frac{\Omega_0 q^2}{4\Pi(Z-\rho)} \right)^2 \frac{\epsilon_H^*(q)}{\epsilon(q)} G(q) (W_q^*(\bar{k}) - W_q^0(\bar{k}))^2 \quad (1-12-20)$$

$F_N^*(q)$ a été donnée par (1-12-16). $W_q^*(\bar{k})$ est le facteur de forme de HARTREE corrigé par les masses effectives (voir (1-9-13)).

CHAPITRE II

MODELE DE PSEUDOPOTENTIEL DE BACHELET, HAMANN ET SCHLÜTER

II - 1 - INTRODUCTION

Les pseudopotentiels ont été introduits en vue de simplifier les calculs de structure électronique en évitant d'inclure les électrons de cœur fortement liés et le potentiel attractif très fort qui est responsable de leurs liaisons.

Le modèle introduit par BACHELET, HAMANN et SCHLÜTER [1] (B.H.S) a apporté d'énormes avantages à la théorie des pseudopotentiels. Parmi les propriétés importantes de ces pseudopotentiels : la non dépendance en énergie, la transférabilité et le pouvoir d'être ajusté avec un ensemble de fonctions analytiques. Sur la base de ces considérations, un ensemble de pseudopotentiels a été développé pour les atomes allant de l'hydrogène au plutonium. Pour traiter les atomes lourds, il est nécessaire de considérer les effets relativistes. Ces effets interviennent dans le terme de spin-orbite, qui est donné par une forme analogue au terme non local pour le pseudopotentiel de B.H.S [1].

II - 2 - PROPRIETES DES PSEUDOPOTENTIELS DE BACHELET HAMANN ET SCHLÜTER (B.H.S)

Dans cette partie nous allons donner et discuter les propriétés des modèles de pseudopotentiels construits par B.H.S. Ces propriétés sont les suivantes (HAMANN, SCHLÜTER et CHIANG [34] et HAFNER [35]) :

(i) Les valeurs propres de l'hamiltonien exact et du pseudo-hamiltonien coïncident pour les énergies supérieures aux énergies des orbitales du cœur et pour une configuration électronique choisie (d'habitude celle de

l'atome neutre).

(ii) Les orbitales et les pseudo-orbitales des électrons de conduction sont identiques au delà d'un certain rayon R_C .

(iii) "La pseudocharge" contenue à l'intérieur de la sphère de rayon R_C est égale à la charge exacte (c'est la condition de conservation de la norme).

(iv) Les dérivées logarithmiques de la fonction d'onde et de la pseudo-fonction d'onde coïncident pour $r = R_C$.

$$\frac{d \text{Log } \psi}{d \text{Log } r} \Big|_{r=R_C} = \frac{d \text{Log } \chi}{d \text{Log } r} \Big|_{r=R_C} \quad (2-2-1)$$

(V) La même condition s'applique à la dérivée de cette quantité par rapport à l'énergie :

$$\frac{d}{dE} \left(\frac{d \text{Log } \psi}{d \text{Log } r} \right) \Big|_{r=R_C} = \frac{d}{dE} \left(\frac{d \text{Log } \chi}{d \text{Log } r} \right) \Big|_{r=R_C} \quad (2-2-2)$$

Un modèle de pseudopotentiel "ordinaire" satisfait les conditions (i), (ii), et (iv). Cependant les propriétés (iii) et V sont "originales" et propres aux pseudopotentiels de B.H.S. La condition (iii) garantit la conservation de la norme de l'orbitale et sert à simplifier les calculs tout en rendant les contributions électroniques plus réalistes. Avec cette propriété, le problème de la lacune de charge est éliminé. La condition (V) garantit que les propriétés de diffusion d'électrons par le pseudopotentiel perturbateur soient les mêmes, non seulement pour une énergie donnée, mais pour toute une gamme d'énergie. Elle permet aussi de rendre le potentiel plus aisément transférable.

On peut s'attendre à ce que le potentiel soit encore précis même si un changement d'énergie de référence intervient.

Les pseudopotentiels de ce type ont certainement contribué au progrès du calcul de la structure ionique surtout dans des cas plus complexes comme les surfaces et interfaces.

Les pseudopotentiels de B.H.S ont été déterminés par référence à une configuration électronique qui est celle d'un atome libre. Donc ces pseudopotentiels ne changent dans un alliage qu'à travers l'énergie de référence. Dans ce contexte la condition (V) est importante parce qu'elle améliore la transférabilité des pseudopotentiels, ce qui étend leur utilisation à la théorie des alliages. Ces pseudopotentiels ne sont pas uniques. Comme exemples de leurs nombreuses applications (B.H.S [1]) :

- un calcul autocohérent de l'énergie de bande a été fait pour le Si, le Nb et le CsAu. Les erreurs trouvées sont de l'ordre de 0,05 eV pour le Si et de 0,1 à 0,2 eV pour les deux autres.

- Ils ont été utilisés pour le calcul de l'énergie totale, du paramètre du réseau, de l'énergie de cohésion, de l'inverse de la compressibilité et des fréquences de phonons. Les résultats ont été obtenus avec des exactitudes de quelques pour cents pour le Si, de diamant, le Ge, le GaP, le GaAs, le AlAs, le Si₂ (sous forme moléculaire) ainsi que pour d'autres corps. Pour les métaux de transitions les erreurs sont de l'ordre de 0,05 eV.

II - 3 - CALCUL DU MODELE DE PSEUDOPOTENTIEL DE B.H.S

Avant de donner les expressions qui définissent le pseudopotentiel de B.H.S, nous allons décrire brièvement le procédé de construction de cette famille de pseudopotentiels. (pour plus de détails voir B.H.S [1]).

On commence par choisir une expression analytique appropriée pour les pseudo-orbitales, qui garantit qu'elles soient lisses et ne possèdent pas de nœud à l'intérieur du cœur ionique (par exemple un polynôme ou une fonction exponentielle). Les paramètres de cette fonction sont fixés de façon à satisfaire les propriétés (i) à (iv) du paragraphe précédent. Ensuite le pseudopotentiel est construit par une inversion de l'équation de Schroedinger. Enfin des expressions analytiques à plusieurs paramètres sont ajustées sur les valeurs du pseudopotentiel. De cette manière on obtient des pseudopotentiels décrits par des fonctions analytiques.

Le pseudopotentiel ionique total de B.H.S est donné par la relation suivante (équation 2.19 de B.H.S [1]):

$$\hat{V}_{ps}^{ion}(r) = \sum_{l=0}^{\infty} |l\rangle \left[\hat{V}_l^{ion}(r) + \hat{V}_l^{so}(r) \vec{L} \cdot \vec{S} \right] \langle l| \quad (2-3-1)$$

l est le moment angulaire.

$$\hat{V}_l^{ion}(r) = \hat{V}_{core}(r) + \Delta \hat{V}_l^{ion}(r) \quad (2-3-2)$$

\hat{V}_l^{ion} est le potentiel ionique.

\hat{V}_l^{so} est le potentiel de spin-orbite.

\hat{V}_{core} décrit la contribution locale, c'est un potentiel de cœur.

$\Delta \hat{V}_l^{\text{ion}}$ est une correction non locale sur le potentiel.

Remarque :

Dans le présent travail on ne tiendra pas compte des effets de spin-orbite. Nous avons jugé que les corrections qu'introduisent les effets de spin-orbite sur les propriétés électroniques sont négligeables. En effet, d'après SO, MOORE et WANG [36], les corrections de spin-orbite sur la résistivité ne dépassent pas les 7 % pour le plomb, qui est un corps assez lourd.

Dans ce chapitre, les grandeurs et les paramètres dont les unités ne sont pas précisées, sont en unités atomiques.

On définit \hat{V}_{core} et $\Delta \hat{V}_l^{\text{ion}}$ par :

$$\hat{V}_{\text{core}}(r) = -\frac{Z_v}{r} \left[\sum_{i=1}^2 C_i^{\text{core}} \operatorname{erf} \left((\alpha_i^{\text{core}})^{\frac{1}{2}} r \right) \right] \quad (2-3-3)$$

$$\Delta \hat{V}_l^{\text{ion}}(r) = \sum_{i=1}^3 \left[A_i + r^2 A_{i+3} \exp(-\alpha_i r^2) \right] \quad (2-3-4)$$

Z_v étant la valence.

C_i^{core} , α_i^{core} et α_i sont des coefficients tabulés pour les éléments du tableau périodique allant de l'hydrogène au plutonium (B.H.S [1], table IV).

$$\text{on a : } C_1^{\text{core}} + C_2^{\text{core}} = 1 \quad (2-3-5)$$

$$\text{et } \alpha_{i+3} = \alpha_i \quad \text{pour } i = 1, 2, 3 \quad (2-3-6)$$

Les paramètres A_i sont calculés à partir des constantes C_i données (B.H.S [1], table IV) (α_i et C_i dépendent de l).

$$\text{on a : } C_i = - \sum_{p=1}^6 A_p Q_{ip} \quad (2-3-7)$$

Où les quantités Q_{ip} sont définies par la relation suivante :

$$Q_{ip} = \begin{cases} 0 & \text{si } i > p \\ (S_{ip} - \sum_{k=1}^{i-1} Q_{kp})^{1/2} & \text{si } i = p \\ (S_{ip} - \sum_{k=1}^{i-1} Q_{ki} Q_{kp}) / Q_{ii} & \text{si } i < p \end{cases} \quad (2-3-8)$$

Les S_{ip} sont des intégrales de recouvrement de type :

$$S_{ip} = \int_0^{\infty} r^2 \Phi_i(r) \Phi_p(r) dr \quad (2-3-9)$$

$$\text{avec : } \Phi_i = \begin{cases} \exp(-\alpha_i r^2) & \text{si } i = 1, 2, 3 \\ r^2 \exp(-\alpha_i r^2) & \text{si } i = 4, 5, 6 \end{cases} \quad (2-3-10)$$

$$\text{on a : } A_i = - \sum_{p=1}^6 C_p Q_{ip}^{-1} \quad (2-3-11)$$

Pour calculer les coefficients A_i , il faut déterminer les éléments de la matrice Q (6,6) puis l'inverser.

Dans nos calculs nous avons utilisé le développement suivant pour la fonction erreur (erf) (ABRAMOWITZ et STEGUN [37]) :

$$\text{erf } x = 1 - (a_1 t + a_2 t^2 + a_3 t^3 + a_4 t^4 + a_5 t^5) \exp(-x^2) + E(x) \quad (2-3-12)$$

$$\text{avec : } |E(x)| \leq 1,5 \cdot 10^{-7} \quad \text{et} \quad t = \frac{1}{1 + px}$$

$$\begin{aligned} p &= 0,3275911 \\ a_1 &= 0,254829592 \\ a_2 &= -0,284496736 \\ a_3 &= 1,421413741 \\ a_4 &= -1,453152027 \\ a_5 &= 1,061405429 \end{aligned}$$

Pour tester nos programmes, nous avons calculé le pseudopotentiel pour le silicium. Nos valeurs sont en bon accord avec ceux données dans la publication de B.H.S [1] (Table V).

Remarque :

Pour alléger les notations on pose :

$$\left[\begin{array}{l} \hat{V}_{ps}^{ion}(r) = W(r) \\ \hat{V}_{core}(r) = V_c(r) \\ \Delta \hat{V}_l^{ion}(r) = \Delta V_l(r) \end{array} \right. \quad (2-3-13)$$

Le pseudopotentiel pour l'ion libre s'écrit :

$$\begin{aligned} W(r) &= \sum_{l=0}^{\infty} P_l (V_c(r) + \Delta V_l(r)) \\ &= V_c(r) + \sum_{l=0}^{\infty} \Delta V_l(r) P_l \end{aligned} \quad (2-3-14)$$

Nous avons utilisé la relation suivante :

$$\sum_{l=0}^{\infty} |l\rangle \langle l| = \sum_{l=0}^{\infty} P_l = 1 \quad (2-3-15)$$

Dans l'expression finale (2-3-14) du pseudopotentiel nous pouvons remarquer l'indépendance en l de V_{core} . Ceci nous permet de séparer le pseudopotentiel en une partie locale $V_{core}(r)$ et une partie non locale $\Delta V_l(r)$.

Sur les figures (2-1) et (2-2) nous avons tracé les courbes des pseudopotentiels de B.H.S pour le germanium et le gallium. On peut constater que le pseudopotentiel est continu et tend vers $-Z/r$ quand on s'éloigne de la région du cœur ionique.

Pour le germanium et le gallium, nous donnons ici les valeurs des paramètres des modèles de potentiels de H-A et de SHAW.

Modèle de H-A

$$\text{Ge: } A_0 = 2,1 \quad A_1 = 2,34 \quad A_2 = 2,09 \quad R_M = 2$$

$$\text{Ga: } A_0 = 1,44 \quad A_1 = 1,58 \quad A_2 = 1,41 \quad R_M = 2,4$$

Ces valeurs ont été données à l'état solide par ANIMALU [6].

Le modèle de potentiel prend la valeur A_l ($l = 0,1,2$) dans la région où $r < R_M$ et il est égale à $-Z/r$ si $r > R_M$. Cependant, il subit une discontinuité en R_M .

Modèle de SHAW

Ge (980°C)	$A_0 = 1,169$	$A_1 = 2,486$	$A_2 = 2,069$
—————	$R_0 = 1,843$	$R_1 = 1,608$	$R_2 = 1,933$
Ga (50°C)	$A_0 = 1,618$	$A_1 = 1,842$	$A_2 = 1,359$
	$R_0 = 1,853$	$R_1 = 1,628$	$R_2 = 2,206$

Ces paramètres sont relatifs à l'état liquide. Pour les déterminer, nous avons pris les valeurs tabulées dans la publication de ESE et REISSLAND [38], nous les avons recalculés pour l'énergie du vide. Ensuite, nous avons déduit les paramètres du modèle pour l'état liquide à la température appropriée.

SHAW a donc repris le modèle de potentiel de H-A et a introduit des modifications, dont une condition d'optimisation ($A_l = Z/R_l$) qui rend son modèle continu.

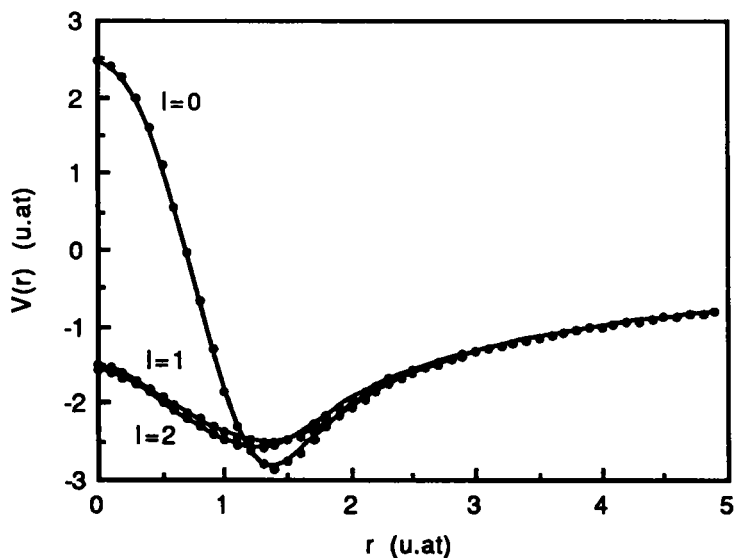


Fig. 2-1 Pseudopotential de B.H.S pour le germanium.

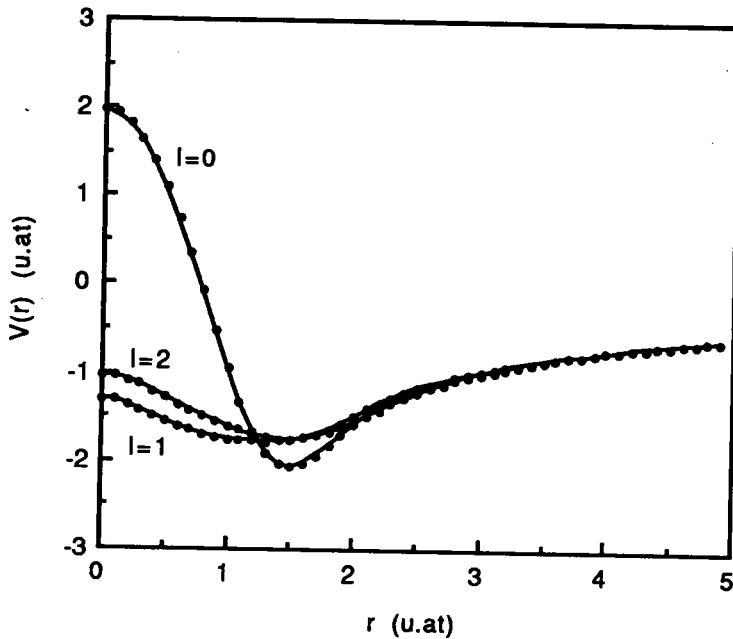


Fig. 2-2 Pseudopotential de B.H.S pour le gallium.

II - 4 - CALCUL DU FACTEUR DE FORME ANALYTIQUE OBTENU A PARTIR DU MODELE DE PSEUDOPOTENTIEL DE B.H.S

Le facteur de forme joue un rôle important dans la théorie des pseudopotentiels. Il intervient dans le calcul des propriétés électroniques et structurales des métaux. Le facteur de forme nu ou non écranté est la transformée de Fourier du pseudopotentiel ionique, il s'écrit :

$$W_q^0(\vec{k}) = N \langle \vec{k} + \vec{q} | W(r) | \vec{k} \rangle \quad (2-4-1)$$

On rappelle que le pseudopotentiel de B.H.S est donné par :

$$W(r) = \sum_{l=0}^{\infty} P_l (V_c(r) + \Delta V_l(r)) \quad (2-4-2)$$

Pour ce modèle deux approches ont été suggérées (B.H.S [1]). La première, est celle adoptée par HEINE et ABARENKOV (H-A), dans laquelle ils proposent de prendre le potentiel correspondant à l_0 , (la plus grande valeur de l) pour toutes les valeurs de l supérieures à l_0 . La deuxième approche est celle de SHAW où il recommande de prendre le "vrai potentiel" ($V_c(r)$) pour les valeurs de l supérieures à l_0 .

Nous avons développé ces deux approches.

Remarque :

On utilisera l'indice 1 pour l'approche de H-A et l'indice 2 pour celle de SHAW.

Approche de H-A :

On reprend la relation (2-4-2) et on décompose la somme sur l comme suit :

$$W_1(r) = \sum_{l=0}^{l_0} (V_C(r) + \Delta V_l(r)) P_l + \sum_{l=l_0+1}^{\infty} (V_C(r) + \Delta V_{l_0}(r)) P_l \quad (2-4-3)$$

(V_C est le même pour toutes les valeurs de l).

En regroupant les termes différemment et en utilisant la relation (2-3-15), $W_1(r)$ s'écrit :

$$W_1(r) = (V_C(r) + \Delta V_{l_0}(r)) + \sum_{l=0}^{l_0-1} (\Delta V_l(r) - \Delta V_{l_0}(r)) P_l \quad (2-4-4)$$

On peut voir que le premier terme du second membre correspond à la partie locale du pseudopotentiel, et le deuxième terme correspond à la partie non locale. D'après la publication de B.H.S [1] (Table IV), $l_0 = 2$ pour les éléments du tableau périodique, allant de l'hydrogène au xénon et $l_0 = 3$ pour les éléments allant de césium au plutonium.

Nous arrivons maintenant au calcul du facteur de forme.

$$W_{1q}^0(\vec{k}) = N \langle \vec{k} + \vec{q} | W_1(r) | \vec{k} \rangle = V_1(q) + f_1(\vec{k}, \vec{q}) \quad (2-4-5)$$

$V_1(q)$ est le facteur de forme local.

$$V_1(q) = N \langle \vec{k} + \vec{q} | V_C(r) + \Delta V_{l_0}(r) | \vec{k} \rangle = \frac{-4\pi Z}{\Omega_0 q^2} (C_1^C \exp\left(\frac{-q^2}{4\alpha_1^c}\right) + C_2^C \exp\left(\frac{-q^2}{4\alpha_2^c}\right))$$

$$+ \frac{\Pi^{3/2}}{\Omega_0} \sum_{i=1}^3 \frac{\exp(-q/4\alpha_i(l_0))}{\alpha_i^{3/2}(l_0)} \left[A_i(l_0) + \left(\frac{3}{2\alpha_i(l_0)} - \frac{q^2}{4\alpha_i^2(l_0)} \right) A_{i+3}(l_0) \right] \quad (2-4-6)$$

où : $C_i^c = C_i^{\text{core}}$ et $\alpha_i^c = \alpha_i^{\text{core}}$

(Pour les détails de nos calculs voir l'annexe A).

Pour la partie non locale $f_1(\bar{k}, \bar{q})$ on obtient :

$$f_1(\bar{k}, \bar{q}) = N \langle \bar{k} + \bar{q} | \sum_{l=0}^{l_0-1} (\Delta V_l(r) - \Delta V_{l_0}(r)) P_l | \bar{k} \rangle \quad (2-4-7)$$

En utilisant le développement de l'onde plane en harmoniques sphériques (1-11-13) la relation (2-4-7) devient :

$$f_1(\bar{k}, \bar{q}) = \frac{4\Pi}{\Omega_0} \sum_{l=0}^{l_0-1} (2l+1) P_l(\cos\theta) \int_0^\infty r^2 dr j_l(kr) j_l(k'r) (\Delta V_l(r) - \Delta V_{l_0}(r)) \quad (2-4-8)$$

Les P_l sont les polynômes de Legendre et les j_l sont les fonctions de Bessel. θ est l'angle entre les vecteurs \bar{k} et \bar{k}' , de l'électron avant et après diffusion.

Nous avons réussi à trouver des expressions analytiques pour les intégrales des parties locale et non locale du facteur de forme, mais nous ne pouvons pas les donner toutes ici vu les longueurs des formules. Nous développerons les calculs dans l'annexe A.

Les expressions analytiques de nos intégrales ont toutes été testées pour plusieurs valeurs des paramètres et les résultats obtenus sont identiques à ceux obtenus par intégration numérique.

Approche de SHAW

SHAW a suggéré de prendre le vrai potentiel pour les valeurs de l supérieures à l_0 . Pour le modèle de B.H.S le vrai potentiel est $V_C(r)$. Dans ce cas le pseudopotentiel devient :

$$W_2(r) = \sum_{l=0}^{l_0} (V_C(r) + \Delta V_l(r)) P_l + \sum_{l=l_0+1}^{\infty} P_l V_C(r) \quad (2-4-9)$$

On a remplacé le potentiel dans la deuxième somme de (2-4-3) par le vrai potentiel $V_C(r)$ (cela revient à poser $\Delta V_l(r) = 0$ pour $l > l_0$).

En suivant les mêmes calculs que dans la première approche on obtient :

$$W_2(r) = V_C(r) + \sum_{l=0}^{l_0} P_l \Delta V_l(r) \quad (2-4-10)$$

$$W_{2q}^0(\bar{k}) = V_2(q) + f_2(\bar{k}, \bar{q}) \quad (2-4-11)$$

$$\text{où } V_2(q) = -\frac{4\pi Z_V}{\Omega_0 q^2} \left[C_1^C \exp\left(\frac{-q^2}{4\alpha_1^c}\right) + C_2^C \exp\left(\frac{-q^2}{4\alpha_1^c}\right) \right] \quad (2-4-12)$$

$$\text{et } f_2(\bar{k}, \bar{q}) = \frac{4\pi}{\Omega_0} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) P_l(\cos\theta) \int_0^\infty r^2 dr j_l(kr) j_l(k'r) \Delta V_l(r) \quad (2-4-13)$$

II - 5 - RESULTATS ET DISCUSSION DES FACTEURS DE FORME DE B.H.S

Dans ce paragraphe, nous tenons compte des effets d'échange et corrélation en utilisant la fonction $G(q)$ de VASHISHTA-SINGWI [27] (1-10-9). Pour le calcul du facteur de forme, nous prenons :

$$k = k' = k_F \quad \text{si } q \leq 2k_F \quad (2-5-1)$$

$$\text{et } \begin{cases} k = k_F \\ k' = q - k_F \end{cases} \quad \text{si } q > 2k_F \quad (2-5-2)$$

Dans le cas où $q > 2k_F$ les vecteurs \bar{k} et \bar{k}' ($\bar{k}' = \bar{k} + \bar{q}$) sont antiparallèles (backscattering ou diffusion en arrière, $\theta = (\hat{\bar{k}}, \hat{\bar{k}'}) = \Pi$).

k_F est donné par la relation suivante:

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 Z}{\Omega_0} \right)^{1/3} \quad (2-5-3)$$

$$\text{avec } \Omega_0 = M_{at}/Nd \quad (2-5-4)$$

M_{at} est la masse atomique, N le nombre d'Avogadro et d la densité expérimentale donnée par CRAWLEY [39] en fonction de la température.

II-5-1 Ecrantage du modèle de pseudopotentiel de B.H.S

Le modèle de pseudopotentiel de B.H.S est non local, et pour être rigoureux il faut l'écranter d'une manière non locale. Dans ce travail, nous allons faire les deux types d'écrantage. L'écrantage local comme l'a fait ANIMALU [2], et l'écrantage non local en suivant la méthode de SHAW [8].

L'écrantage local du modèle de pseudopotentiel consiste à diviser le facteur de forme nu par la fonction diélectrique. L'avantage est le fait d'avoir des formules analytiques. par contre dans l'écrantage non local, la fonction $g(q)$ donnée par (1-8-28) doit se calculer numériquement.

$$W_{lq}(\bar{k}) = \frac{V(q) + f(\bar{k}, \bar{q})}{\epsilon(q)} \quad (2-5-5)$$

$$W_{nlq}(\bar{k}) = \frac{V(q)}{\epsilon(q)} + f(\bar{k}, \bar{q}) + g(q) \quad (2-5-6)$$

Dans les tableaux (2-1) et (2-2) nous reportons les valeurs des facteurs de forme que nous avons calculées à partir du modèle de B.H.S pour le sodium, le magnésium, l'aluminium et le silicium.

Tab. 2-1 Facteurs de forme (en Ryd) de B.H.S du sodium liquide à 100°C et du magnésium liquide à 700°C

q/k _F	W _{2l} (Na)	W _{1l} (Na)	W _{1nl} (Na)	W _{2l} (Mg)	W _{1l} (Mg)	W _{1nl} (Mg)
0	-0,15231	-0,15231	-0,15231	-0,32638	-0,32638	-0,32638
0,1	-0,15179	-0,15179	-0,15218	-0,32420	-0,32420	-0,32505
0,2	-0,15020	-0,15020	-0,15052	-0,31769	-0,31770	-0,31840
0,3	-0,14751	-0,14751	-0,14771	-0,30694	-0,30696	-0,30743
0,4	-0,14366	-0,14367	-0,14371	-0,29212	-0,29214	-0,29231
0,5	-0,13858	-0,13859	-0,13844	-0,27349	-0,27350	-0,27333
0,6	-0,13221	-0,13221	-0,13186	-0,25140	-0,25140	-0,25088
0,7	-0,12448	-0,12448	-0,12393	-0,22634	-0,22633	-0,22547
0,8	-0,11539	-0,11538	-0,11464	-0,19893	-0,19889	-0,19774
0,9	-0,10496	-0,10494	-0,10404	-0,16987	-0,16981	-0,16841
1	-0,09330	-0,09327	-0,09224	-0,13994	-0,13987	-0,13831
1,1	-0,08058	-0,08055	-0,07943	-0,10995	-0,10989	-0,10824
1,2	-0,06704	-0,06701	-0,06586	-0,08068	-0,08063	-0,07898
1,3	-0,05300	-0,05298	-0,05184	-0,05284	-0,05282	-0,05123
1,4	-0,03879	-0,03879	-0,03771	-0,02700	-0,02703	-0,02555

1,5	-0,02479	-0,02482	-0,02382	-0,00365	-0,00371	-0,00231
1,6	-0,01135	-0,01140	-0,01051	+0,01692	+0,01683	+0,03907
1,7	+0,00122	+0,00116	+0,00192	+0,03453	+0,03444	+0,03539
1,8	+0,01268	+0,01264	+0,01328	+0,04911	+0,04907	+0,04984
1,9	+0,02285	+0,02287	+0,02339	+0,06073	+0,06077	+0,06137
2	+0,03169	+0,03184	+0,03226	+0,06963	+0,06981	+0,07026
2,1	+0,03940	+0,03959	+0,03995	+0,07714	+0,07732	+0,07774
2,2	+0,04564	+0,04587	+0,04617	+0,08226	+0,08241	+0,08278
2,3	+0,05063	+0,05091	+0,05117	+0,08550	+0,08560	+0,08594
2,4	+0,05456	+0,05487	+0,05511	+0,08719	+0,08722	+0,08753
2,5	+0,05756	+0,05791	+0,05813	+0,08759	+0,08754	+0,08784
2,6	+0,05978	+0,06015	+0,06036	+0,08691	+0,08679	+0,08706
2,7	+0,06131	+0,06171	+0,06190	+0,08535	+0,08516	+0,08542
2,8	+0,06225	+0,06268	+0,06286	+0,08305	+0,08282	+0,08307
2,9	+0,06271	+0,06314	+0,06332	+0,08018	+0,07994	+0,08017
3	+0,06270	+0,06316	+0,06333	+0,07684	+0,07664	+0,07686
3,1	+0,06234	+0,06280	+0,06297	+0,07316	+0,07305	+0,07325
3,2	+0,06164	+0,06212	+0,06228	+0,06926	+0,06929	+0,06948
3,3	+0,06067	+0,06115	+0,06130	+0,06522	+0,06545	+0,06564
3,4	+0,05946	+0,05994	+0,06009	+0,06114	+0,06164	+0,06181
3,5	+0,05804	+0,05852	+0,05867	+0,05712	+0,05796	+0,05809
3,6	+0,05645	+0,05693	+0,05708	+0,05323	+0,05438	+0,05453
3,7	+0,05471	+0,05520	+0,05534	+0,04953	+0,05104	+0,05118
3,8	+0,05285	+0,05336	+0,05350	+0,04608	+0,04793	+0,04810
3,9	+0,05090	+0,05143	+0,05156	+0,04293	+0,04516	+0,04529
4	+0,04889	+0,04943	+0,04956	+0,04010	+0,04264	+0,04276

Tab. 2-2 Facteurs de forme (en Ryd) de B.H.S de l'aluminium liquide à 700°C et du silicium liquide à 1460°C

q/k _F	W _{2l} (Al)	W _{1l} (Al)	W _{1nl} (Al)	W _{2l} (Si)	W _{1l} (Si)	W _{1nl} (Si)
0	-0,52421	-0,52421	-0,52421	-0,64119	-0,64119	-0,64119
0,1	-0,51955	-0,51955	-0,51209	-0,63527	-0,63527	-0,63695
0,2	-0,50572	-0,50573	-0,50684	-0,61778	-0,61778	-0,61924
0,3	-0,48323	-0,48324	-0,48395	-0,58947	-0,58947	-0,59057
0,4	-0,45286	-0,45287	-0,45308	-0,55156	-0,55157	-0,55220
0,5	-0,41568	-0,41569	-0,41534	-0,50566	-0,50566	-0,50578
0,6	-0,37302	-0,37302	-0,37211	-0,45362	-0,45362	-0,45321
0,7	-0,32637	-0,32637	-0,32493	-0,39747	-0,39747	-0,39657
0,8	-0,27734	-0,27731	-0,27544	-0,33923	-0,33923	-0,33791
0,9	-0,22750	-0,22746	-0,22526	-0,28084	-0,28082	-0,27918
1	-0,17836	-0,17831	-0,17591	-0,22397	-0,22395	-0,22208
1,1	-0,13125	-0,13120	-0,12871	-0,17003	-0,17002	-0,16827
1,2	-0,08725	-0,08720	-0,08476	-0,12010	-0,12009	-0,11806
1,3	-0,04719	-0,04716	-0,04485	-0,07489	-0,07489	-0,07292
1,4	-0,01161	-0,01162	-0,00952	-0,03486	-0,03486	-0,03301
1,5	+0,01914	+0,01910	+0,02095	-0,00016	-0,00017	-0,00151
1,6	+0,04499	+0,04493	+0,04650	+0,02924	+0,02923	+0,03072
1,7	+0,06599	+0,06592	+0,06721	+0,05354	+0,05353	+0,05482
1,8	+0,08233	+0,08228	+0,08230	+0,07304	+0,07303	+0,07412
1,9	+0,09428	+0,09431	+0,09507	+0,08810	+0,08811	+0,08901

2	+0,10236	+0,10252	+0,10308	+0,09930	+0,09933	+0,10007
2,1	+0,10929	+0,10948	+0,11001	+0,10808	+0,10811	+0,10879
2,2	+0,11325	+0,11346	+0,11395	+0,11370	+0,11372	+0,11432
2,3	+0,11500	+0,11522	+0,11567	+0,11688	+0,11689	+0,11744
2,4	+0,11500	+0,11521	+0,11564	+0,11811	+0,11809	+0,11860
2,5	+0,11361	+0,11380	+0,11420	+0,11775	+0,11770	+0,11817
2,6	+0,11114	+0,11129	+0,11167	+0,11613	+0,11604	+0,11648
2,7	+0,10781	+0,10791	+0,10827	+0,11350	+0,11336	+0,11377
2,8	+0,10383	+0,10386	+0,10420	+0,11007	+0,10988	+0,11026
2,9	+0,09936	+0,09932	+0,09963	+0,10604	+0,10578	+0,10613
3	+0,09453	+0,09441	+0,09470	+0,10153	+0,10121	+0,10154
3,1	+0,08945	+0,08924	+0,08952	+0,09669	+0,09630	+0,09660
3,2	+0,08421	+0,08393	+0,08418	+0,09161	+0,09115	+0,09143
3,3	+0,07890	+0,07854	+0,07877	+0,08638	+0,08585	+0,08612
3,4	+0,07357	+0,07314	+0,07336	+0,08107	+0,08049	+0,08073
3,5	+0,06827	+0,06780	+0,06800	+0,07574	+0,07512	+0,07534
3,6	+0,06305	+0,06256	+0,06274	+0,07045	+0,06979	+0,07000
3,7	+0,05794	+0,05746	+0,05763	+0,06522	+0,06455	+0,06474
3,8	+0,05298	+0,05254	+0,05269	+0,06011	+0,05945	+0,05962
3,9	+0,04820	+0,04782	+0,04796	+0,05513	+0,05450	+0,05466
4	+0,04361	+0,04333	+0,04346	+0,05032	+0,04973	+0,05098

Dans les tableaux précédents, W_{2l} et W_{1l} sont les facteurs de forme avec l'écrantage local, obtenus respectivement par l'approche de SHAW et celle de H-A. W_{1nl} est le facteur de forme à écrantage non local avec l'approche de H-A.

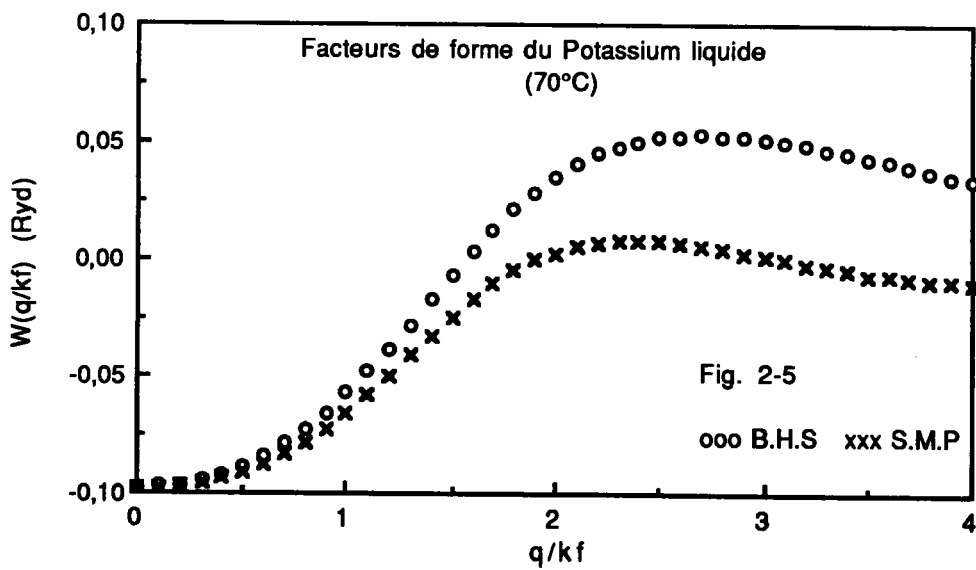
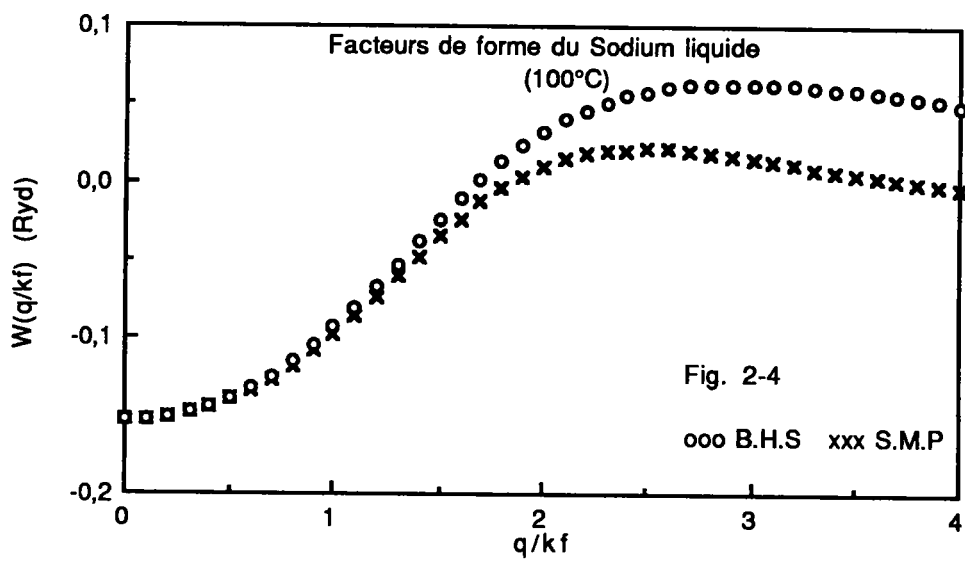
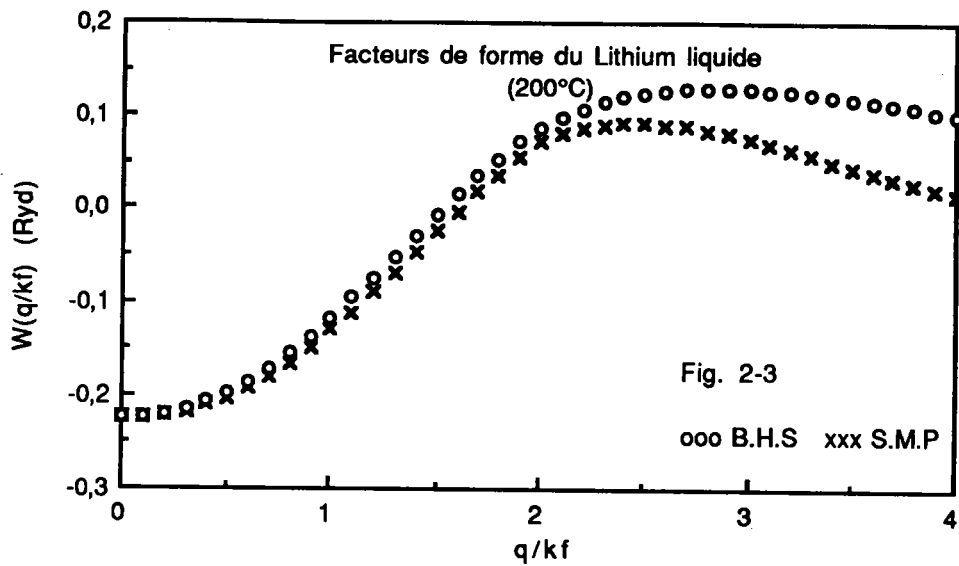
D'après les valeurs données ci dessus nous pouvons constater que pour le modèle de B.H.S :

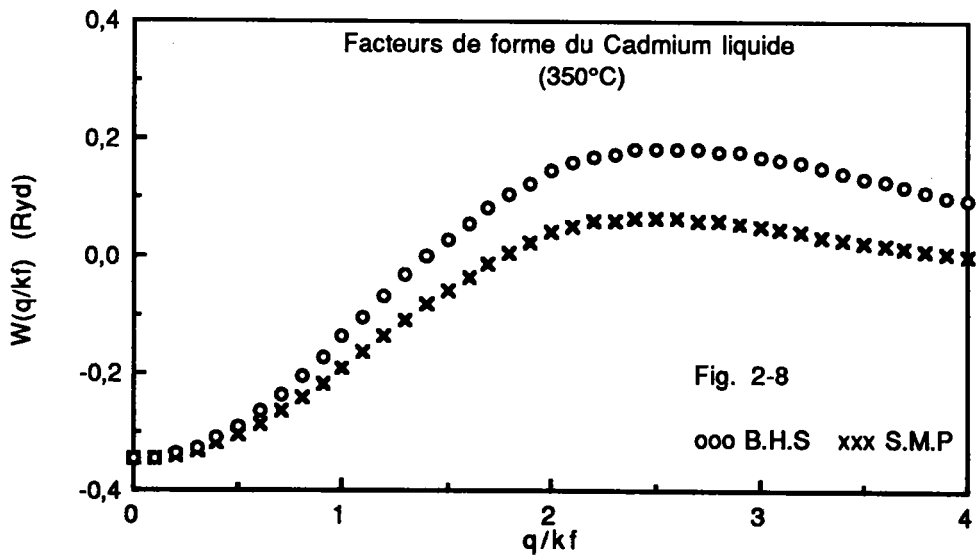
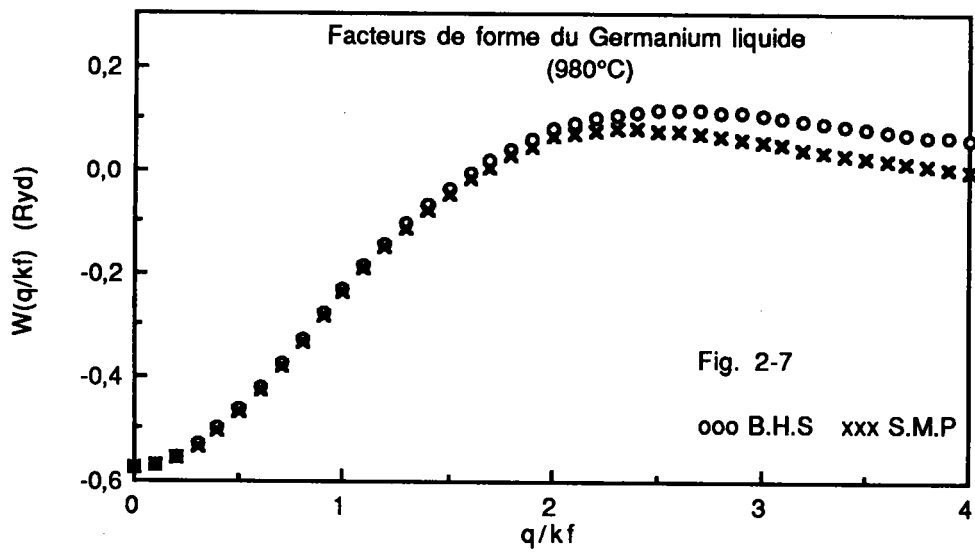
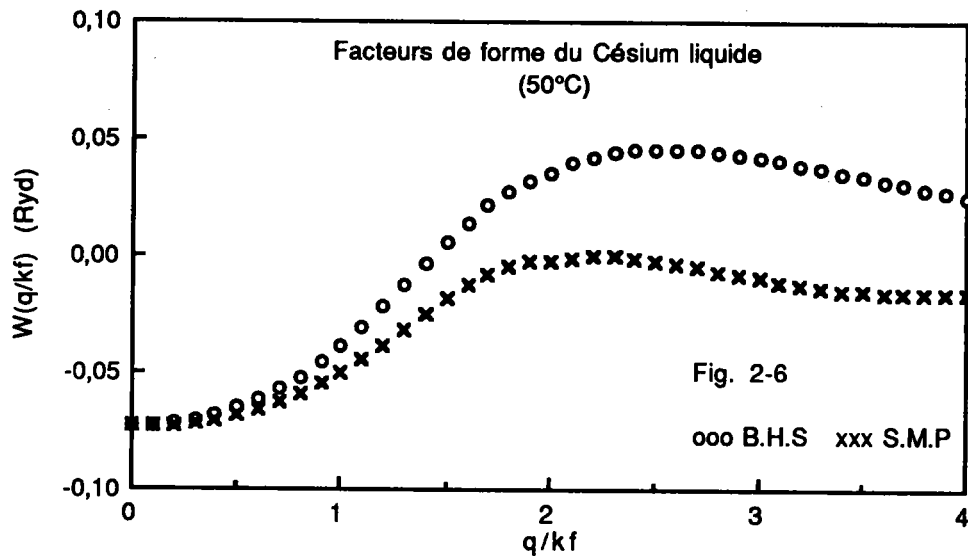
-Les approches de SHAW et de H-A donnent des résultats très voisins pour le facteur de forme.

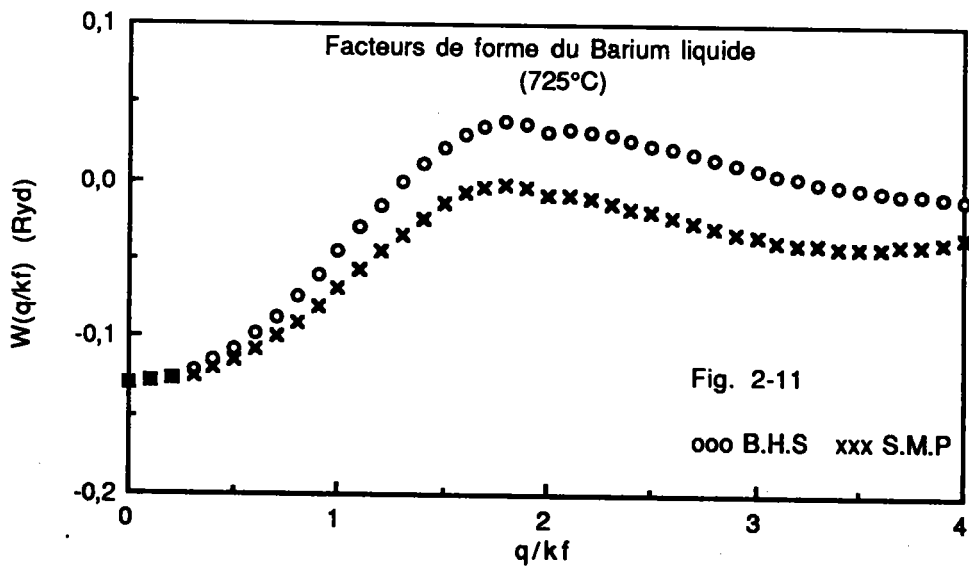
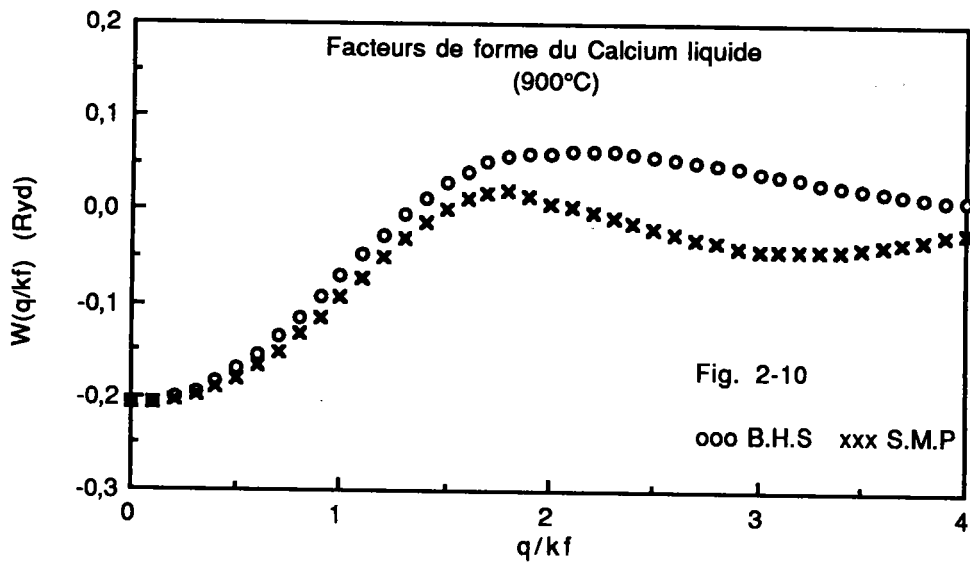
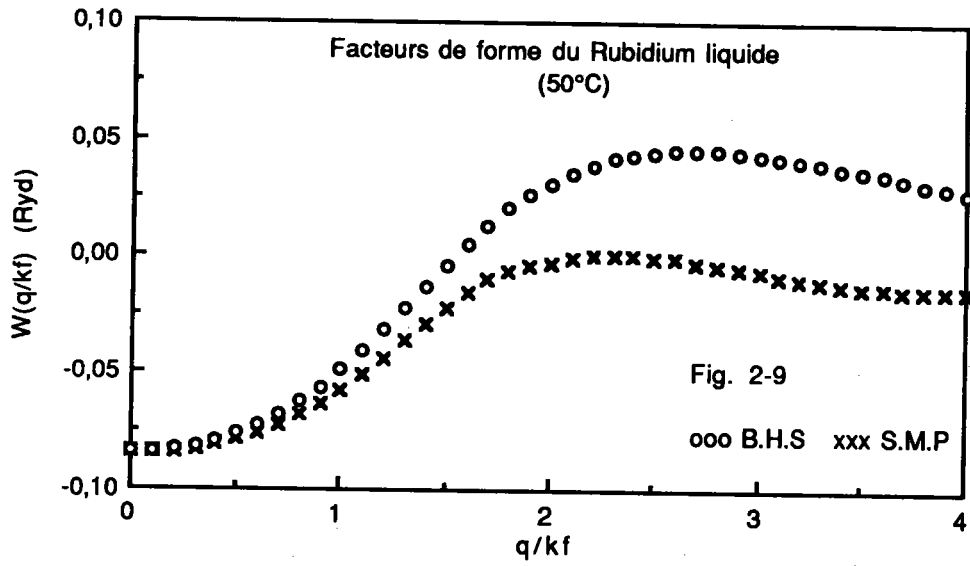
-Les valeurs des facteurs de forme obtenues avec les deux types d'écrantage sont presque identiques. Cependant, pour ce modèle il est avantageux d'utiliser l'écrantage local afin d'avoir des expressions analytiques et d'éviter le calcul numérique.

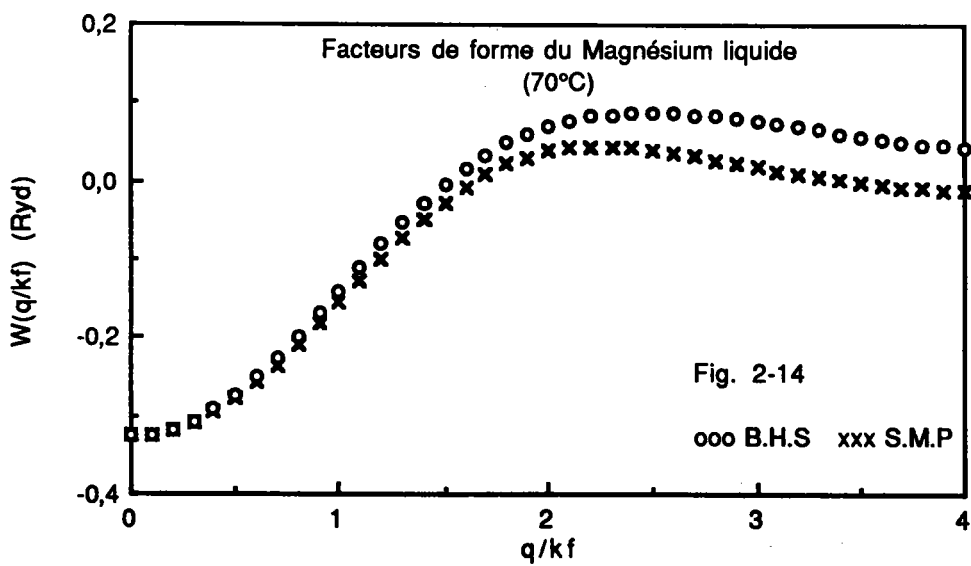
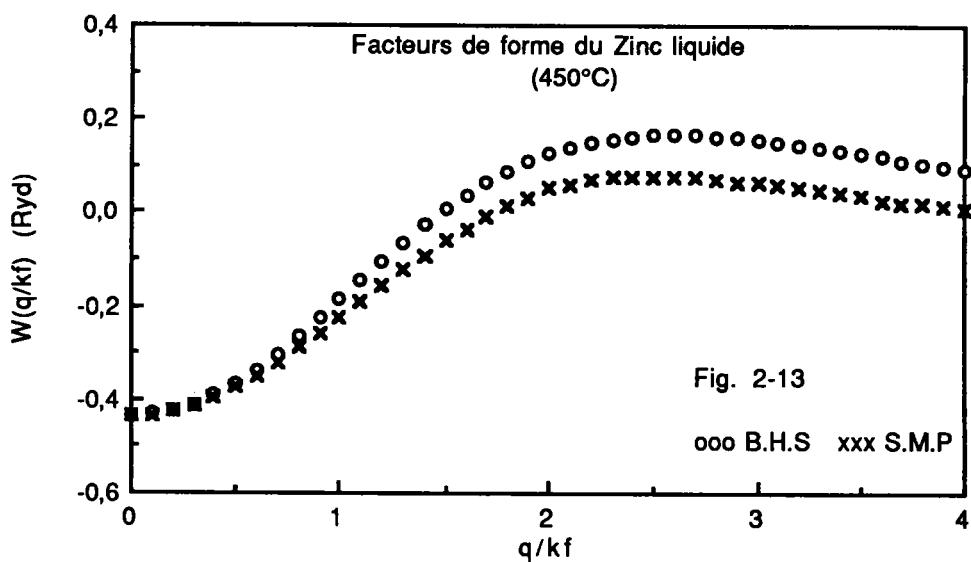
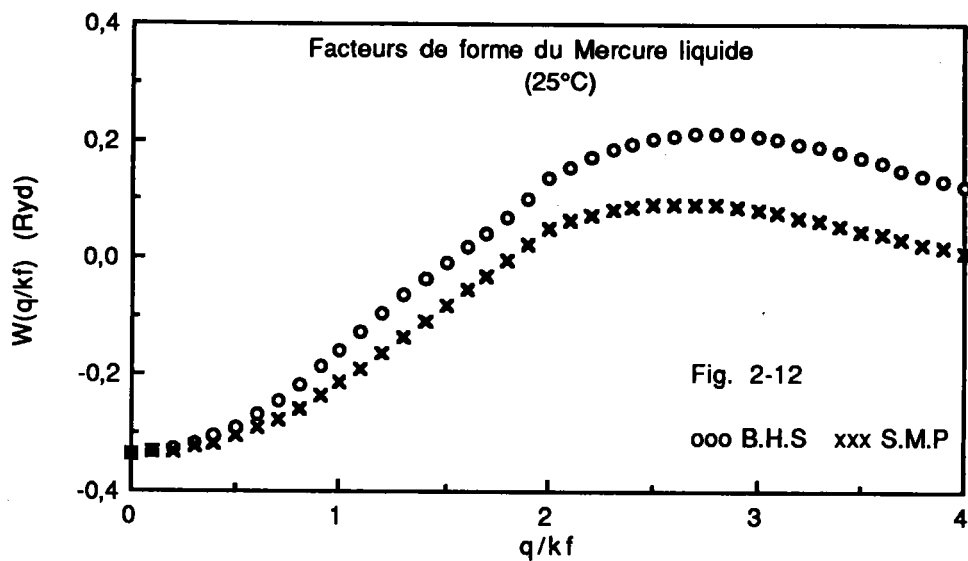
II-5-2 Facteurs de forme pour 25 éléments

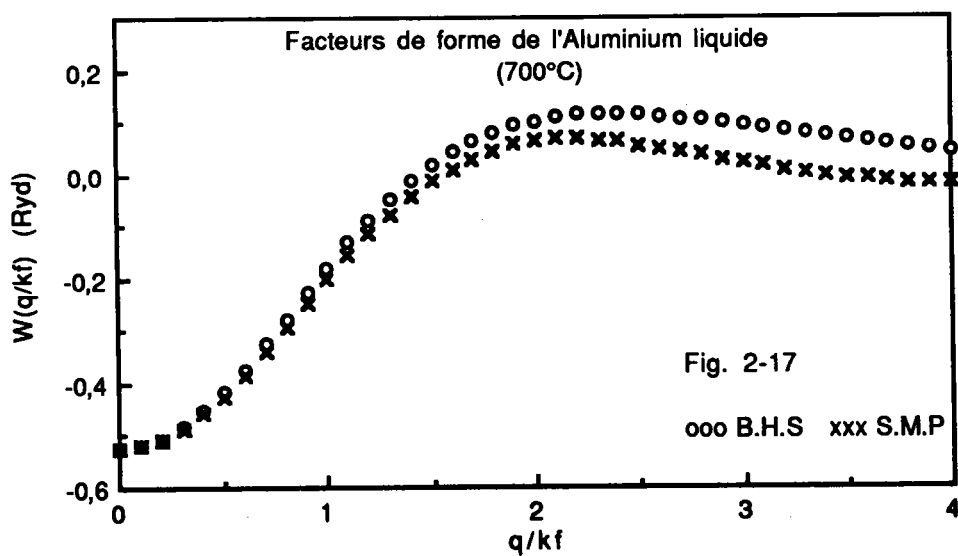
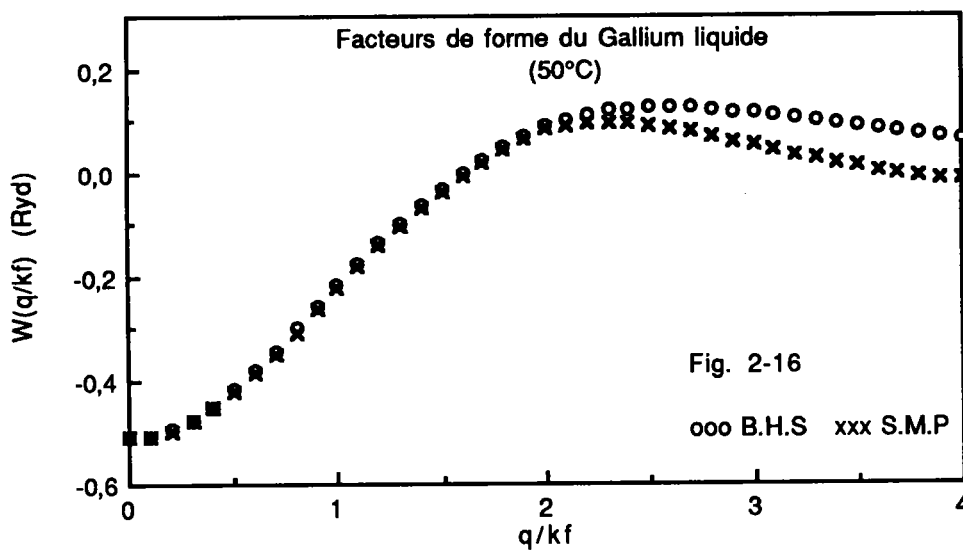
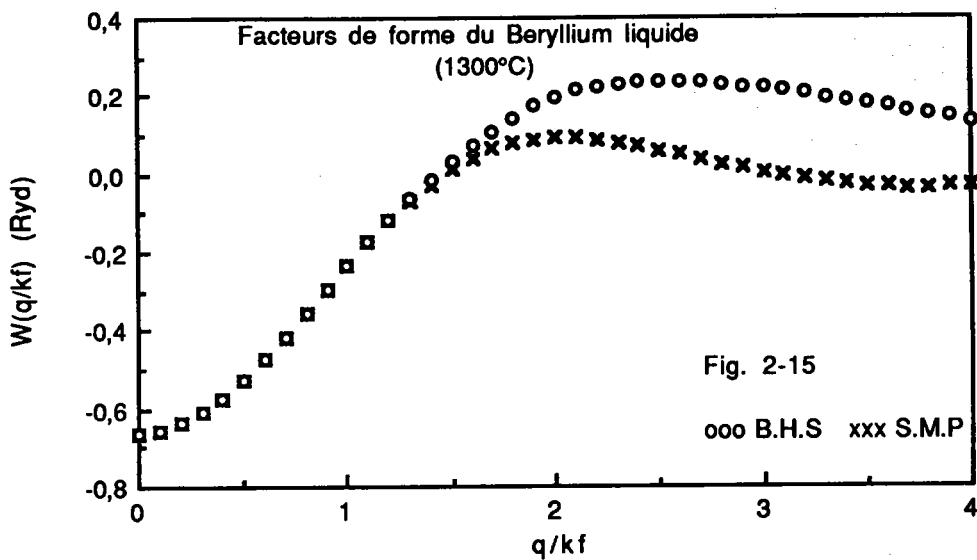
Nous avons tracé les facteurs de forme de B.H.S (approche de H-A) pour 25 éléments à l'état liquide (Fig. de 2-3 à 2-27). Sur les mêmes figures, nous avons reporté les valeurs des facteurs de forme que nous avons calculés à partir du "Simple Model Potential"(S.M.P). (Les paramètres ont été pris de la publication d'ANIMALU [6]). Pour les deux modèles, le facteur de forme a été écranté d'une manière locale avec la fonction diélectrique de V-S [27].

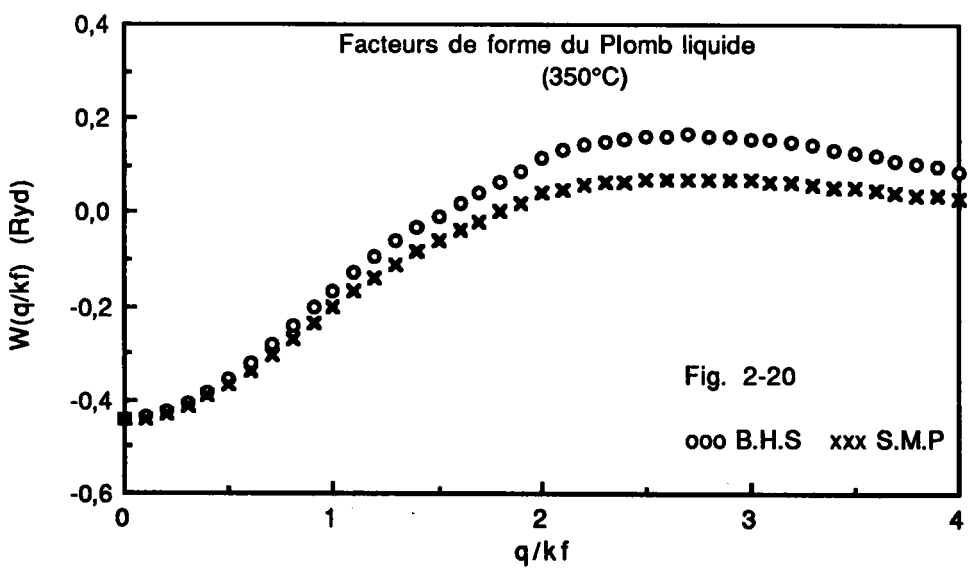
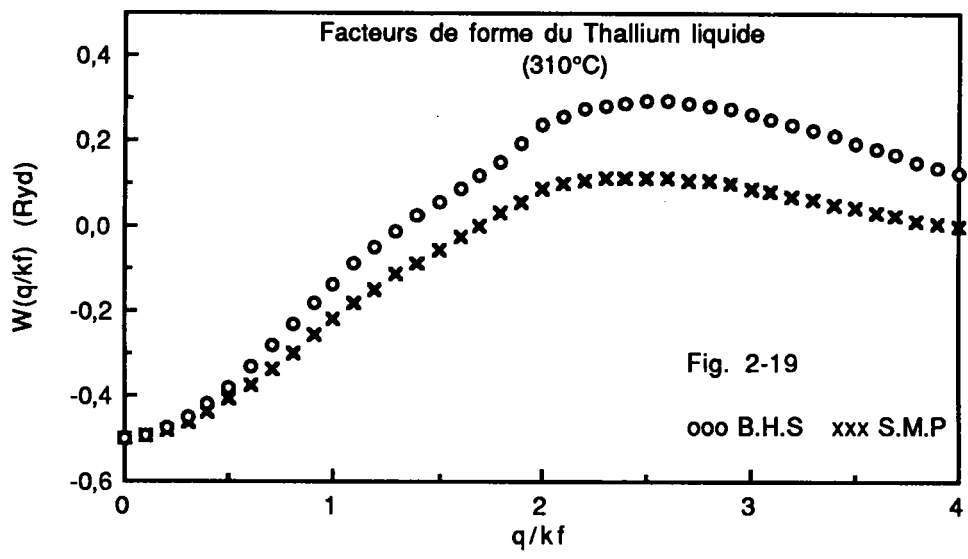
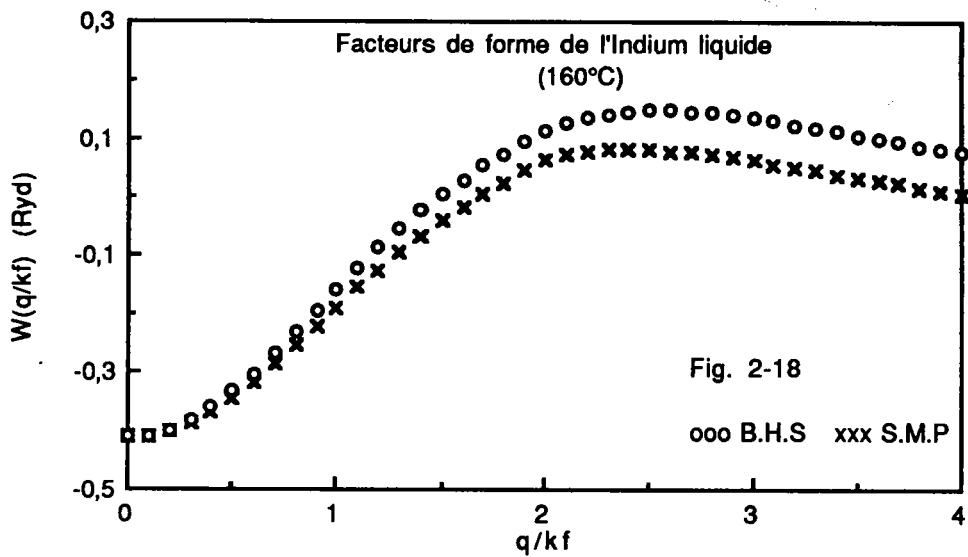


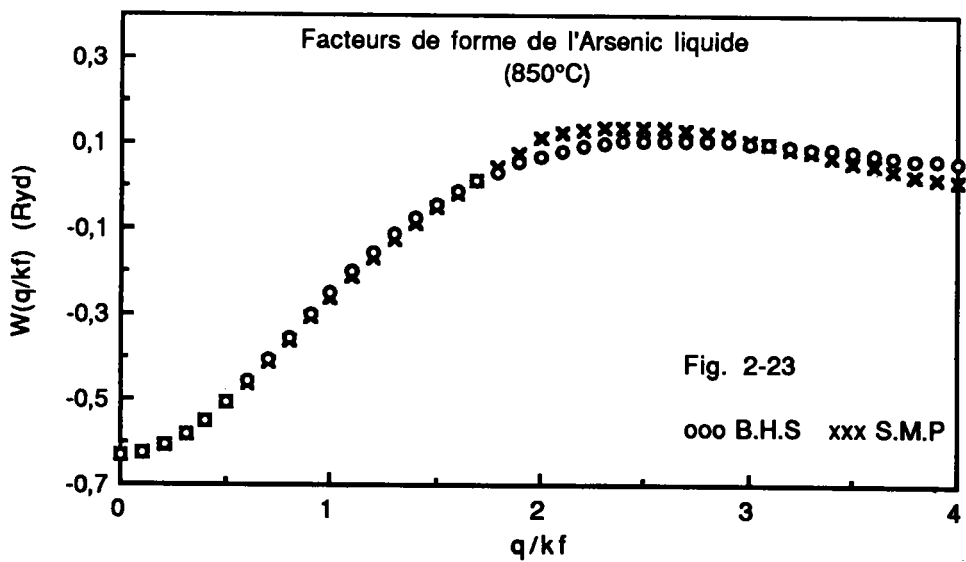
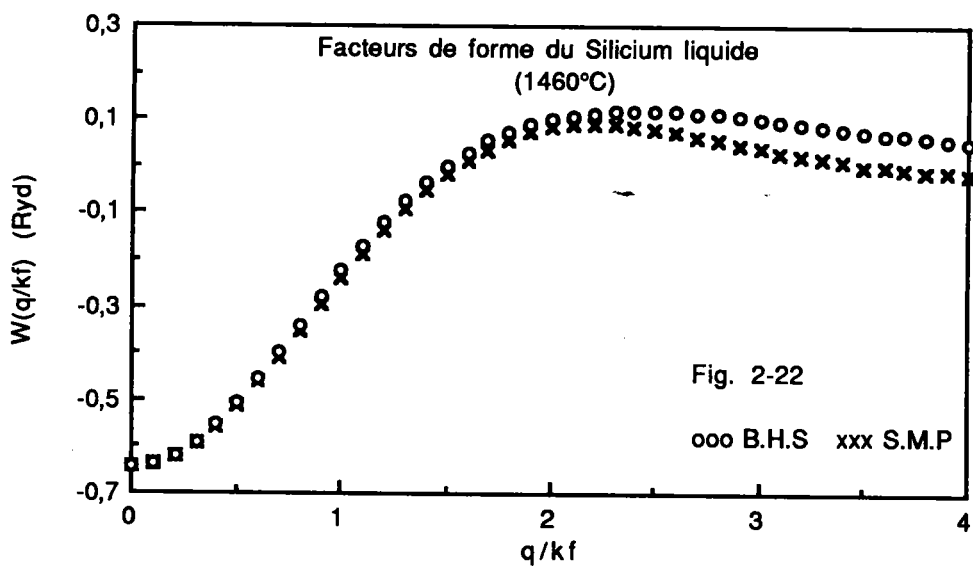
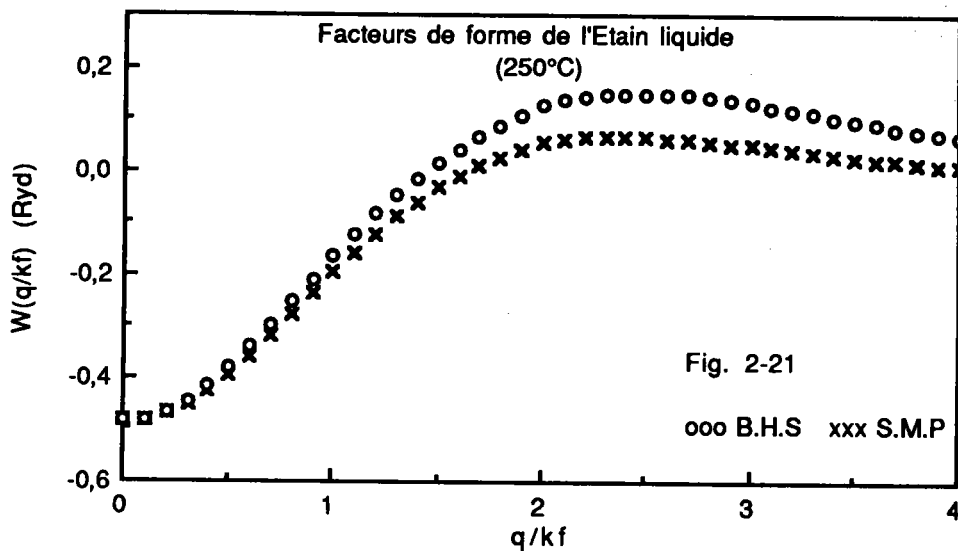


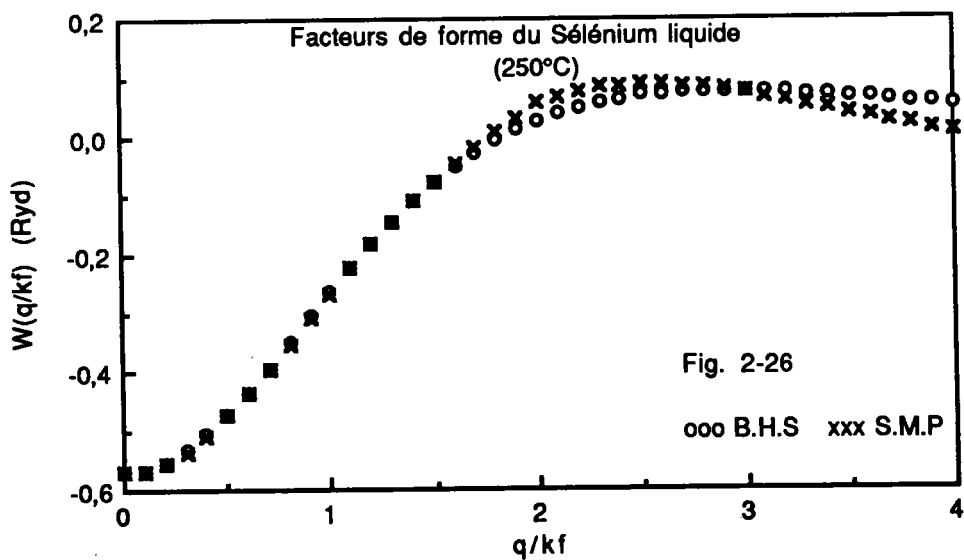
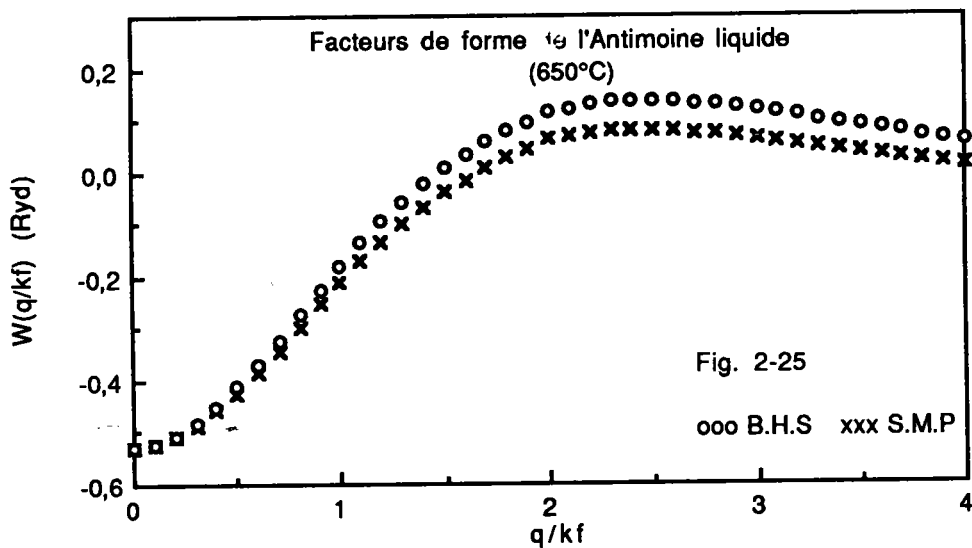
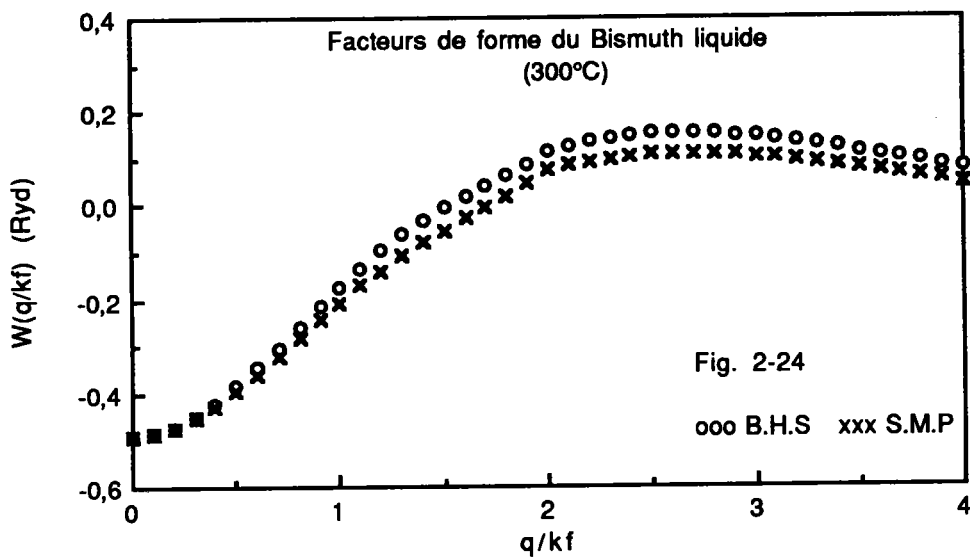


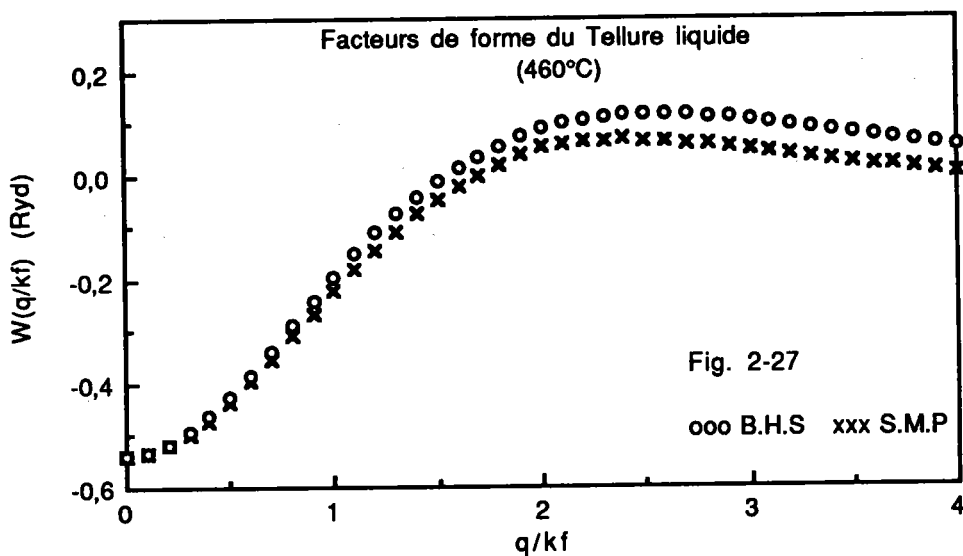












On peut voir que pour la plupart des corps, les facteurs de forme calculés à partir des deux modèles sont comparables dans la région où $q \leq k_F$. Pour $q > k_F$, les facteurs de forme de B.H.S. sont plus élevés que ceux de S.M.P. et les différences sont parfois importantes. Ceci peut être expliqué par le fait que le pseudopotentiel de B.H.S. est plus profond que celui de S.M.P. dans la région du cœur ionique.

Avant de clore ce chapitre, rappelons que le modèle de H-A est discontinu en R_M . Ceci peut introduire des oscillations artificielles du facteur de forme pour les grandes valeurs de q , comme l'avait prouvé SHAW [16].

Pour le modèle de B.H.S., le pseudopotentiel est continu et ses paramètres sont indépendants de l'énergie, ce qui rend son utilisation plus facile.

Les facteurs de forme que nous avons établi dans cette partie serviront dans la suite de ce travail pour calculer les propriétés des métaux et alliages liquides.

Nous avons présenté dans la publication [40] (à paraître) les formules analytiques et les facteurs de forme que nous avons déterminés avec l'écrantage local et l'approche de H-A, pour le lithium, le sodium, le potassium et le césium à l'état liquide.

CHAPITRE III

CALCUL DES PROPRIETES DE TRANSPORT ELECTRONIQUE

III - 1 - INTRODUCTION

Dans cette partie nous allons rappeler les expressions de la résistivité et du pouvoir thermoélectrique absolu qui ont été établies par ZIMAN [3] dans sa théorie pour les métaux liquides. Cette théorie a été généralisée par FABER et ZIMAN [41] pour les alliages binaires.

III - 2 - EQUATION DE BOLTZMANN

Les propriétés de transport électronique sont décrites au moyen de la fonction de distribution des électrons de conduction $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$. Pour un système à l'équilibre, cette fonction ne dépend que de l'énergie E et est donnée par la statistique de FERMI-DIRAC :

$$f^0(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu_e}{k_B T}\right)} \quad (3-2-1)$$

où μ_e est le potentiel chimique des électrons (qui est voisin de l'énergie de FERMI pour les métaux), k_B la constante de BOLTZMANN et T la température absolue.

L'équilibre du système peut être détruit par l'application d'un champ électrique ou d'un gradient de température. Cependant, la fonction f s'écarte de f^0 et devient :

$$f = f^0 + g \quad (3-2-2)$$

où g représente la perturbation de la fonction de distribution.

Le retour à l'équilibre du système se fait sous l'effet des collisions après un temps τ appelé temps de relaxation. La fonction f est solution de l'équation de BOLTZMANN qui s'écrit alors :

$$\left(-\frac{\partial f^0}{\partial E}\right) \tilde{v}_k \left(-\frac{(E(k) - \mu_e)}{T} \tilde{\nabla}_r T + e \left(\tilde{\varepsilon} - \frac{1}{e} \tilde{\nabla}_r \mu_e\right)\right) = \left(-\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = \frac{g}{\tau} \quad (3-2-3)$$

où \tilde{v}_k est la vitesse de l'électron dans l'état \tilde{k} , $\tilde{\nabla}_r T$ est le gradient de température et $\tilde{\varepsilon}$ est le champ électrique.

III - 3 - LA CONDUCTIVITE ELECTRIQUE

A un instant t , le nombre d'électrons dans un volume élémentaire est :

$$\frac{2}{8 \Pi^3} f(\tilde{r}, \tilde{k}, t) d^3 k \quad (3-3-1)$$

La densité totale du courant électrique s'écrit alors :

$$\tilde{J} = \frac{e}{4 \Pi^3} \int \tilde{v}_k f(\tilde{r}, \tilde{k}, t) d^3 k \quad (3-3-2)$$

(L'intégrale se fait sur tout le volume de l'échantillon). En utilisant la relation (3-2-2) on obtient :

$$\tilde{J} = \frac{e}{4 \Pi^3} \int \tilde{v}_k f^0 d^3 k + \frac{e}{4 \Pi^3} \int \tilde{v}_k g d^3 k \quad (3-3-3)$$

f^0 est une fonction paire de k et \tilde{v}_k est une fonction impaire de k , ce qui annule la première intégrale de la densité de courant. On en arrive à :

$$\tilde{J} = \frac{e}{4 \Pi^3} \int \tilde{v}_k g d^3 k \quad (3-3-4)$$

Si on suppose maintenant que la température et le potentiel électrochimique sont uniformes, l'équation de BOLTZMANN s'écrit :

$$\left(-\frac{\partial f^0}{\partial E}\right) \tilde{v}_k e \tilde{\varepsilon} = \frac{g}{\tau} \quad (3-3-5)$$

La densité de courant devient alors :

$$\tilde{J} = \frac{e^2}{4 \Pi^3} \int \tau \tilde{v}_k (\tilde{v}_k \tilde{\varepsilon}) \left(-\frac{\partial f^0}{\partial E}\right) d^3 k \quad (3-3-6)$$

Dans la relation précédente, l'intégration dans l'espace des k peut-être changée en une intégration sur l'énergie, et sur une surface d'énergie constante (la surface de FERMI) on obtient :

$$\bar{J} = \frac{e^2}{4\pi^3 \hbar} \int_0^\infty \int_{SDF} \tau \bar{v}_k (\bar{v}_k \bar{\epsilon}) \left(- \frac{\partial f^0}{\partial E} \right) dS \frac{dE}{v_k} \quad (3-3-7)$$

D'après la statistique de FERMI-DIRAC, $\left(- \frac{\partial f^0}{\partial E} \right)$ peut-être remplacée par une distribution de DIRAC :

$$\left(- \frac{\partial f^0}{\partial E} \right) = \delta (E - \mu_e) \quad (3-3-8)$$

La relation (3-3-7) se transforme en :

$$\bar{J} = \frac{e^2}{4\pi^3 \hbar} \int_{SDF} \tau \frac{\bar{v}_k (\bar{v}_k \bar{\epsilon})}{v_k} dS \quad (3-3-9)$$

Dans le cas d'un liquide isotrope, (dans un système de coordonnées cartésiennes) les trois directions de l'espace sont équivalentes pour la vitesse. Cependant, si on suppose que le champ électrique est dirigé suivant ox , on a :

$$(\bar{v}_k (\bar{v}_k \bar{\epsilon}))_{\text{sur } ox} = v_{kx}^2 \epsilon = \frac{1}{3} v_k^2 \epsilon \quad (3-3-10)$$

On obtient alors (sur ox) :

$$J = \frac{e^2}{12\pi^3 \hbar} \int_{SDF} \tau v_k \epsilon dS \quad (3-3-11)$$

Finalement on arrive à la conductivité électrique qui est définie par :

$$J = \sigma \epsilon \quad (3-3-12)$$

$$\text{d'où : } \sigma = \frac{e^2}{12\pi^3 \hbar} \int_{SDF} \tau v_k dS \quad (3-3-13)$$

III - 4 - LE TEMPS DE RELAXATION

Dans l'équation de BOLTZMANN qui a été définie par (3-2-3), on peut

exprimer la variation par rapport au temps, de la fonction de distribution due aux collisions à l'aide de la probabilité de diffusion par unité de temps de l'état \bar{k} vers l'état \bar{k}' .

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = \frac{\Omega}{8\pi^3} \int (P(\bar{k}', \bar{k}) f(\bar{k}') (1-f(\bar{k})) - P(\bar{k}, \bar{k}') f(\bar{k}) (1-f(\bar{k}'))) d^3k' \quad (3-4-1)$$

(Ω est le volume de l'échantillon).

Si l'on admet que les collisions sont parfaitement élastiques, les probabilités des transitions directes ou inverses sont égales :

$$P(\bar{k}', \bar{k}) = P(\bar{k}, \bar{k}') \quad (3-4-2)$$

La relation (3-4-1) devient :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = \frac{\Omega}{8\pi^3} \int P(\bar{k}, \bar{k}') (f(\bar{k}') - f(\bar{k})) d^3k' \quad (3-4-3)$$

Dans un métal liquide, les surfaces d'égale énergie sont sphériques et les transitions n'affectent que les électrons situés au voisinage du niveau de FERMI, on a alors :

$$k = k' = k_F \quad (k = |k| = \text{norme du vecteur } \bar{k}) \quad (3-4-4)$$

A l'aide de (3-2-2), le terme de collision s'écrit :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = \frac{\Omega}{8\pi^3} \int P(\bar{k}, \bar{k}') (g(\bar{k}') - g(\bar{k})) d^3k' \quad (3-4-5)$$

d'où on peut déduire le temps de relaxation :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\Omega}{8\pi^3} \int P(\bar{k}, \bar{k}') \left(1 - \frac{g(\bar{k}')}{g(\bar{k})} \right) d^3k' \quad (3-4-6)$$

qui s'écrit finalement compte tenu de (3-3-5) et (3-3-10) :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\Omega}{8\pi^3} \int P(\bar{k}, \bar{k}') \left(1 - \frac{k'_x}{k_x} \right) d^3k' \quad (3-4-7)$$

k'_x et k_x sont les projections des vecteurs \bar{k}' et \bar{k} sur l'axe ox .

Comme les collisions sont parfaitement élastiques, la probabilité de transition ne dépend que de l'angle de diffusion θ . En utilisant les coordonnées sphériques l'expression (3-4-7) se simplifie et on obtient :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\Omega}{4\pi^2} \iint P(\theta) (1 - \cos \theta) \sin \theta \, d\theta \, k'^2 \, dk' \quad (3-4-8)$$

La densité de probabilité de transition par unité de temps peut-être donnée par la théorie des perturbations dépendantes du temps. Le temps de relaxation devient alors :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\Omega m k_F}{2\pi \hbar^3} \int_0^\pi |\langle \bar{k}' | W(r) | \bar{k} \rangle|^2 (1 - \cos \theta) \sin \theta \, d\theta \quad (3-4-9)$$

(m étant la masse de l'électron).

Pour l'intégration sur k' nous avons posé $k = k' = k_F$ puisque les transitions ne se font qu'entre états \bar{k} et \bar{k}' situés sur la sphère de FERMI. $\langle \bar{k}' | W(r) | \bar{k} \rangle$ représente l'élément de matrice du potentiel perturbateur W . La relation (3-4-9) peut aussi s'exprimer en fonction du vecteur de diffusion $\bar{q} = \bar{k}' - \bar{k}$:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{4 \Omega m k_F}{\pi \hbar^3} \int_0^1 |\langle \bar{k} + \bar{q} | W(r) | \bar{k} \rangle|^2 \left(\frac{q}{2k_F} \right)^3 d \left(\frac{q}{2k_F} \right) \quad (3-4-10)$$

III - 5 - LA RESISTIVITE ELECTRIQUE

Pour un métal liquide la surface de FERMI est sphérique, d'où la relation (3-3-13) s'écrit :

$$\sigma = \frac{e^2}{3\pi^2 m} k_F^3 \tau(k_F) \quad (3-5-1)$$

$$\text{où } k_F \text{ est donné par : } k_F = \left(\frac{3\pi^2 N Z}{\Omega} \right)^{1/3} \quad (3-5-2)$$

Dans (3-4-10) l'élément de matrice peut être factorisé de la même manière qu'au premier chapitre (relation (1-8-18)):

$$|\langle \bar{k} + \bar{q} | W(r) | \bar{k} \rangle|^2 = |S(q)|^2 |W_q(\bar{k})|^2 = \frac{1}{N} a(q) |W_q(\bar{k})|^2 \quad (3-5-3)$$

$$\text{où } a(q) = N |S(q)|^2 \quad (3-5-4)$$

est la fonction d'interférence.

On rappelle que $W_q(\vec{k})$ est le facteur de forme et $S(q)$ est le facteur de structure. La résistivité électrique s'écrit alors :

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{12\pi m^2}{e^2 \hbar^3 k_F^2} \frac{\Omega}{N} \int_0^1 a(q) (W_q(k_F))^2 \left(\frac{q}{2k_F}\right)^3 d\left(\frac{q}{2k_F}\right) \quad (3-5-5)$$

(ρ est donnée dans le système d'unités international).

III - 6 - LE POUVOIR THERMOELECTRIQUE ABSOLU

Le pouvoir thermoélectrique absolu est relié à la conductivité électrique par la relation suivante :

$$S = \frac{\Pi^2 k_B^2 T}{3e} \left(\frac{\partial \text{Log } \sigma(E)}{\partial E} \right)_{E = E_F} \quad (3-6-1)$$

qui s'écrit aussi :

$$S = \frac{\Pi^2 k_B^2 T}{3e E_F} \frac{k_F}{2} \left(-\frac{\partial \text{Log } \rho}{\partial k} \right)_{k = k_F} \quad (3-6-2)$$

on peut poser :

$$X = -\frac{k_F}{2} \left(\frac{\partial \text{Log } \rho}{\partial k} \right)_{k = k_F} = -\frac{k_F}{2\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial k} \right)_{k = k_F} \quad (3-6-3)$$

on obtient alors :

$$S = \frac{\Pi^2 k_B^2 T}{3e E_F} X \quad (3-6-4)$$

X étant le paramètre thermoélectrique.

Pour le calcul de l'expression de X , il est plus commode d'exprimer la résistivité en fonction de k , puis dériver et prendre la valeur en $k = k_F$. D'après (3-5-5) on peut écrire :

$$\rho(k) = \frac{3\pi m^2}{4 e^2 \hbar^3 k^6} \frac{\Omega}{N} \int_0^{2k} a(q) (W_q(k))^2 q^3 dq \quad (3-6-5)$$

$$\text{Log } \rho(k) = \text{Log} \left(\frac{3\pi m^2}{4 e^2 \hbar^3} \frac{\Omega}{N} \right) - 6 \text{Log } k + \text{Log} \left(\int_0^{2k} a(q) (W_q(k))^2 q^3 dq \right) \quad (3-6-6)$$

En dérivant on obtient :

$$\left(\frac{\partial \text{Log } \rho(k)}{\partial k} \right)_{k=k_F} = -\frac{6}{k_F} + \frac{16k_F^3 a(2k_F) (W_{2k_F}(k_F))^2 + 2 \int_0^{2k_F} q^3 dq a(q) W_q(k_F) \left(\frac{\partial}{\partial k} W_q(k) \right)_{k=k_F}}{\int_0^{2k_F} a(q) (W_q(k_F))^2 q^3 dq} \quad (3-6-7)$$

Le paramètre thermoélectrique peut se mettre sous la forme suivante :

$$X = 3 - 2q - \frac{r}{2} \quad (3-6-8)$$

$$\text{où } q = \frac{4k_F^4 a(2k_F) (W_{2k_F}(k_F))^2}{\int_0^{2k_F} a(q) (W_q(k_F))^2 q^3 dq} \quad (3-6-9)$$

$$\text{et } r = \frac{2k_F \int_0^{2k_F} q^3 dq a(q) W_q(k_F) \left(\frac{\partial}{\partial k} W_q(k) \right)_{k=k_F}}{\int_0^{2k_F} a(q) (W_q(k_F))^2 q^3 dq} \quad (3-6-10)$$

Le terme 3 dans le paramètre thermoélectrique correspond à des électrons libres. $2q$ résulte de la borne supérieure d'intégration. Le terme $r/2$ est relatif à la dépendance en énergie et à la non localité du pseudopotentiel, il s'annule pour les pseudopotentiels locaux et indépendants de l'énergie.

III - 7 - LA FONCTION D'INTERFERENCE

La fonction d'interférence $a(q)$ d'un métal liquide ne dépend que de la position des atomes. Elle décrit la structure du métal et peut être obtenue expérimentalement par diffraction des rayons X ou de neutrons (WASEDA [42]). La fonction d'interférence est proportionnelle à l'intensité moyenne I diffusée par le liquide. on a :

$$a(q) = \frac{I}{Nf^2} \quad (3-7-1)$$

où : N est le nombre total d'atomes et f le facteur de diffusion.

$a(q)$ peut s'écrire aussi à l'aide de la fonction de distribution radiale (ou fonction de corrélation de paire) $g(r)$.

$$a(q) = 1 + \rho_0 \int_0^\infty (g(r)-1) 4\pi r^2 \frac{\sin q r}{q r} dr \quad (3-7-2)$$

ρ_0 est la densité atomique moyenne ($\rho_0 = \frac{1}{\Omega_0} = \frac{N}{\Omega}$).

ou encore :

$$a(q) = \frac{1}{1 - \rho_0 C(q)} \quad (3-7-3)$$

$C(q)$ étant la transformée de Fourier de la fonction de corrélation directe $C(r)$.

Le calcul de la fonction d'interférence est aussi possible en théorie si la fonction $C(r)$ est connue. Différentes théories s'affrontent en proposant des expressions diverses pour $C(r)$. Elles se justifient en général aussi mal les unes que les autres et le seul critère valable est la confrontation avec l'expérience.

Modèle de sphères dures

Pour la plupart des métaux liquides, le modèle de sphères dures déduit de l'équation de PERCUS-YEVICK [43] est une bonne approximation pour calculer $a(q)$. Les expressions de la fonction d'interférence ont été données par ASHCROFT et LEKNER [44]. L'équation de (P.Y) s'écrit :

$$C(r) = g(r) \left(1 - \exp\left(\frac{u(r)}{k_B T}\right) \right) \quad (3-7-4)$$

où $u(r)$ est le potentiel de paire, qui prend la forme suivante :

$$u(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } r < \sigma \\ 0 & \text{si } r > \sigma \end{cases} \quad (3-7-5)$$

σ étant le diamètre des sphères dures.

Pour la fonction $C(q)$ on obtient :

$$C(q) = -4\pi \sigma^3 \int_0^1 ds s^2 \frac{\sin(sq\sigma)}{sq\sigma} (\alpha + \beta s + \gamma s^3) \quad (3-7-6)$$

avec : $s = r/\sigma$

$$\alpha = \frac{(1+2\eta)^2}{(1-\eta)^4} \quad \beta = \frac{-6\eta(1+\eta/2)^2}{(1-\eta)^4} \quad \gamma = \frac{\eta(1+2\eta)^2}{2(1-\eta)^4} \quad (3-7-7)$$

η est le taux d'empilement donné par :

$$\eta = \frac{1}{6} \Pi \rho_0 \sigma^3 \quad (3-7-8)$$

D'après (3-7-3) la fonction d'interférence devient :

$$a(q) = (1 + 24 \eta (\alpha J_1 + \beta J_2 + \gamma J_4))^{-1} \quad (3-7-9)$$

Les fonctions J_1 , J_2 , et J_4 sont définies par :

$$J_1 = \frac{1}{(q\sigma)^3} (\sin q\sigma - q\sigma \cos q\sigma)$$

$$J_2 = \frac{1}{(q\sigma)^4} (2q\sigma \sin q\sigma + (2 - (q\sigma)^2) \cos q\sigma - 2) \quad (3-7-10)$$

$$J_4 = \frac{1}{(q\sigma)^6} ((4(q\sigma)^3 - 24q\sigma) \sin q\sigma + (-(q\sigma)^4 + 12(q\sigma)^2 - 24) \cos q\sigma + 24)$$

Expérimentalement, la valeur de $a(q)$ en $q = 0$ est difficile à mesurer. Cette valeur a été donnée par MARCH [45] à partir de la compressibilité isotherme χ_T :

$$a(0) = \rho_0 k_B \chi_T \quad (3-7-11)$$

D'après (3-7-9) la limite de $a(q)$ en $q = 0$ est :

$$a(0) = \frac{(1 - \eta)^4}{(1 + 2\eta)^2} \quad (3-7-12)$$

En théorie, il est donc possible d'ajuster le coefficient η de façon à ce que la fonction d'interférence dans le modèle des sphères dures reproduise au mieux la fonction d'interférence expérimentale. Pour certains métaux polyvalents, la fonction d'interférence expérimentale présente un épaulement à droite du pic principal que le modèle des sphères dures ne fournit pas. Cependant, plusieurs auteurs ont procédé à des corrections pour retrouver les détails de $a(q)$. BRETONNET [46] a présenté une étude assez détaillée sur les modèles de potentiels interioniques et les a commentés.

III - 8 - RESISTIVITE ET POUVOIR THERMOELECTRIQUE DES ALLIAGES

Le formalisme de ZIMAN [3] pour le calcul de la résistivité et du pouvoir thermoélectrique des métaux purs a été étendu par FABER et ZIMAN [41] au cas des alliages binaires. La résistivité d'un alliage s'écrit :

$$\rho = \frac{3\pi m^2}{4e^2 \pi^3 k_F^6} \frac{\Omega}{N} \int_0^{2k_F} A(q, k_F) q^3 dq \quad (3-8-1)$$

$$\text{où : } A(q, k_F) = C_1 a_{11} (W_q^1(k_F))^2 + C_2 a_{22} (W_q^2(k_F))^2 + 2\sqrt{C_1 C_2} a_{12} W_q^1(k_F) W_q^2(k_F) \quad (3-8-2)$$

C_1 et C_2 sont les concentrations atomiques des deux constituants.

a_{11} , a_{22} et a_{12} sont les fonctions d'interférence partielles données par ASHCROFT et LANGRETH [47].

$W_q^1(k_F)$ et $W_q^2(k_F)$ sont les facteurs de forme des corps 1 et 2 dans l'alliage.

La relation (3-6-4) qui donne le pouvoir thermoélectrique reste valable, mais les coefficients q et r dans le paramètre thermoélectrique deviennent :

$$q = \frac{4k_F^4 A(2k_F, k_F)}{\int_0^{2k_F} A(q, k_F) q^3 dq} \quad (3-8-3)$$

$$r = \frac{k_F \int_0^{2k_F} \left(\frac{\partial}{\partial k} A(q,k) \right)_{k=k_F} q^3 dq}{\int_0^{2k_F} A(q,k_F) q^3 dq} \quad (3-8-4)$$

Il est à noter qu'il faut prendre l'énergie de Fermi et le volume atomique dans l'alliage. Il faut tenir compte aussi des modifications des facteurs de forme dans l'alliage, à savoir les paramètres du modèle de potentiel s'ils dépendent de l'énergie, de la fonction diélectrique qui intervient dans l'écrantage, de la lacune de charge et des masses effectives.

D'autres fonctions d'interférence partielles ont été proposées par FABER et ZIMAN [41] et par BATHIA et THORNTON [48]. WASEDA [42] a discuté l'ensemble de ces fonctions, et a donné les relations qui les lient à celles définies par ASHCROFT et LANGRETH [47].

CHAPITRE IV

CALCUL DE LA RESISTIVITE ET DU POUVOIR THERMOELECTRIQUE ABSOLU A PARTIR DU MODELE DE B.H.S

IV -1 - INTRODUCTION

Dans cette partie nous présentons les résistivités que nous avons calculées dans le cadre de la théorie de ZIMAN [3] avec les modèles de pseudopotentiel de B.H.S et de S.M.P pour un certain nombre de métaux liquides purs. Nous étudions également la résistivité et le pouvoir thermoélectrique du système Ga-Ge. Les résultats théoriques que nous avons obtenus sont comparés à l'expérience.

IV - 2 - RESISTIVITES DE 22 METAUX LIQUIDES PURS

Au chapitre 3 nous avons rappelé la théorie de ZIMAN qui permet de calculer la résistivité à partir d'un modèle de pseudopotentiel. Les deux grandeurs importantes qui interviennent dans l'expression de la résistivité ρ (rel 3-5-5) sont le facteur de forme et la fonction d'interférence.

Pour le facteur de forme, nous avons adopté dans nos calculs l'approche de H-A pour le modèle de B.H.S (voir chap. 2) et l'écrantage local avec la fonction diélectrique de V-S [27]. Le S.M.P est utilisé dans les mêmes conditions que le modèle de B.H.S.

En ce qui concerne la fonction d'interférence, nous avons choisi le modèle des sphères dures (S.D). Les paramètres qui permettent de calculer σ (le diamètre des sphères dures) ont été relevés du livre de WASEDA [42] sauf pour les corps suivants : Li, Te, Si et Ge. Nous avons pris $\eta = 0,45$ pour les deux premiers et $\eta = 0,38$ pour le Si. Pour le germanium nous avons utilisé l'expression suivante : $\eta = 0,5437 \exp(-3,964 \cdot 10^{-4} T(^{\circ}\text{C}))$.

η étant le taux d'empilement qui est relié à σ (diamètre des sphères dures) par la rel. (3-7-8).

Sur le tableau (4-1) nous avons regroupé les résultats théoriques et expérimentaux des résistivités électriques.

Tab. 4-1 Résistivités ($\mu \Omega \cdot \text{cm}$) de 22 éléments

Elément	T°C	ρ B.H.S	ρ S.M.P	ρ Exp	
Li	200°C	30,13	20,37	26	[49]
Na	200°C	13,80	9,73	13,14	[50]
K	135°C	44,80	16,19	16,80	[50]
Rb	100°C	50,40	19,64	27	[51]
Cs	28,6°C	104,29	16,71	36	[52]
Mg	651°C	68,47	22,16	25,35	[53]
Ca	850°C	251,77	26,88	33	[54]
Ba	730°C	308,75	19,70	306	[54]
Zn	450°C	50,03	18,28	36,55	[55]
Cd	350°C	44,14	25,81	33,55	[55]
Hg	25°C	51	40,08	96,22*	
Al	700°C	50,08	22,55	25	[56]
Ga	50°C	33,95	31,22	26,23	[57]
In	1000°C	79,73	50,75	52,35	[55]
Tl	303°C	196,18	33,25	73,1	[52]
Si	1440°C	37,71	34,17	81	[52]
Ge	980°C	47,73	46,65	68,35	[55]
Sn	1000°C	77,81	52,70	67,5	[55]
Pb	350°C	61,29	78,83	96,40	[55]
Sb	650°C	69,64	65,68	114,5	[55]
Bi	300°C	75	88,88	129,1	[55]
Te	460°C	78,84	99,62	575	[55]

* Valeur admise par le " National Bureau of Standards ".

D'après les résultats que nous avons reportés ci-dessus, on peut constater que pour la plupart des éléments le modèle de B.H.S. surestime la résistivité. C'est un résultat inattendu, car en général la résistivité calculée à partir d'un modèle de pseudopotential est inférieure à celle déduite de l'expérience (c'est le cas du S.M.P).

Cependant, les valeurs obtenues à partir des deux modèles sont comparables, à l'exception des éléments suivants : le césium, le calcium, le barium et le thallium. Pour ces corps, l'écart entre les résistivités théoriques est très important. Dans le calcul de la résistivité, on fait intervenir l'intégrale du facteur de forme entre 0 et $2k_F$, et nous pouvons constater (voir chap. 2) que dans cette région, les facteurs de forme déduits des deux modèles sont assez différents.

A notre avis, ceci explique les différences observées entre les résistivités de B.H.S et de S.M.P pour ces quatre éléments.

Pour clore ce paragraphe, on peut dire que les résultats des résistivités obtenus à partir des deux modèles (B.H.S et S.M.P) et avec le modèle des sphères dures sont assez satisfaisants. Nous pensons que les fonctions d'interférence expérimentales diminueraient les écarts observés pour certains éléments entre la résistivité théorique et la résistivité expérimentale.

IV - 3 - LE SYSTEME GALLIUM-GERMANIUM

Nous allons nous intéresser plus particulièrement au système Ga-Ge à l'état liquide.

Dans un premier temps, on étudiera la résistivité et le pouvoir thermoélectrique absolu (P.T.A) du gallium et du germanium purs en fonction de la température.

Dans un deuxième temps, on s'intéressera aux alliages Ga-Ge. Les résultats de la résistivité et du P.T.A en fonction de la concentration en germanium ont fait l'objet d'une publication (insérée à la fin de ce chapitre), et dans laquelle on a également présenté et discuté les pseudopotentiels et les facteurs de forme analytiques du gallium et du germanium liquides purs, à partir du modèle de B.H.S. Par ailleurs ([58] à paraître), les résultats expérimentaux de la résistivité et du P.T.A de l'alliage Ga-Ge réalisés par ANNO [57] dans notre Laboratoire (L.P.L.I.), ont été interprétés par le modèle de pseudopotentiel de B.H.S.

IV-3-1 Résistivités du gallium et du germanium purs

Nous avons calculé les résistivités des corps purs en fonction de la température avec le B.H.S et le S.M.P. Pour ces deux modèles, on a utilisé l'écrantage local avec la fonction diélectrique de V-S [27].

Nos résultats sont reportés sur les figures (4-1) et (4-2). Nous avons tracé sur ces mêmes figures les courbes expérimentales obtenue par ANNO [57] pour le gallium et par GASSER [55] pour le germanium.

Nous pouvons remarquer que les courbes théoriques obtenues à partir des deux modèles sont très voisines pour le Ga et également pour le Ge. En comparant les résultats du calcul avec les valeurs expérimentales, on peut constater que le modèle de B.H.S ainsi que le S.M.P surestiment légèrement la résistivité du gallium et sousestiment celle du germanium.

Sur les figures (4-1) et (4-2), nous avons aussi reporté les résistivités respectives du Ga et du Ge calculées avec les fonctions d'interférence expérimentales pour une seule valeur de la température. On peut voir que la résistivité théorique est améliorée avec la fonction d'interférence expérimentale. En effet, le Ga et le Ge présentent un épaulement à droite sur le premier pic de la fonction d'interférence expérimentale, et cette particularité est ignorée avec le modèle des sphères dures.

En conclusion, nous pouvons dire que le modèle de pseudopotential de B.H.S et le S.M.P donnent des résultats satisfaisants pour la résistivité aussi bien pour le gallium que pour le germanium.

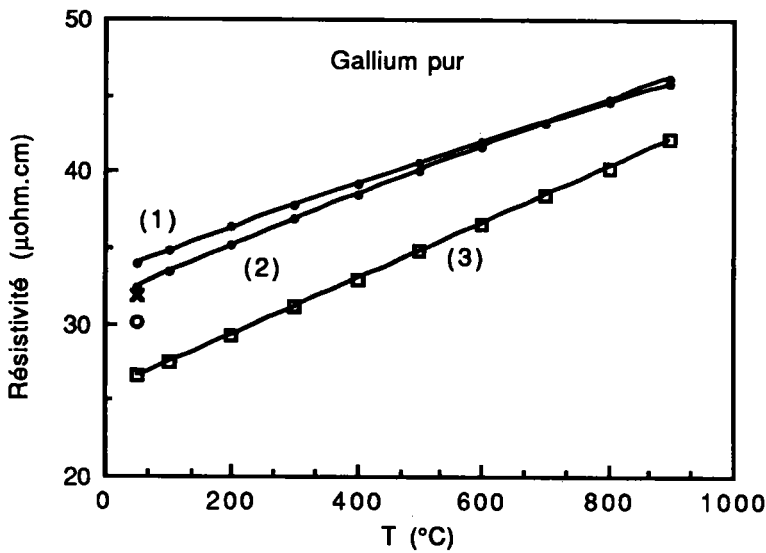


Fig. 4-1 Résistivité du gallium liquide. (1) B.H.S avec $a(q)$ S.D. (2) S.M.P avec $a(q)$ S.D. (3) exp. ANNO.
x B.H.S avec $a(q)$ exp. o B.H.S avec $a(q)$ exp.

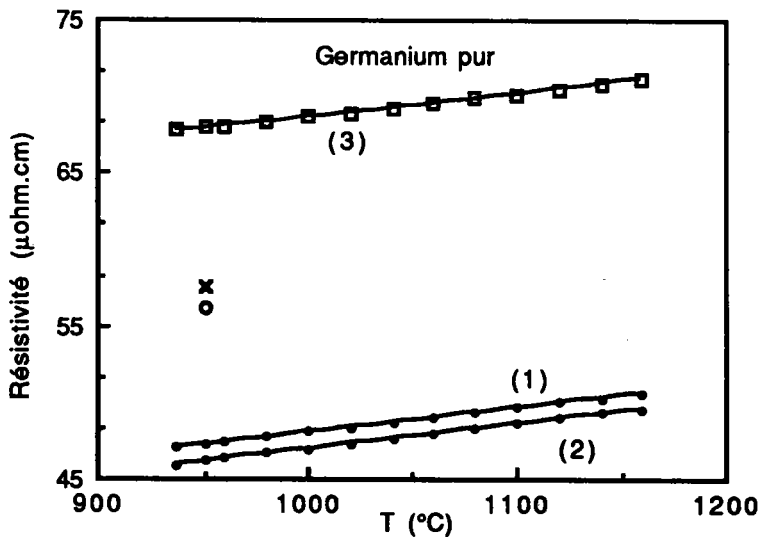


Fig. 4-2 Résistivité du germanium liquide. (1) B.H.S avec $a(q)$ S.D. (2) S.M.P avec $a(q)$ S.D. (3) exp. GASSER.
x B.H.S avec $a(q)$ exp. o B.H.S avec $a(q)$ exp.

IV-3-2 Pouvoir thermoélectrique du gallium et du germanium purs

A partir de la formule de ZIMAN [3] qui donne le pouvoir thermoélectrique (rel. 3-6-2), nous avons calculé les résultats théoriques pour le Ga et le Ge avec le B.H.S et le S.M.P.

Nous avons reporté nos valeurs du P.T.A en fonction de la température sur les figures (4-3) et (4-4). Nous avons également tracé les courbes expérimentales obtenue par ANNO [57] pour le gallium et par BATH [59] pour le germanium.

Pour le gallium nous pouvons voir (Fig. 4-3) que les résultats calculés avec les deux modèles sont très proches de ceux obtenus par l'expérience (les échelles sont très dilatées).

Quant au germanium (Fig. 4-4), le modèle de B.H.S donne un meilleur accord avec l'expérience que le S.M.P. Ceci est peut être dû au fait que dans nos calculs, nous avons ignoré le terme de dépendance en énergie (voir relation 3-6-10). Ce terme disparaît avec le modèle de B.H.S car il a la particularité d'être indépendant de l'énergie.

Signalons enfin que les fonctions d'interférence expérimentales n'influent presque pas sur le P.T.A du gallium et du germanium purs.

Pour terminer ce chapitre, nous pouvons dire que le modèle de pseudopotential de B.H.S donne des résultats assez satisfaisants dans l'ensemble pour les propriétés électroniques des métaux liquides.

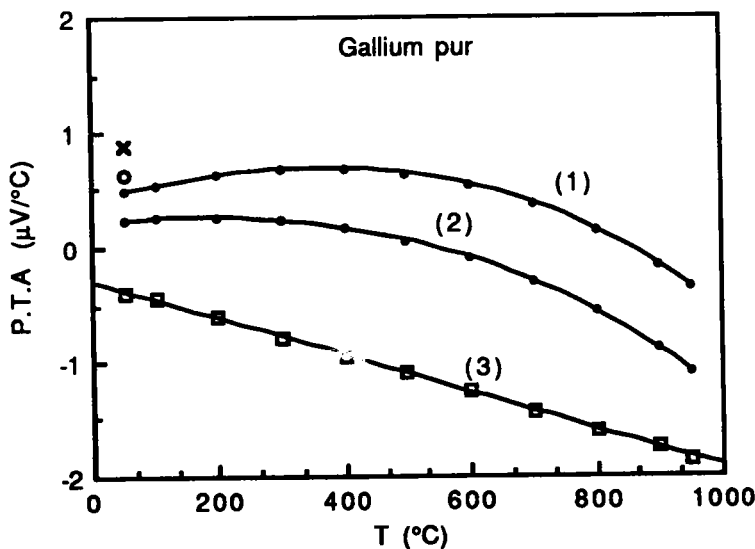


Fig. 4-3 Pouvoir thermoélectrique du gallium liquide.
 (1) B.H.S avec $a(q)$ S.D. (2) S.M.P avec $a(q)$ S.D.
 (3) exp. ANNO.
 x B.H.S avec $a(q)$ exp. o B.H.S avec $a(q)$ exp.

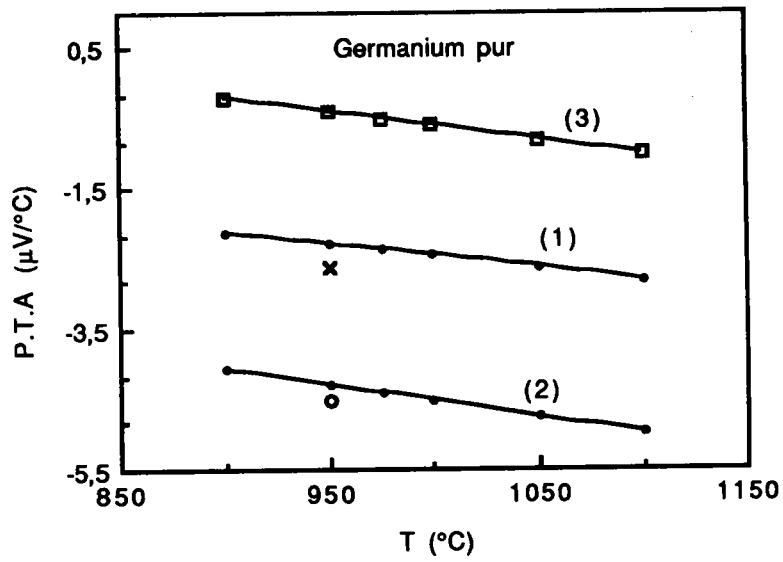


Fig. 4-4 Pouvoir thermoélectrique du germanium liquide.
 (1) B.H.S avec a(q) S.D. (2) S.M.P avec a(q) S.D.
 (3) exp. BATH.
 x B.H.S avec a(q) exp. o B.H.S avec a(q) exp.

IV-3-3 Résistivité et pouvoir thermoélectrique du système Ga-Ge

Electronic properties of liquid metals and alloys calculated with the first-principles model (pseudo)potential of Bachelet, Hamann and Schlüter: the Ga-Ge system

Nabila Koubaa and Jean-Georges Gasser

Laboratoire de Physique des Liquides Métalliques, Faculté des Sciences, Université de Metz, 57045 Metz Cédex 1, France

Received 30 May 1989, in final form 13 September 1989

Abstract. A model (pseudo)potential method has proven to be an interesting technique for calculating electronic properties in the framework of the Ziman formula for pure liquid metals and the Faber-Ziman expression for liquid alloys. First-principles model potentials are non-local and their parameters are energy dependent. In the alloy one must take into account an energy dependent effective mass, a depletion hole and the Fermi energy core shift which is not known for alloys. Furthermore, the thermopower explicitly includes an energy dependent contribution. The first-principles model (pseudo)potential of Bachelet, Hamann and Schlüter (BHS) is energy independent and avoids the necessity of making these corrections. It has been used to calculate analytically the corresponding form factor. The resistivity and the thermopower of pure germanium and gallium and of the germanium-gallium alloy have been determined by using the Faber-Ziman formalism. Both hard sphere and experimental structure factors have been used (when available). The agreement between experimental and theoretical properties can be considered as good and confirms that the BHS model potential is adequate for describing the electronic properties of liquid alloys.

1. Introduction

A pseudopotential method has proven to be an interesting and useful technique for calculating electronic properties of liquid metals [1] and alloys [2] in terms of pseudopotential form factors and structure factors. Recently, Bachelet, Hamann and Schlüter (BHS) [3] introduced a new family of pseudopotentials. The aim of this work is to compute with it the 'on-Fermi-sphere' form factor, and different properties like the resistivity and thermoelectric power of liquid metals and alloys.

The basic starting point for investigating these properties is the pseudopotential form factor which is the matrix element of the pseudopotential between plane waves. The pseudopotential theory consists of replacing the deep core potential at each ionic site by a weak pseudopotential (and the corresponding wave function by a pseudowave one). The latter is constructed to preserve the eigenvalues of the Schrödinger equation.

Two approaches have been used. The first one is the model (pseudo)potential method. It is a 'first-principles' theory in the sense that the parameters of the model potential are fitted to atomic spectroscopic experimental data. This theory has been

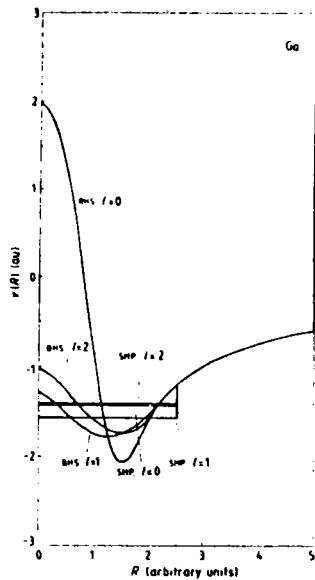


Figure 1. Pseudopotentials of Ga for each value of the angular momentum l , from BHS [3] and SMP [8] models.

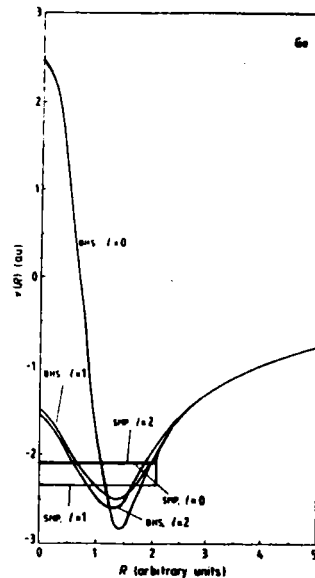


Figure 2. Pseudopotentials of Ge for each value of the angular momentum l , from BHS [3] and SMP [8] models.

developed by, among others, Heine, Abarenkov, Animalu, Shaw, Harrison, So, Moore and Wang [4–11]. The price to pay for the simplification of the theory consists in introducing the non-locality of the model potential and letting the parameters be energy dependent.

The second approach is that of pseudopotentials obtained by the orthogonalisation of wave functions to core states (OPW method). It has been developed by Austin, Heine, Sham and Weaire [12–14], and for liquid metals by Hafner [15]. This procedure is an *ab initio* method.

First-principles model potentials are non-local and their parameters are energy dependent. In the alloy one must take into account an energy dependent effective mass, a depletion hole and the Fermi energy core shift which is not known for alloys. Recently BHS [3] introduced a new family of energy independent models of pseudopotentials which avoid the necessity of making these corrections. They have many interesting properties—e.g. they are transferable and they can be fitted with simple continuous analytic functions on their *ab initio* pseudopotentials. Furthermore, BHS claim that their model potential has been developed for the entire periodic table (from hydrogen to plutonium). This includes the noble, the transition and the rare earth metals which are not well described by the Heine–Abarenkov–Animalu–Shaw model potential family. In figures 1 and 2 we have represented the model potential of BHS [3] and have compared it to that of Animalu and Heine [6] for gallium and germanium respectively. The energy independence of the parameters of the BHS potential allows the ‘transfer’ of these values to the alloy case. However, the model potential ‘on-Fermi-sphere’ form factors, and the electronic properties of liquid metals and alloys derived from the model potential of BHS [3] have not yet been calculated as far as we know.

The purpose of this work is to present the resistivity and the absolute thermoelectric power of liquid gallium, germanium and of gallium–germanium alloys, which have been computed in the framework of the Faber–Ziman formula. In our calculations we have

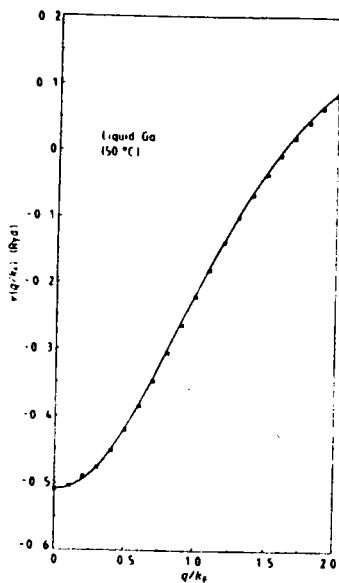


Figure 3. Pseudopotential form factors of Ga as a function of the momentum transfer q . Full curve: BHS [3, 16]; crosses: SMP [8].

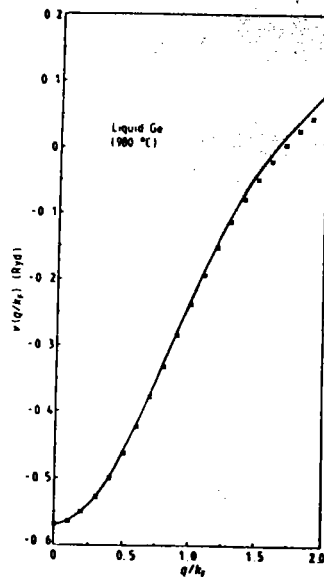


Figure 4. Pseudopotential form factors of Ge as a function of the momentum transfer q . Full curve: BHS [3, 16]; crosses: SMP [8].

used the locally screened form factor (figures 3 and 4) which we have calculated analytically from the BHS pseudopotential [16]. The results are compared with the Animalu [8] simple model potential (SMP) form factor.

2. Formalism

2.1. Electrical resistivity

According to the Ziman formula [1], the electrical resistivity of a pure liquid metal can be written as

$$\rho = \frac{3\pi m^2 \Omega_0}{4e^2 \hbar^3 k_F^6} \int_0^{2k_F} a(q)v(q)^2 q^3 dq. \quad (1)$$

We can see that the resistivity depends on two basic quantities, the pseudopotential form factor on the Fermi surface $v(q)$ which is screened by the conduction electrons, and the liquid structure factor $a(q)$. This formula can be adapted to liquid alloys (Faber-Ziman [2]) by introducing partial structure factors [17] and form factors for each species i in the alloy.

2.2. Thermoelectric power

The absolute thermoelectric power is proportional to the logarithmic derivative of ρ with respect to k at k_F . In terms of Ziman's formula [1] it takes the following form:

$$S = \pi^2 k_B^2 T \chi / 3eE_F \quad (2)$$

where χ is the thermoelectric parameter which is given by

$$\chi = (k_F/2\rho)(\partial\rho/\partial k)_{k=k_F}. \quad (3)$$

Table 1. Least squares analysis of the electrical resistivity and thermoelectric power of liquid gallium and germanium. The correlation coefficient r is also given.

Resistivity of liquid gallium		
Experimental [22]	$\rho = 25.630 + 1.8360 \times 10^{-2} T_c$	$r = 1.000$
Calculated (BHS)	$\rho = 33.495 + 1.3874 \times 10^{-2} T_c$	$r = 0.999$
Calculated (SMP)	$\rho = 31.854 + 1.6205 \times 10^{-2} T_c$	$r = 0.999$
Resistivity of liquid germanium		
Experimental [23]	$\rho = 64.981 - 7.1196 \times 10^{-3} T_c + 1.0799 \times 10^{-5} T_c^2$ or $\rho = 53.227 + 1.5466 \times 10^{-2} T_c$	$r = 1.000$
Calculated (BHS)	$\rho = 31.845 + 1.6207 \times 10^{-2} T_c$	$r = 1.000$
Calculated (SMP)	$\rho = 30.626 + 1.6358 \times 10^{-2} T_c$	$r = 1.000$
Thermoelectric power of liquid gallium		
Experimental [22]	$S = -0.1897 - 1.7642 \times 10^{-3} T_c$	$r = 0.987$
Calculated (BHS)	$S = 0.42151 + 1.2651 \times 10^{-3} T_c - 1.1025 \times 10^{-6} T_c^2 - 1.1313 \times 10^{-9} T_c^3$	$r = 1.000$
Calculated (SMP)	$S = 0.21417 + 4.3509 \times 10^{-4} T_c - 1.0708 \times 10^{-6} T_c^2 - 8.6697 \times 10^{-10} T_c^3$	$r = 1.000$
Thermoelectric power of liquid germanium		
Experimental [24]	$S = 3.40 - 4.00 \times 10^{-3} T_c$	
Calculated (BHS)	$S = 0.88641 - 3.3437 \times 10^{-3} T_c$	$r = 0.999$
Calculated (SMP)	$S = 0.0321 - 4.5543 \times 10^{-3} T_c$	$r = 1.000$

3. Results and discussion

3.1. Electrical resistivity

We have evaluated the resistivity of liquid germanium, gallium and germanium–gallium alloys at different temperatures with BHS [3, 16] and with SMP [8] model potential form factors. The bare BHS form factor (see figures 3 and 4) has been screened locally in the same manner as the SMP [8] one by the dielectric function of Vashishta and Singwi [18]. Our calculations have been performed with Ashcroft–Lekner [19] hard sphere structure factors for pure metals, and Ashcroft–Langreth [20] hard sphere partial structure factors for alloys. The hard sphere diameters have been chosen in the same manner as that described in an earlier paper [21]. In the alloy we have taken into account the modification of the mean atomic volume $\Omega_0(T)$ and of the Fermi wavevector k_F by introducing $Z(c)$ the mean valence and $\Omega_0(T, c)$ the mean atomic volume of the alloy (obtained by a linear interpolation of the pure metal values [21]).

In table 1 we compare our results to the Anno [22] and Gasser [23] experimental values for pure metals. The resistivities computed with the BHS model pseudopotential are close to those computed with the SMP model (differing by less than $1.5 \mu\Omega$ cm for gallium, and $1.1 \mu\Omega$ cm for germanium), but the two models underestimate the resistivity of liquid germanium by about $20 \mu\Omega$ cm, and overestimate the resistivity of liquid gallium by about $3 \mu\Omega$ cm. However, the results depend sensitively on the experimental structure factors of Ga and Ge, which both present a shoulder on the high angle side of their first peak. We can observe that, with the experimental structure factors, we improve the resistivity by $8 \mu\Omega$ cm for germanium and $2 \mu\Omega$ cm for gallium.

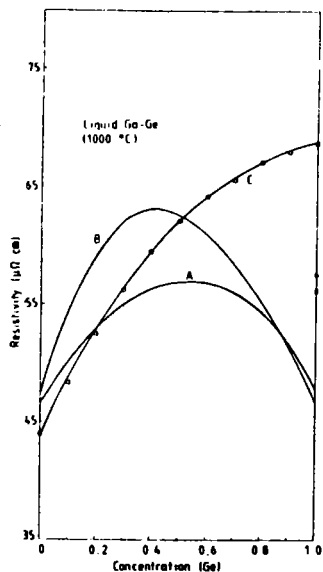


Figure 5. Electrical resistivity of Ga-Ge at 1000 °C. Curve A: BHS [3, 16]; curve B: SMP [8]; curve C: experiment [22]. Triangle: BHS with experimental structure factor; cross: SMP with experimental structure factor.

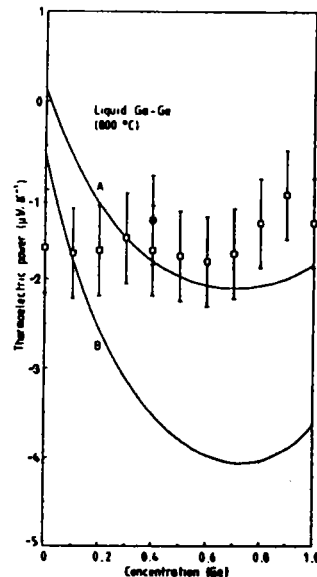


Figure 6. Thermoelectric power of Ga-Ge at 800 °C. Curve A: BHS [3, 16]; curve B: SMP [8]; squares: experiment [25].

We have computed the resistivity of the Ga-Ge alloy at 1000 °C. Our results with BHS [3] and SMP [8] form factors are compared with the experimental resistivity. Figure 5 shows that our results are slightly different from those measured by Anno [22]. In the case of alloys, the partial experimental structure factors are not known. However, with hard spheres, the agreement with experimental data is satisfactory but could probably be improved with experimental structure factors.

3.2. Thermoelectric power

The absolute thermoelectric power has been computed for pure gallium and germanium and for the Ga-Ge system at 800 °C with the SMP (neglecting the energy dependent contribution) and BHS pseudopotentials. We have given our results for pure gallium and for pure germanium in table 1 with both model potentials. We compare our values to the experimental results obtained by Anno [22] for gallium (table 1). Both form factors give results very near to the experimental thermopower (differing by less than $1.5 \mu\text{V K}^{-1}$). The calculated values presented a convex curve which could not be confirmed experimentally because the experimental accuracy was insufficient. We compare our values with the experimental results obtained by Bath [24] for germanium (table 1). The results obtained with BHS form factors are close to the experimental thermopower (within $2.0 \mu\text{V K}^{-1}$). The results are better than for the SMP form factors which give results differing by $4.5 \mu\text{V K}^{-1}$. This is probably due to the neglected energy dependent contribution which does not appear in the BHS form factor. The influence of the experimental structure factor on the thermopower is very small (less than $0.2 \mu\text{V K}^{-1}$). For the alloy, we compare our values with the experimental results obtained by Mayoufi [25] (figure 6). The divergence between the three curves is not very important since the scale is very expanded.

4. Conclusions

BHS locally screened model (pseudo)potentials were used to compute the resistivity and the thermoelectric power of gallium, germanium and of the Ga-Ge system. We have compared our results with those obtained in another theoretical analysis (SMP locally screened model potential) and with experimental data. Both resistivity and thermopower are well explained with these model potentials. It is probable that the remaining discrepancy comes from local screening and from the hard sphere structure factors. Indeed the experimental structure factor improves the resistivity for pure germanium and gallium. When calculating the thermoelectric power, we did not need to take into account the energy dependent contribution in the BHS model (a contribution that we have also neglected when using the SMP potential) because the pseudopotential is energy independent. The non-local contribution can be important, and the use of first-principles energy independent pseudopotentials represents progress in liquid alloy electronic property calculations. We consider our results to be very satisfactory and they confirm that the BHS form factor is adequate for describing the electronic properties of liquid metals and alloys.

References

- [1] Ziman J M 1961 *Phil. Mag.* **6** 1013
- [2] Faber T E and Ziman J M 1965 *Phil. Mag.* **11** 153
- [3] Bachelet G B, Hamann D R and Schlüter M 1982 *Phys. Rev. B* **26** 4199
- [4] Abarenkov I V and Heine V 1965 *Phil. Mag.* **12** 522
- [5] Heine V and Abarenkov I V 1964 *Phil. Mag.* **9** 451
- [6] Animalu A O E and Heine V 1965 *Phil. Mag.* **12** 1249
- [7] Animalu A O E 1973 *Phys. Rev. B* **8** 3542
- [8] Animalu A O E 1965 *Phil. Mag.* **11** 379
- [9] Shaw R W and Harrison W A 1967 *Phys. Rev.* **163** 604
- [10] Shaw R W 1972 *Phys. Rev. B* **5** 4742
- [11] So C B, Moore R A and Wang S 1978 *J. Phys. F: Met. Phys.* **8** 785
- [12] Austin B J, Heine V and Sham L J 1962 *Phys. Rev.* **127** 276
- [13] Heine V and Weaire D 1970 *Solid State Physics* Vol 24 (New York: Academic)
- [14] Sham L J 1961 *Proc. Phys. Soc.* **78** 895
- [15] Hafner J 1977 *Phys. Rev. B* **15** 617
- [16] Koubaa N and Gasser J G 1990 *Proc. Int. Conf. on Liquid and Amorphous Metals (LAM 7) (Kyoto, 1989)* at press
- [17] Faber T E 1972 *Introduction to the Theory of Liquid Metals* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [18] Vashishta P and Singwi K S 1972 *Phys. Rev. B* **6** 875
- [19] Ashcroft N W and Lekner J 1966 *Phys. Rev.* **145** 83
- [20] Ashcroft N W and Langreth D E 1967 *Phys. Rev.* **156** 685
- [21] Gasser J G, Mayoufi M and Bellissent-Funcl M C 1989 *J. Phys.: Condens. Matter* **1** 2409
- [22] Anno L 1985 *Mémoire d'Ingénieur CNAM* Université de Metz, France
- [23] Gasser J G 1982 *Thèse de Doctorat d'Etat* Université de Metz, France
- [24] Bath A 1983 *Thèse de Doctorat d'Etat* Université de Metz, France
- [25] Mayoufi M 1985 *Thèse de Doctorat* Université de Metz, France

CHAPITRE V

CALCUL DU POTENTIEL EFFECTIF A PARTIR DU MODELE DE B.H.S

V - 1 - INTRODUCTION

La nature du potentiel effectif dans les métaux a été d'un intérêt considérable durant les dernières années (COHEN, HARRISON, SHYU et GASPARI, KAHL et HAFNER...[60,31,61,62,63,64]).

Le potentiel effectif peut être déterminé à partir du facteur de structure ou d'un modèle de pseudopotentiel. Cependant, on peut passer du potentiel effectif au facteur de structure par exemple à l'aide de l'approximation de la phase aléatoire ("random phase approximation" RPA). Cette approximation consiste à relier ces deux grandeurs par une formule analytique.

Ce sujet est assez intéressant dans la mesure où il permet d'accéder à la structure, par des moyens de calculs théoriques en évitant de passer par l'expérience qui s'avère parfois délicate et très difficile.

Plusieurs auteurs ont fait des calculs de structure à partir de potentiels effectifs déduits de modèles de potentiels locaux et non locaux. Citons par exemple BRETONNET et REGNAUT, KAHL et HAFNER [65,66,63,64] qui ont travaillé avec les modèles de SHAW et d'ASHCROFT. Ils ont trouvé des résultats assez intéressants qui confirment les données expérimentales.

Dans ce dernier chapitre, nous allons calculer le potentiel effectif de quelques métaux et alliages liquides avec le modèle de pseudopotentiel de B.H.S et avec le S.M.P. Nous utiliserons l'écrantage local et nous discuterons l'effet de la fonction diélectrique sur le potentiel effectif.

V - 2 - LE POTENTIEL EFFECTIF DANS LES CORPS PURS

Dans un métal liquide, on peut définir le potentiel effectif comme étant la somme d'une interaction coulombienne directe entre les ions et d'une interaction indirecte due aux électrons de conduction. L'interaction indirecte dépend fortement de la construction du modèle de pseudopotentiel nu et des effets d'échange et corrélation.

En termes de la caractéristique énergie-vecteur de transfert normalisée (chap.1), le potentiel effectif prend la forme suivante (d'après SHAW [16]) :

$$V(r) = \frac{Z^2}{r} \left(1 - \frac{2}{\pi} \int_0^\infty F_N(q) \frac{\sin qr}{q} dq \right) \quad (5-2-1)$$

$V(r)$ est en unités atomiques. Z est la valence effective qui prend en compte la lacune de charge dans le cas du modèle de potentiel de SHAW. Pour le modèle de B.H.S, le problème de la lacune de charge disparaît.

Dans $F_N(q)$, on tient compte des effets d'échange et corrélation. Le modèle de SHAW est non local et il a été écranté d'une manière non locale. Cependant l'expression de $F_N(q)$ est assez complexe et ne peut être calculée que numériquement. Pour un écrantage linéaire, le problème devient très simple et on obtient :

$$F_N(q) = \left(\frac{\Omega_0 q^2}{4\pi Z} \right)^2 (W_q^0(k))^2 \frac{1}{(1 - G(q))} \left(1 - \frac{1}{\epsilon(q)} \right) \quad (5-2-2)$$

W_q^0 est le facteur de forme nu, $\epsilon(q)$ est la fonction diélectrique qui tient compte des effets d'échange et corrélation et $G(q)$ est la fonction qui décrit ces effets.

Nous pouvons voir que si le facteur de forme est déterminé analytiquement, il en est de même pour $F_N(q)$.

Nous avons calculé le potentiel effectif pour quatre éléments purs (Li, Na, Al, Ge) avec le B.H.S et le S.M.P. Les facteurs de forme correspondants ont été déterminés analytiquement et dans lesquels, l'effet d'échange et corrélation est décrit par la fonction diélectrique statique de V-S [27], qui sera notée par : ϵ_{VS} . Nos résultats sont reportés sur les figures (5-1), (5-2), (5-3) et (5-4).

Pour les quatres éléments étudiés, le potentiel effectif de B.H.S est très voisin de celui du S.M.P.

On peut voir que le potentiel effectif présente des oscillations de FRIEDEL [67] à longue distance qui ont pour origine l'existence de la singularité logarithmique de $\mathcal{E}(q)$ en $q = 2 k_F$.

Pour le lithium et le sodium on observe des potentiels effectifs qui présentent des oscillations lentes par rapport à celles de l'aluminium ou du germanium. Les premiers minimums de $V(r)$ pour Li et Na sont situés respectivement aux alentours de (-5 u.at) et (-4,5 u.at).

EDWARDS et JARZINSKI [68] ont calculé les potentiels effectifs du lithium et du sodium à la température de fusion, avec le modèle optimisé et la fonction diélectrique de SHAW [32]. Ils ont trouvé des valeurs assez proches des nôtres pour les premiers minimums. Cependant, leurs courbes présentent une allure asymptotique avec l'apparition d'oscillations pour le lithium aux très grandes valeurs de r .

Nos potentiels effectifs pour l'aluminium ont la même allure que ceux obtenus par BRETONNET [46] avec le modèle de SHAW et \mathcal{E}_{VS} à la température de fusion. On observe juste un léger écart dans la profondeur du premier minimum.

Pour le germanium, on peut remarquer la présence d'un léger épaulement avec le B.H.S qui s'accroît avec le S.M.P. Ce résultat est prévisible car le germanium a une structure expérimentale assez particulière avec un épaulement à droite du premier pic de la fonction d'interférence.

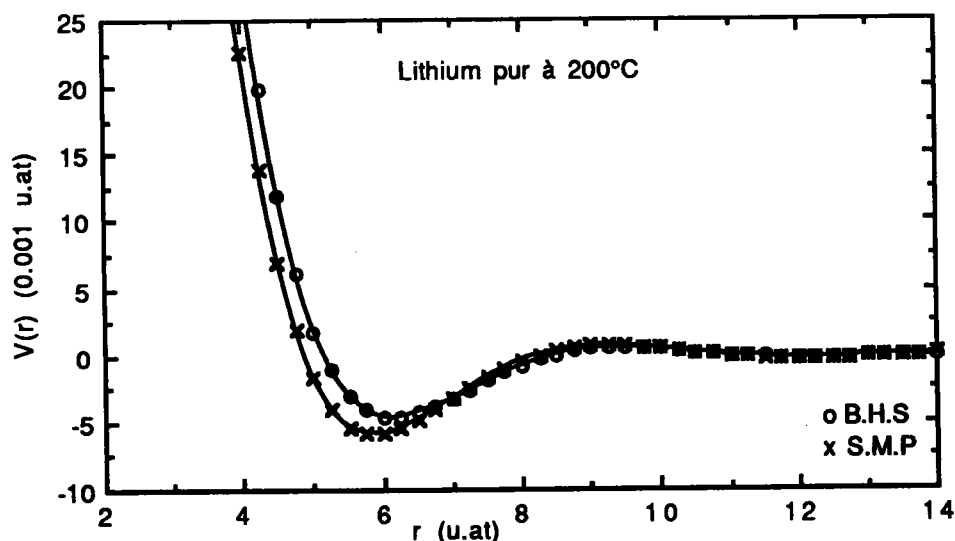
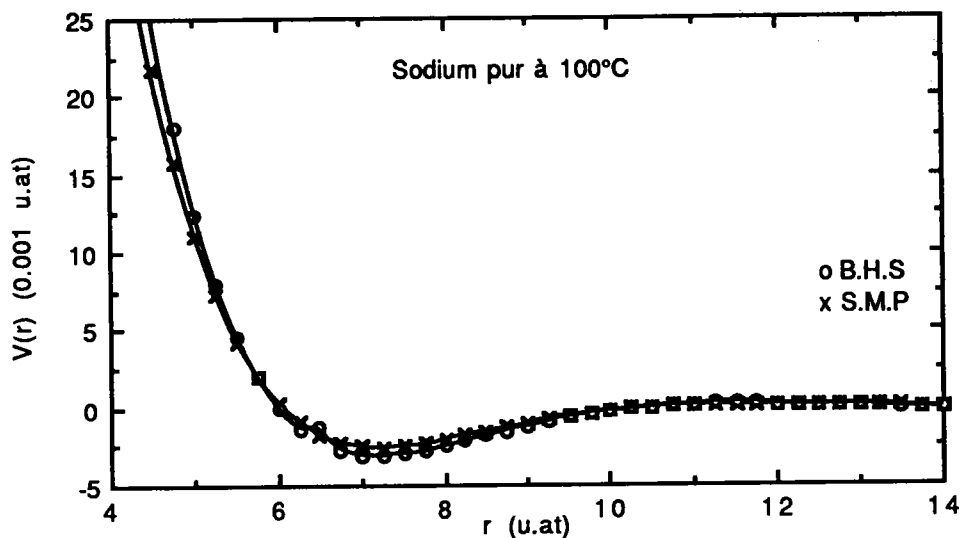
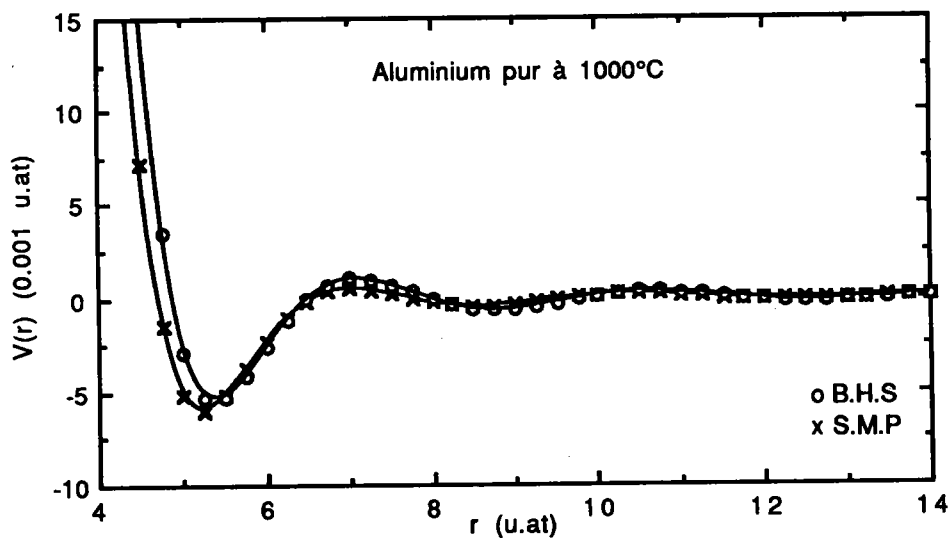
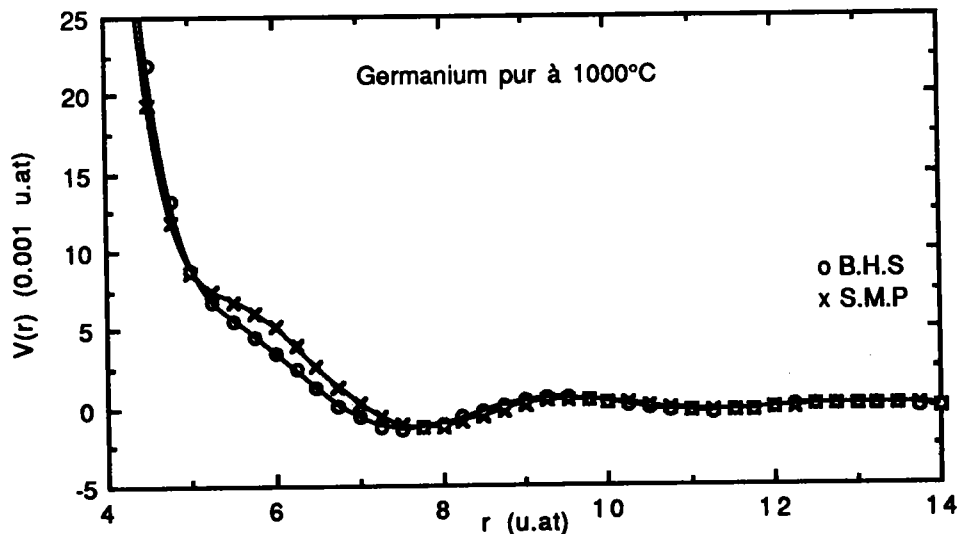


Fig. 5-1 Potentiels effectifs de Li liquide pur avec \mathcal{E}_{VS} .

Fig. 5-2 Potentiels effectifs de Na liquide pur avec ϵ_{VS} .Fig. 5-3 Potentiels effectifs de Al liquide pur avec ϵ_{VS} .Fig. 5-4 Potentiels effectifs de Ge liquide pur avec ϵ_{VS} .

V - 3 - EFFETS DE LA FONCTION DIELECTRIQUE SUR LE POTENTIEL EFFECTIF

La fonction diélectrique influe d'une manière assez importante sur le potentiel effectif. Plusieurs auteurs, comme BRETONNET et REGNAUT [65] se sont intéressés à ce problème et ont étudié les changements qui interviennent sur le potentiel effectif.

Nous avons tracé les potentiels effectifs pour le germanium et l'aluminium purs avec les deux modèles et en utilisant trois fonctions diélectriques différentes : ϵ_{VS} [27], ϵ_{IU} [30] et ϵ_{STLS} [29]. (voir fig. (5-5), (5-6), (5-7), et (5-8)).

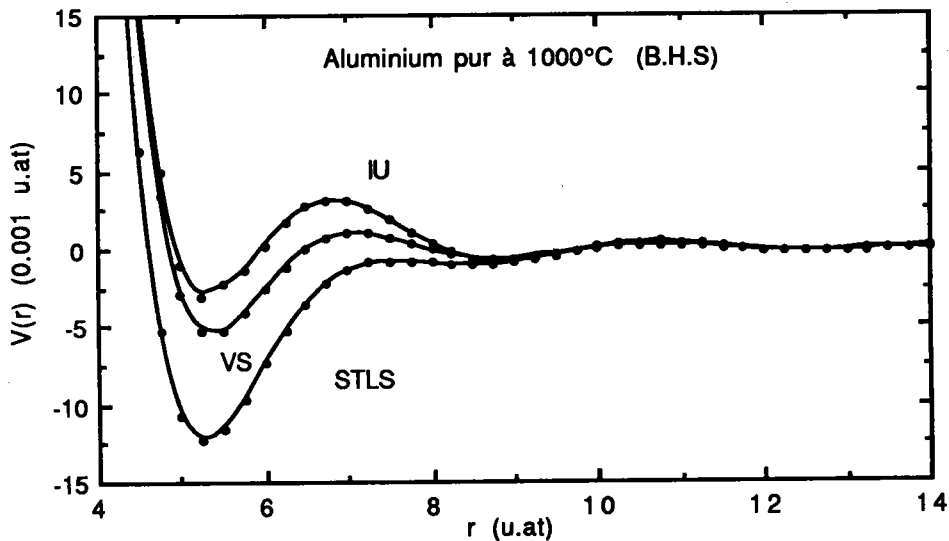


Fig. 5-5 Potentiels effectifs de Al liquide pur avec ϵ_{VS} , ϵ_{IU} et ϵ_{STLS} .

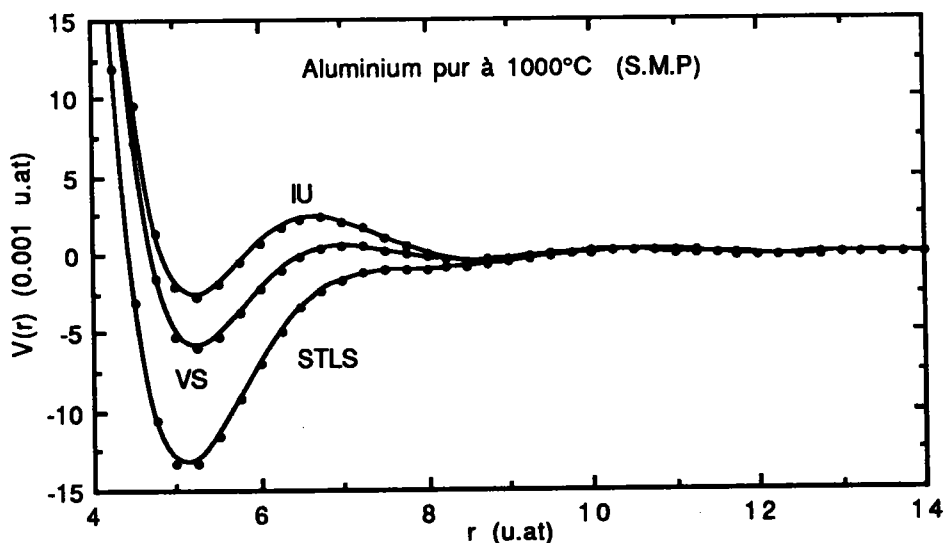


Fig. 5-6 Potentiels effectifs de Al liquide pur avec ϵ_{VS} , ϵ_{IU} et ϵ_{STLS} .

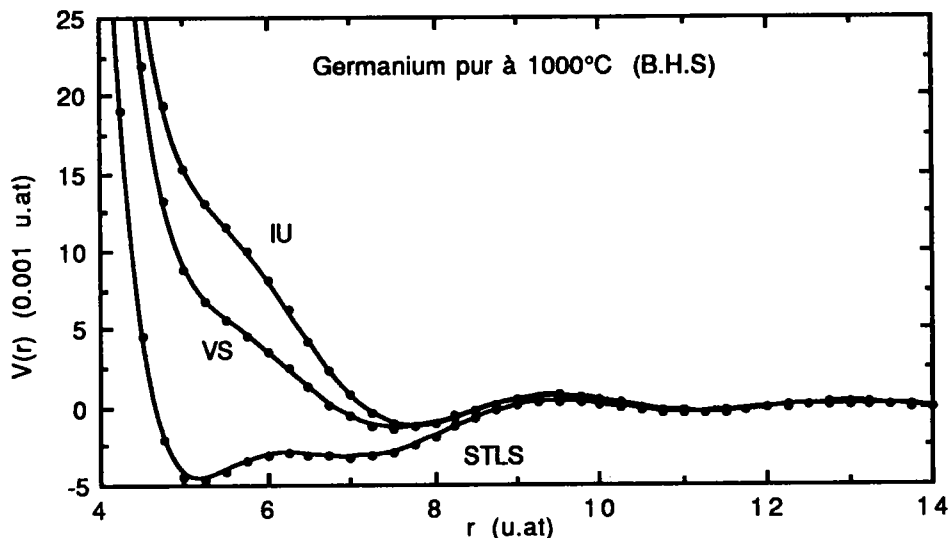


Fig. 5-7 Potentiels effectifs de Ge liquide pur avec ϵ_{VS} , ϵ_{IU} et ϵ_{STLS} .

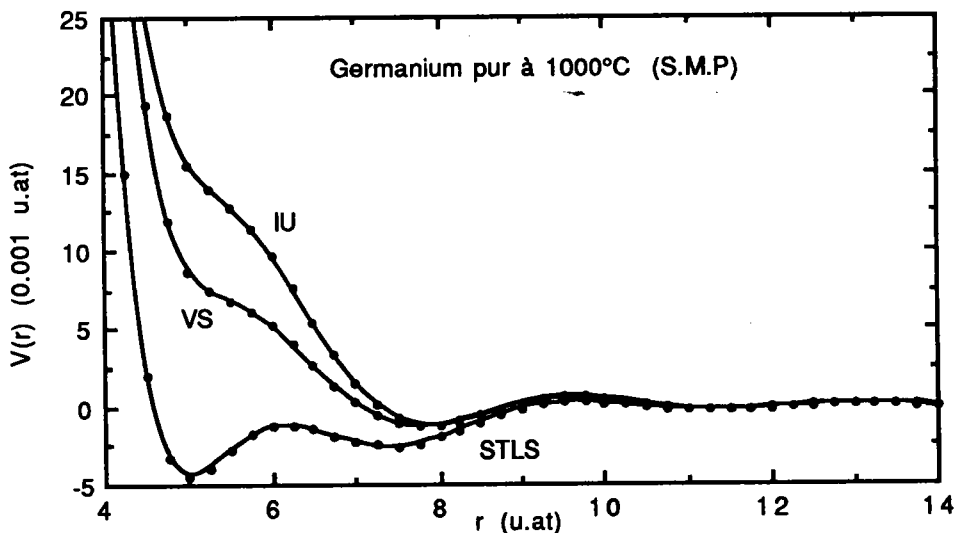


Fig. 5-8 Potentiels effectifs de Ge liquide pur avec ϵ_{VS} , ϵ_{IU} et ϵ_{STLS} .

Pour le germanium et l'aluminium, avec le B.H.S ainsi que le S.M.P, on constate une différence remarquable du potentiel effectif quand on change de fonction diélectrique. Notons que la fonction diélectrique de S.T.L.S donne un potentiel effectif assez profond pour les valeurs de r qui ne sont pas trop élevées.

Nous pouvons voir comme au paragraphe précédent, que le potentiel effectif de B.H.S est comparable à celui du S.M.P pour un même élément et avec la même fonction diélectrique.

On peut aussi noter la présence d'un épaulement pour le germanium avec ϵ_{VS} , et ϵ_{IU} .

REGNAUT et BRETONNET [66] ont déterminé le potentiel effectif du germanium à partir du modèle de SHAW et avec ϵ_{10} . Leurs résultats sont proches des nôtres. Ils ont déterminé la structure du germanium liquide et ont trouvé une bonne concordance avec l'expérience.

V - 4 - LE POTENTIEL EFFECTIF DANS LES ALLIAGES

Les relations (5-2-1) et (5-2-2) sont valables pour les corps purs. Dans le cas des alliages et pour un modèle de pseudopotentiel dépendant de l'énergie, le facteur de forme doit être recalculé avec les paramètres du modèle pris à l'énergie de FERMI de l'alliage.

Pour un alliage binaire, nous avons besoin de trois caractéristiques énergie-vecteur de transfert partielles F_{NAA} , F_{NBB} et F_{NAB} . A et B sont les constituants de l'alliage. Les deux premiers termes peuvent être calculés avec la formule (5-2-2) en prenant Ω_0 , Z et le rayon de la sphère de FERMI k_F de l'alliage. Notons que Ω_0 , Z et k_F interviennent dans le facteur de forme. Pour déterminer le terme F_{NAB} , nous devons remplacer le carré du facteur de forme dans (5-2-2) par le produit des facteurs de forme des corps A et B dans l'alliage.

Nous pouvons maintenant définir les potentiels effectifs partiels V_{AA} , V_{BB} et V_{AB} .

$$V_{AA}(r) = \frac{(Z_A)^2}{r} \left(1 - \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} F_{NAA}(q) \frac{\sin qr}{q} dq \right) \quad (5-4-1)$$

$$V_{BB}(r) = \frac{(Z_B)^2}{r} \left(1 - \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} F_{NBB}(q) \frac{\sin qr}{q} dq \right) \quad (5-4-2)$$

$$V_{AB}(r) = \frac{Z_A Z_B}{r} \left(1 - \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} F_{NAB}(q) \frac{\sin qr}{q} dq \right) \quad (5-4-3)$$

Nous avons déterminé le potentiel effectif dans le cas de deux alliages équiatomiques : Li-Na et Ge-Al. Pour le S.M.P nous avons ignoré la dépendance en énergie des paramètres. La fonction diélectrique utilisée est celle de V-S.

En observant les résultats relatifs à l'alliage Ge-Al avec le B.H.S (Fig. 5-9), on remarque que le potentiel effectif qui décrit les interactions

entre les ions du germanium présente un épaulement. Les deux autres courbes qui reproduisent les interactions Ge-Al et Al-Al ressemblent à celles obtenues pour l'aluminium pur avec des minimums moins profonds.

Sur la figure (5-10), nous avons reporté les résultats des potentiels effectifs de l'alliage Ge-Al avec le S.M.P. La courbe relative aux interactions entre ions du germanium présente un minimum très accentué et l'épaulement a disparu. Pour les interactions Ge-Al et Al-Al, on note les mêmes constatations qu'avec le B.H.S.

Les potentiels effectifs du lithium et sodium purs n'ont pas de forme particulière. Les résultats que nous avons obtenu pour l'alliage Li-Na sont regroupés sur les figures (5-11) et (5-12). Avec les deux modèles, les potentiels effectifs de l'alliage sont comparables à ceux des corps purs.

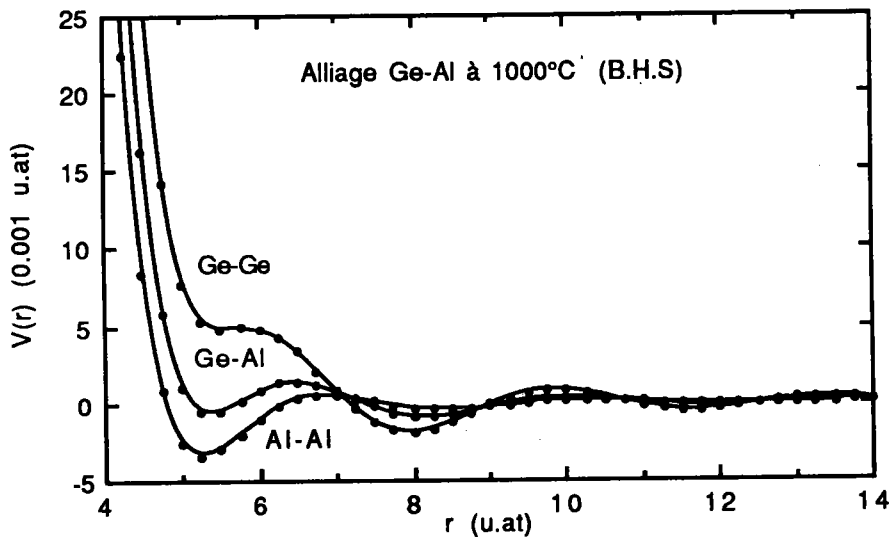


Fig. 5-9 Potentiels effectifs de l'alliage équiatomique Ge-Al avec ϵ_{VS} .

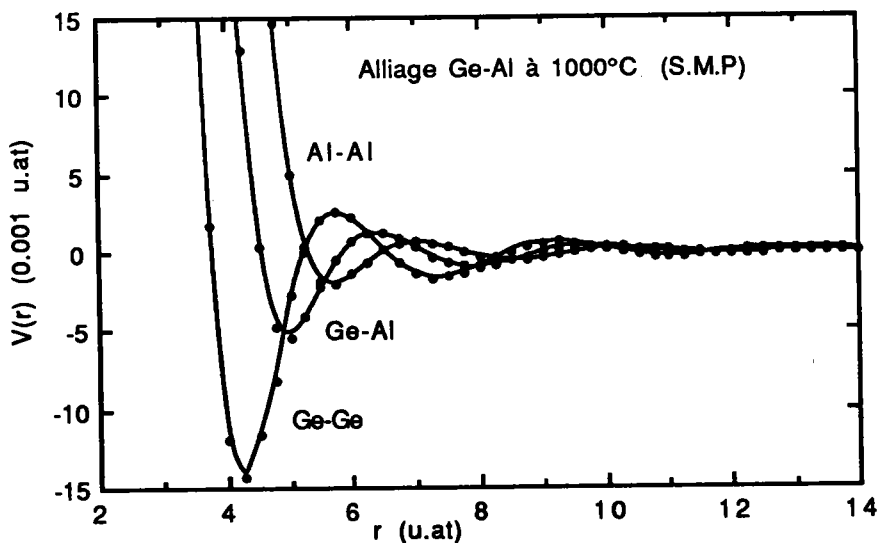


Fig. 5-10 Potentiels effectifs de l'alliage équiatomique Ge-Al avec ϵ_{VS} .

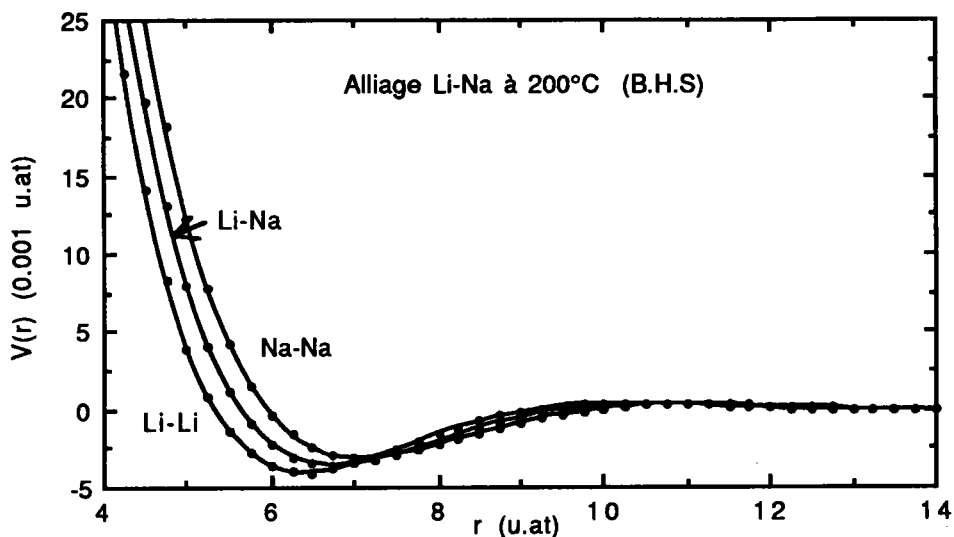


Fig. 5-11 Potentiels effectifs de l'alliage équiatomique Li-Na avec ϵ_{VS} .

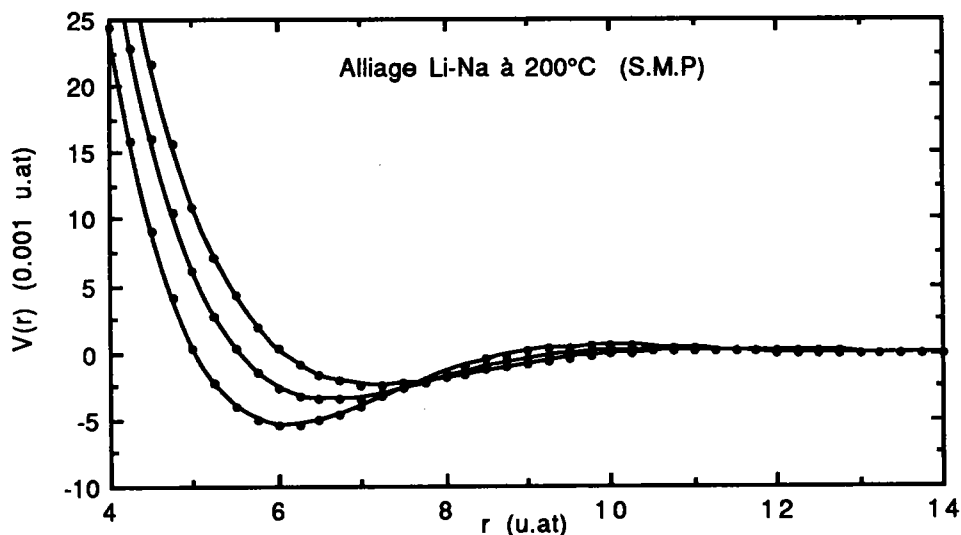


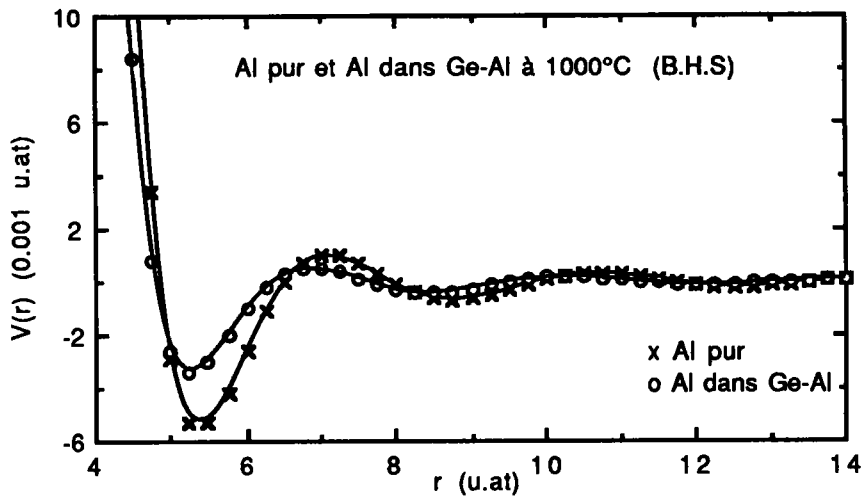
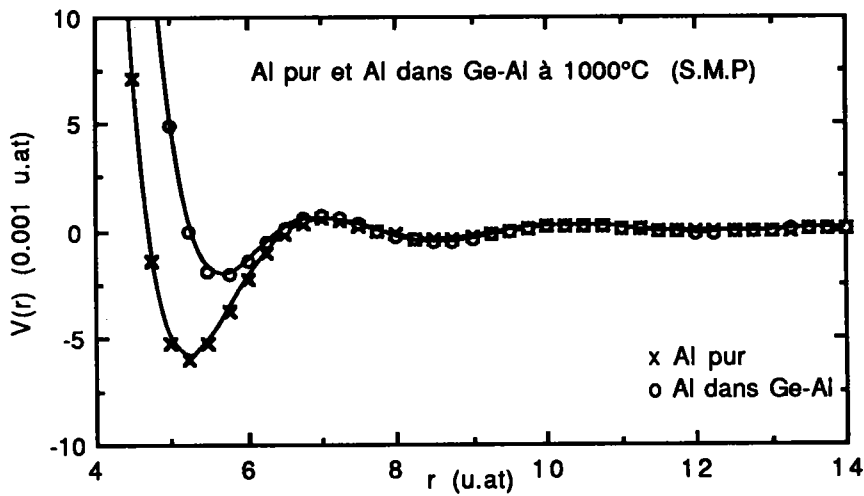
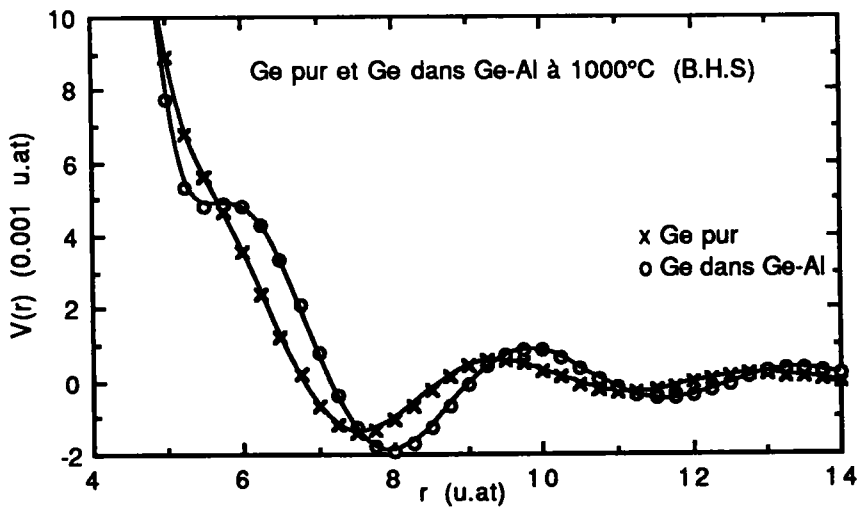
Fig. 5-12 Potentiels effectifs de l'alliage équiatomique Li-Na avec ϵ_{VS} .

V - 5 - EFFET D'ALLIAGE SUR LE POTENTIEL EFFECTIF

Dans cette partie, on va comparer deux types d'interaction, entre deux ions de même nature. La première entre les ions dans le corps pur et la seconde entre les ions dans l'alliage.

Pour l'aluminium (fig. (5-13) et (5-14)), les interactions entre les ions dans le corps pur et celles dans l'alliage ont la même allure, avec un léger écart du premier minimum pour les deux modèles.

Pour le germanium (fig. (5-15) et (5-16)), une différence importante apparaît entre les résultats déduits des deux modèles. L'épaule devient plus importante dans l'alliage avec le B.H.S et il disparaît avec le S.M.P en donnant un minimum assez profond.

Fig. 5-13 Potentiels effectifs de Al pur et de Al dans Ge-Al avec ϵ_{VS} .Fig. 5-14 Potentiels effectifs de Al pur et de Al dans Ge-Al avec ϵ_{VS} .Fig. 5-15 Potentiels effectifs de Ge pur et de Ge dans Ge-Al avec ϵ_{VS} .

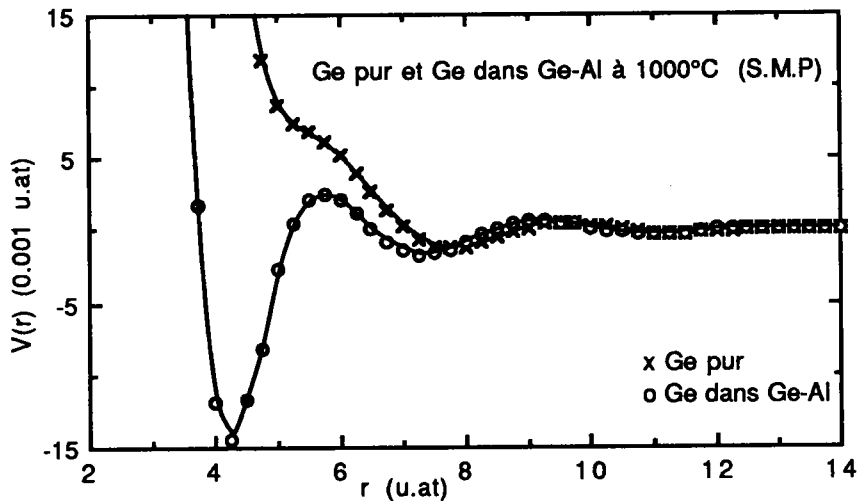


Fig. 5-16 Potentiels effectifs de Ge pur et de Ge dans Ge-Al avec ϵ_{VS} .

V - 6 - CONCLUSION

Nous avons déterminé les potentiels effectifs de quelques métaux et alliages liquides avec le modèle de pseudopotential de B.H.S et le S.M.P. Nos résultats relatifs au système Ge-Al (corps purs et alliage) paraîtront dans le journal "of Non-Cristalline Solids" [69]. Pour ces deux modèles, les potentiels effectifs qu'on a obtenus sont comparables excepté pour l'alliage Ge-Al. A notre avis, les différences observées sont dues à la forme particulière de la structure expérimentale du germanium, qui devrait être mieux décrite par le modèle de B.H.S. Ce modèle nous a permis de mettre en évidence la structure assez particulière du germanium liquide. En effet, dans la théorie de l'état liquide, le potentiel effectif et le facteur de structure (ou fonction d'interférence $a(q)$) sont étroitement liés. Cependant, les singularités de $a(q)$ sont une conséquence directe du caractère des potentiels effectifs. Un élément comme le germanium ne pourrait pas être bien décrit avec un modèle de sphères dures, qui conviendrait mieux à l'étude du lithium, du sodium et de l'aluminium. Enfin, on peut dire que la théorie des pseudopotentiels a un intérêt considérable dans le calcul des propriétés structurales des métaux liquides.

CONCLUSION

Dans ce travail nous avons présenté une étude de quelques propriétés de métaux et alliages liquides en se basant sur la théorie des modèles de pseudopotentiels.

Nous avons choisi le modèle de B.H.S [1] vu ses propriétés originales et ce qu'il apporte en plus par rapport à d'autres modèles. La non dépendance en énergie des paramètres de ce modèle nous a paru un atout important pour étendre son utilisation aux cas des alliages.

Nous avons réussi à trouver des expressions analytiques du facteur de forme qui est la transformée de Fourier du modèle de pseudopotentiel.

Dans une première étape, nous avons réalisé l'écrantage du facteur de forme. On a pu constater que les résultats obtenus avec l'écrantage local coïncident avec ceux déduits de l'écrantage non local. Nous avons aussi comparé les facteurs de forme obtenus par deux approches différentes (H-A et SHAW). Les deux méthodes ont donné les mêmes résultats.

Ces constatations nous permettent de conclure qu'il est inutile d'effectuer des calculs d'écrantage non local, qui ne peuvent être réalisés que numériquement et que l'on peut adopter l'approche de H-A qui est plus simple de point de vue calcul que celle de SHAW.

Dans une seconde étape, nous avons déterminé les facteurs de forme pour 25 éléments à l'état liquide, que nous avons comparé à ceux qu'on a obtenus à partir du modèle de H-A à écrantage local (S.M.P [2]). Pour la plupart des éléments, les facteurs de forme déduits des deux modèles sont comparables dans la région où $0 \leq q \leq 2k_F$.

La résistivité de 22 métaux liquides purs ainsi que la résistivité et le pouvoir thermoélectrique absolu de l'alliage liquide Ga-Ge ont pu être déterminés avec le modèle de B.H.S et le S.M.P, grâce à la théorie de ZIMAN [3] et de FABER-ZIMAN [41].

Pour les corps purs, les résultats théoriques des résistivités obtenus avec les deux modèles sont voisins, à l'exception de quatre éléments : le barium, le calcium, le césium et le thallium. On a observé des

différences assez importantes entre les résultats théoriques, qui proviennent de l'écart entre les facteurs de forme de B.H.S et du S.M.P dans le région où $0 \leq q \leq 2k_F$.

En comparant les résistivités calculées des corps purs à l'expérience, nous avons pu voir que les résultats sont assez satisfaisants pour la plupart des éléments étudiés.

En ce qui concerne l'alliage Ga-Ge, les deux modèles décrivent assez bien la résistivité ainsi que le pouvoir thermoélectrique absolu.

Le pseudopotentiel de B.H.S est assez fort pour certains éléments comme le barium et le calcium dans la région du cœur ionique [1]. Cependant, nous pensons que pour ces métaux l'approximation de BORN (chap. 1) n'est pas utilisable. Dans le calcul des propriétés électroniques, il serait préférable de remplacer le facteur de forme par l'élément de la matrice t (MESSIAH [71]) calculé à partir des déphasages. Ces déphasages sont obtenus à partir de potentiels en "muffin-tin".

Au cours de cette étude, nous avons calculé les potentiels effectifs à partir du modèle de pseudopotentiel de B.H.S et du S.M.P.

Le potentiel effectif $V(r)$ est relié à la fonction d'interférence $a(q)$, qui décrit la structure dans la théorie des liquides et dont les particularités sont une conséquence directe de $V(r)$. Cependant, pour tester $V(r)$ il faut déterminer $a(q)$.

Dans notre travail, nous n'avons pas eu l'occasion de réaliser des calculs de structure à partir des potentiels effectifs que nous avons obtenus. Nous souhaitons poursuivre cette étude, dans le but de déterminer théoriquement la structure des métaux liquides qui évitera le passage par les mesures expérimentales dont les difficultés sont nombreuses (techniques de substitution isotopique).

ANNEXE A

CALCUL DU FACTEUR DE FORME ANALYTIQUE A PARTIR DU
MODELE DE PSEUDOPOTENTIEL DE B.H.SI - PARTIE LOCALE

$$\begin{aligned}
 V_1(q) &= N \langle \bar{k} + \bar{q} | V_C(r) + \Delta V_{l_0}(r) | \bar{k} \rangle \\
 &= N \langle \bar{k} + \bar{q} | V_C(r) | \bar{k} \rangle + N \langle \bar{k} + \bar{q} | \Delta V_{l_0}(r) | \bar{k} \rangle
 \end{aligned}$$

On pose: $A = N \langle \bar{k} + \bar{q} | V_C(r) | \bar{k} \rangle = V_2(q)$

et $B = N \langle \bar{k} + \bar{q} | \Delta V_{l_0}(r) | \bar{k} \rangle$

avec $V_C(r) = -\frac{Zv}{r} \sum_{i=1}^2 (C_i^c \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha_i^c} r))$

et $\Delta V_{l_0}(r) = \sum_{i=1}^3 (A_i(l_0) + r^2 A_{i+3}(l_0)) \exp(-\alpha_i(l_0) r^2)$

I - 1 - Calcul de A

$$\begin{aligned}
 A = N \langle \bar{k} + \bar{q} | V_C(r) | \bar{k} \rangle &= \frac{N}{\Omega} \int \exp(-i(\bar{k} + \bar{q}) \cdot \vec{r}) V_C(r) \exp(i\bar{k} \cdot \vec{r}) d^3r \\
 &= \frac{1}{\Omega_0} \int \exp(-i\bar{q} \cdot \vec{r}) V_C(r) d^3r
 \end{aligned}$$

Ici "i" est le nombre complexe telque: $i^2 = -1$. En passant en coordonnées sphériques on peut écrire :

$$d^3r = r^2 \sin \alpha dr d\alpha d\varphi$$

$$\bar{q} \cdot \vec{r} = q r \cos \alpha$$

avec $0 \leq \alpha \leq \Pi$; $0 \leq \varphi \leq 2\Pi$ et $0 \leq r < \infty$

On obtient :

$$A = \frac{1}{\Omega_0} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^2 V_C(r) dr \int_0^\pi \exp(-i q r \cos \alpha) \sin \alpha d\alpha$$

$$= \frac{2\pi}{i q \Omega_0} \int_0^\infty r V_C(r) (\exp(iqr) - \exp(-iqr)) dr$$

Si on remplace V_C par sa valeur, A devient :

$$A = \frac{2\pi Z v}{i q \Omega_0} \int_0^\infty (C_1^c \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha_1^c} r) + C_2^c \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha_2^c} r)) (\exp(iqr) - \exp(-iqr)) dr$$

Pour simplifier le calcul de l'intégrale, on la multiplie par le facteur $\exp(-\beta r)$ ou β est un réel positif très petit (c'est une astuce de calcul qui ne change rien au résultat). On obtient :

$$A = \frac{2\pi Z v}{i q \Omega_0} \int_0^\infty [C_1^c \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha_1^c} r) + C_2^c \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha_2^c} r)] [\exp(-(\beta - iqr)) - \exp(-(\beta + iqr))] dr$$

Pour poursuivre le calcul on utilise la formule suivante (ABRAMOWITZ et STEGUN [37]):

$$\int_0^\infty \exp(-at) \operatorname{erf}(bt) dt = \frac{1}{a} \exp(a^2/4b^2) \operatorname{erfc}\left(\frac{a}{2b}\right) \quad (\text{A-1-1})$$

(réel $a > 0$ et $|\arg b| < \pi/4$)

erfc est la fonction erreur complémentaire: $\operatorname{erfc}(z) + \operatorname{erf}(z) = 1$

On arrive à l'expression suivante :

$$A = - \frac{2\pi Z v}{i q \Omega_0} \left[C_1^c \left(\frac{1}{\beta - iq} \exp\left(\frac{(\beta - iq)^2}{4\alpha_1^c}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{\beta - iq}{2\sqrt{\alpha_1^c}}\right) \right. \right.$$

$$\left. - \frac{1}{\beta + iq} \exp\left(\frac{(\beta + iq)^2}{4\alpha_1^c}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{\beta + iq}{2\sqrt{\alpha_1^c}}\right) \right) + C_2^c \left(\frac{1}{\beta - iq} \exp\left(\frac{(\beta - iq)^2}{4\alpha_2^c}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{\beta - iq}{2\sqrt{\alpha_2^c}}\right) \right.$$

$$\left. - \frac{1}{\beta + iq} \exp\left(\frac{(\beta + iq)^2}{4\alpha_2^c}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{\beta + iq}{2\sqrt{\alpha_2^c}}\right) \right]$$

Comme β est très petit on suppose que :

$$\exp\left(\frac{(\beta-iq)^2}{4\alpha_1^c}\right) \cong \exp\left(\frac{-q^2}{4\alpha_1^c}\right)$$

$$\exp\left(\frac{(\beta-iq)^2}{4\alpha_2^c}\right) \cong \exp\left(\frac{-q^2}{4\alpha_2^c}\right)$$

$$\text{et } \frac{1}{\beta \pm iq} \cong \frac{1}{\pm iq}$$

En plus $\operatorname{erf}(-z) = -\operatorname{erf}z$ donc $\operatorname{erfc}(-z) = 1 + \operatorname{erf}z$.

Finalement on obtient l'expression suivante pour A :

$$A = -\frac{4\Pi Z v}{q^2 \Omega_0} (C_1^c \exp(-q^2/4\alpha_1^c) + C_2^c \exp(-q^2/4\alpha_2^c))$$

I - 2 - Calcul de B

$$\begin{aligned} B &= N \langle \bar{k} + \bar{q} | \Delta V_{l_0}(r) | \bar{k} \rangle = \frac{N}{\Omega} \int \exp(-i(\bar{q} + \bar{k}) \cdot \bar{r}) \Delta V_{l_0}(r) \exp(i\bar{k} \cdot \bar{r}) d^3 r \\ &= \frac{1}{\Omega_0} \int \exp(-i\bar{q} \cdot \bar{r}) \Delta V_{l_0}(r) d^3 r \end{aligned}$$

On passe en coordonnées sphériques et on intègre sur ϕ et sur α (comme pour le calcul de A). B s'écrit :

$$B = \frac{4\Pi}{\Omega_0 q} \sum_{i=1}^{\infty} \int_0^{\infty} (r A_i(l_0) + r^3 A_{i+3}(l_0)) \exp(-\alpha_i(l_0) r^2) \sin qr dr$$

Pour poursuivre le calcul de B, on utilise les relations suivantes (GRADSHTEYN et RYZHIK [70]) :

$$\int_0^{\infty} x \exp(-p^2 x^2) \sin ax dx = \frac{a\sqrt{\Pi}}{4p^3} \exp(-a^2/4p^2) \quad (\text{A-1-2})$$

$$\text{et } \int_0^{\infty} x^3 \exp(-p^2 x^2) \sin ax \, dx = \sqrt{\pi} \left(\frac{6ap^2 - a^3}{16p^7} \right) \exp(-a^2/4 p^2) \quad (\text{A-1-3})$$

B devient :

$$B = \frac{\pi^{3/2}}{\Omega_0} \sum_{i=1}^3 \frac{\exp(-q^2/4 \alpha_i(l_0))}{\alpha_i^{3/2}(l_0)} \left[A_i(l_0) + A_{i+3} \left(\frac{3}{2\alpha_i(l_0)} - \frac{q^2}{4\alpha_i^2(l_0)} \right) \right]$$

II - PARTIE NON LOCALE

$$f_1(\tilde{\kappa}, \tilde{\alpha}) = \frac{4\pi}{\Omega_0} \sum_{l=0}^{l_0-1} (2l+1) P_l(\cos \theta) \int_0^{\infty} r^2 \, dr j_l(k_i) j_l(k'_i) (\Delta V_l(r) - \Delta V_{l_0}(r))$$

$$f_2(\tilde{\kappa}, \tilde{\alpha}) = \frac{4\pi}{\Omega_0} \sum_{l=0}^{l_0-1} (2l+1) P_l(\cos \theta) \int_0^{\infty} r^2 \, dr j_l(k_i) j_l(k'_i) \Delta V_l(r)$$

$$\text{où } \Delta V_l(r) = (A_l + r^2 A_{l+3}) \exp(-\alpha_i r^2)$$

Les coefficients A_l , A_{l+3} et α_i sont relatifs au moment angulaire l . Les j_l sont les fonctions de Bessel sphériques et les P_l sont les polynômes de Legendre.

$$\text{on a : } P_0(x) = 1 ; P_1(x) = x ; P_2(x) = (3x^2 - 1)/2$$

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n (x^2 - 1)^n}{dx^n}$$

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x} ; j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}$$

$$j_n(x) = \frac{(2n-1)}{x} j_{n-1}(x) - j_{n-2}(x)$$

Dans le calcul de f_1 et f_2 on a besoin de deux types d'intégrales :

$$I = \int_0^{\infty} r^2 j_l(kr) j_l(k'r) \exp(-\alpha_i r^2) \, dr$$

$$\text{et } J = \int_0^{\infty} r^4 j_l(kr) j_l(k'r) \exp(-\alpha_i r^2) dr$$

D'après la publication de BHS [1] l_0 ne dépasse pas 3. Donc pour f_1 on doit résoudre les intégrales pour $l = 0, 1, 2$ et pour f_2 on doit les résoudre pour $l = 0, 1, 2, 3$. Cependant, deux cas peuvent se présenter dans le calcul du facteur de forme non local. Soit $k = k'$ ou bien $k \neq k'$. Dans ce qui suit on pose :

$$l_0 = l (l = 0) ; l_1 = l (l = 1) ; l_2 = l (l = 2) ; l_3 = l (l = 3) ;$$

$$\text{et } J_0 = J (l = 0) ; J_1 = J (l = 1) ; J_2 = J (l = 2) ; J_3 = J (l = 3).$$

II - 1 - Cas où $k \neq k'$

II-1-1 Calcul de l_0

$$l_0 = \int_0^{\infty} r^2 j_0(kr) j_0(k'r) \exp(-\alpha_i r^2) dr$$

Si on remplace j_0 par son expression on obtient :

$$l_0 = \frac{1}{kk'} \int_0^{\infty} \sin kr \sin k'r \exp(-\alpha_i r^2) dr$$

En utilisant la relation suivante (G et R [70]) l_0 devient :

$$\int_0^{\infty} \exp(-\beta x^2) \sin ax \sin bx dx = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \left(\exp\left(-\frac{(a-b)^2}{4\beta}\right) - \exp\left(-\frac{(a+b)^2}{4\beta}\right) \right) \quad (\text{A-2-1})$$

avec: $(a > 0 ; b > 0 ; \text{Réel } \beta > 0)$

$$l_0 = \frac{1}{4kk'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i}} \left(\exp\left(-\frac{(k-k')^2}{4\alpha_i}\right) - \exp\left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i}\right) \right) \quad (\text{A-2-2})$$

II-1-2 Calcul de l_1

$$l_1 = \int_0^{\infty} r^2 j_1(kr) j_1(k'r) \exp(-\alpha_i r^2) dr$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{k^2 k'^2} \int_0^\infty \frac{\sin kr \sin k'r}{r^2} \exp(-\alpha_i r^2) dr - \frac{1}{k^2 k'} \int_0^\infty \frac{\sin kr \cos k'r}{r} \exp(-\alpha_i r^2) dr \\
&- \frac{1}{k'^2 k} \int_0^\infty \frac{\sin k'r \cos kr}{r} \exp(-\alpha_i r^2) dr + \frac{1}{kk'} \int_0^\infty \cos kr \cos k'r \exp(-\alpha_i r^2) dr
\end{aligned} \tag{A-2-3}$$

On a ainsi divisé I_1 en 4 intégrales. Si on intègre la première partie, elle donne :

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{k^2 k'^2} \int_0^\infty \frac{\sin kr \sin k'r}{r^2} \exp(-\alpha_i r^2) dr = - \lim \left[\frac{\sin kr \sin k'r}{k^2 k'^2 r} \exp(-\alpha_i r^2) \right]_0^\infty \\
&- \frac{2\alpha_i}{k^2 k'^2} \int_0^\infty \sin kr \sin k'r \exp(-\alpha_i r^2) dr + \frac{1}{k^2 k'} \int_0^\infty \frac{\sin kr \cos k'r}{r} \exp(-\alpha_i r^2) dr \\
&+ \frac{1}{k'^2 k^2} \int_0^\infty \frac{\sin k'r \cos kr}{r} \exp(-\alpha_i r^2) dr
\end{aligned} \tag{A-2-4}$$

Dans (A-2-4) la limite tend vers zéro et les deux derniers termes compensent le deuxième et le troisième terme de (A-2-3). On en arrive à :

$$I_1 = - \frac{2\alpha_i}{k^2 k'^2} \int_0^\infty \sin kr \sin k'r \exp(-\alpha_i r^2) dr + \frac{1}{k k'} \int_0^\infty \cos kr \cos k'r \exp(-\alpha_i r^2) dr$$

En utilisant (A-2-1) et la relation suivante (G et R [70]) :

$$\int_0^\infty \exp(-\beta x^2) \cos ax \cos bx dx = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \left(\exp\left(-\frac{(a-b)^2}{4\beta}\right) + \exp\left(-\frac{(a+b)^2}{4\beta}\right) \right) \tag{A-2-5}$$

avec : (Réel $(b) > 0$)

I_1 s'écrit finalement :

$$\begin{aligned}
I_1 = & - \frac{\sqrt{\pi \alpha_i}}{2k^2 k'^2} \left(\exp\left(-\frac{(k-k')^2}{4\alpha_i}\right) - \exp\left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i}\right) \right) \\
& + \frac{1}{4kk'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i}} \left(\exp\left(-\frac{(k-k')^2}{4\alpha_i}\right) + \exp\left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i}\right) \right)
\end{aligned} \tag{A-2-6}$$

II-1-3 Calcul de I_2

$$I_2 = \int_0^{\infty} r^2 j_2(kr) j_2(k'r) \exp(-\alpha_i r^2) dr$$

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{9}{k^3 k'^3} \int_0^{\infty} \frac{\sin kr \sin k'r}{r^4} \exp(-\alpha_i r^2) dr - \frac{9}{k^3 k'^2} \int_0^{\infty} \frac{\cos kr \sin k'r}{r^3} \exp(-\alpha_i r^2) dr \\ &- \frac{9}{k'^3 k^2} \int_0^{\infty} \frac{\cos kr \sin k'r}{r^3} \exp(-\alpha_i r^2) dr - \frac{3}{kk'} \left(\frac{1}{k^2} + \frac{1}{k'^2} \right) \int_0^{\infty} \frac{\sin kr \sin k'r}{r^2} \exp(-\alpha_i r^2) dr \\ &+ \frac{9}{k^2 k'^2} \int_0^{\infty} \frac{\cos kr \cos k'r}{r^2} \exp(-\alpha_i r^2) dr + \frac{3}{kk'^2} \int_0^{\infty} \frac{\cos k'r \sin kr}{r} \exp(-\alpha_i r^2) dr \\ &+ \frac{3}{k'k^2} \int_0^{\infty} \frac{\cos kr \sin k'r}{r} \exp(-\alpha_i r^2) dr + \frac{1}{kk'} \int_0^{\infty} \sin kr \sin k'r \exp(-\alpha_i r^2) dr \end{aligned} \quad (\text{A-2-7})$$

L'expression de I_2 est assez complexe vu le nombre d'intégrales qu'elle contient. Pour trouver une solution analytique, on procède de la même manière qu'au (II-1-2). On pose :

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{9}{k^3 k'^3} A - \frac{9}{k^3 k'^2} B - \frac{9}{k'^3 k^2} B' - \frac{3}{kk'} \left(\frac{1}{k^2} + \frac{1}{k'^2} \right) C + \frac{9}{k^2 k'^2} D \\ &+ \frac{3}{kk'^2} E + \frac{3}{k^2 k'} E' + \frac{1}{kk'} F \end{aligned} \quad (\text{A-2-8})$$

On intègre A par parties, on obtient :

$$A = L_1 + \frac{k'}{3} B + \frac{k}{3} B' - \frac{2\alpha_i}{3} C \quad (\text{A-2-9})$$

$$\text{où } L_1 = \lim_{r \rightarrow 0} \left[\frac{\sin kr \sin k'r}{3r^3} \exp(-\alpha_i r^2) \right] \quad (\text{A-2-10})$$

(On fera des intégrations par parties successives et on regroupera les limites à la fin du calcul). I_2 devient alors :

$$I_2 = \frac{9}{k^3 k'^3} L_1 - \frac{6}{k^3 k'^2} B - \frac{6}{k^2 k'^3} B' - \frac{3}{k k'} \left[\frac{1}{k^2} + \frac{1}{k'^2} + \frac{2 \alpha_i}{k^2 k'^2} \right] C$$

$$+ \frac{9}{k^2 k'^2} D + \frac{3}{k k'^2} E + \frac{3}{k' k^2} E' + \frac{1}{k k'} F \quad (\text{A-2-11})$$

On intègre B et B' par parties.

$$B = L_2 + \frac{k}{2} D - \frac{k'}{2} C - \alpha_i E \quad (\text{A-2-12})$$

$$B' = L'_2 + \frac{k'}{2} D - \frac{k}{2} C - \alpha_i E' \quad (\text{A-2-13})$$

avec $L_2 = \lim_{r \rightarrow 0} \left[\frac{\sin kr \cos k'r}{2r^2} \exp(-\alpha_i r^2) \right]$ (A-2-14)

$$L'_2 = \lim_{r \rightarrow 0} \left[\frac{\sin k'r \cos kr}{2r^2} \exp(-\alpha_i r^2) \right] \quad (\text{A-2-15})$$

Dans (A-2-11) on remplace B par (A-2-12) et B' par (A-2-13), on en arrive à :

$$I_2 = \frac{3}{k^2 k'^2} \left[\frac{3L_1}{k k'} - \frac{2L_2}{k} - \frac{2L'_2}{k'} \right] - \frac{6 \alpha_i}{k^3 k'^3} C + \frac{3}{k^2 k'^2} D$$

$$+ \frac{3}{k k'^2} \left[1 + \frac{2 \alpha_i}{k^2} \right] E + \frac{3}{k' k^2} \left[1 + \frac{2 \alpha_i}{k'^2} \right] E' + \frac{F}{k k'} \quad (\text{A-2-16})$$

C a été intégrée par parties dans (II - 1 - 2). On a trouvé :

$$C = -2 \alpha_i F + k' E + k E' \quad (\text{A-2-17})$$

(A-2-16) devient alors :

$$I_2 = \frac{3}{k^2 k'^2} \left[\frac{3L_1}{k k'} - \frac{2L_2}{k} - \frac{2L'_2}{k'} \right] + \frac{3D}{k^2 k'^2} + \frac{3E}{k k'^2} + \frac{3E'}{k' k^2} + \frac{1}{k k'} \left[1 + \frac{12 \alpha_i^2}{k^2 k'^2} \right] F$$

(A-2-18)

On intègre maintenant D par parties :

$$D = L_3 - kE - k'E' - 2 \alpha_i G \quad (\text{A-2-19})$$

$$\text{avec } L_3 = \lim_{r \rightarrow 0} \left[\frac{\cos kr \cos k'r}{r} \exp(-\alpha_i r^2) \right] \quad (\text{A-2-20})$$

$$\text{et } G = \int_0^{\infty} \cos kr \cos k'r \exp(-\alpha_i r^2) dr \quad (\text{A-2-21})$$

D'où I_2 se simplifie et (A-2-18) s'écrit :

$$I_2 = \frac{3}{k^2 k'^2} \left[\frac{3L_1}{kk'} - \frac{2L_2}{k} - \frac{2L'_2}{k'} + L_3 \right] + \frac{1}{kk'} \left[1 + \frac{12 \alpha_i^2}{k^2 k'^2} \right] F - \frac{6 \alpha_i}{k^2 k'^2} G \quad (\text{A-2-22})$$

Le premier terme entre crochets du second membre de (A-2-22) tend vers zéro si r tend vers zéro. I_2 se simplifie et prend la forme suivante :

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{1}{kk'} \left[1 + \frac{12 \alpha_i^2}{k^2 k'^2} \right] F - \frac{6 \alpha_i}{k^2 k'^2} G \\ &= \frac{1}{kk'} \left[1 + \frac{12 \alpha_i^2}{k^2 k'^2} \right] \int_0^{\infty} \sin kr \sin k'r \exp(-\alpha_i r^2) dr \\ &\quad - \frac{6 \alpha_i}{k^2 k'^2} \int_0^{\infty} \cos kr \cos k'r \exp(-\alpha_i r^2) dr \end{aligned} \quad (\text{A-2-23})$$

Enfin, à l'aide des relations (A-2-1) et (A-2-5), l'expression de I_2 devient :

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{1}{4kk'} \left(1 + \frac{12 \alpha_i^2}{k^2 k'^2} \right) \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i}} \left(\exp\left(-\frac{(k-k')^2}{4\alpha_i}\right) - \exp\left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i}\right) \right) \\ &\quad - \frac{3 \alpha_i}{2k^2 k'^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i}} \left(\exp\left(-\frac{(k-k')^2}{4\alpha_i}\right) + \exp\left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i}\right) \right) \end{aligned} \quad (\text{A-2-24})$$

II-1-4 Calcul de I_3

$$I_3 = \int_0^{\infty} r^2 j_3(kr) j_3(k'r) \exp(-\alpha_i r^2) dr$$

Si on remplace j_3 par son expression on obtient :

$$\begin{aligned} I_3 = & \frac{225}{k^4 k'^4} \int_0^{\infty} \frac{\sin kr \sin k'r}{r^6} \exp(-\alpha_i r^2) dr - \frac{225}{k^4 k'^3} \int_0^{\infty} \frac{\sin kr \cos k'r}{r^5} \exp(-\alpha_i r^2) dr \\ & - \frac{225}{k^3 k'^4} \int_0^{\infty} \frac{\sin k'r \cos kr}{r^5} \exp(-\alpha_i r^2) dr - \frac{90}{k^2 k'^2} \left(\frac{1}{k^2} + \frac{1}{k'^2} \right) \int_0^{\infty} \frac{\sin kr \sin k'r}{r^4} \exp(-\alpha_i r^2) dr \\ & + \frac{225}{k^3 k'^3} \int_0^{\infty} \frac{\cos k'r \cos kr}{r^4} \exp(-\alpha_i r^2) dr + \frac{15}{kk'} \left(\frac{1}{k^3} + \frac{6}{k'k^2} \right) \int_0^{\infty} \frac{\cos kr \sin k'r}{r^3} \exp(-\alpha_i r^2) dr \\ & + \frac{15}{kk'} \left(\frac{1}{k^3} + \frac{6}{kk'^2} \right) \int_0^{\infty} \frac{\sin kr \cos k'r}{r^3} \exp(-\alpha_i r^2) dr + \frac{36}{k^2 k'^2} \int_0^{\infty} \frac{\sin kr \sin k'r}{r^2} \exp(-\alpha_i r^2) dr \\ & - \frac{15}{kk'} \left(\frac{1}{k^2} + \frac{1}{k'^2} \right) \int_0^{\infty} \frac{\cos kr \cos k'r}{r^2} \exp(-\alpha_i r^2) dr - \frac{6}{k^2 k'} \int_0^{\infty} \frac{\sin kr \cos k'r}{r} \exp(-\alpha_i r^2) dr \\ & - \frac{6}{kk'^2} \int_0^{\infty} \frac{\sin k'r \cos kr}{r} \exp(-\alpha_i r^2) dr + \frac{1}{kk'} \int_0^{\infty} \cos kr \cos k'r \exp(-\alpha_i r^2) dr \end{aligned} \quad (\text{A-2-25})$$

On procède de la même manière que pour le calcul de I_2 dans (II-1-3). On intègre par parties, on regroupe les limites, et les intégrales identiques. Nous ne développons pas les calculs, nous donnons juste le résultat final.

$$\begin{aligned} I_3 = & \frac{1}{kk'} \left(\frac{60\alpha_i^2}{k^2 k'^2} + 1 \right) \int_0^{\infty} \cos kr \cos k'r \exp(-\alpha_i r^2) dr \\ & - \frac{\alpha_i}{k^2 k'^2} \left(\frac{10\alpha_i^2}{k^2 k'^2} + 1 \right) \int_0^{\infty} \sin kr \sin k'r dr \exp(-\alpha_i r^2) dr \end{aligned} \quad (\text{A-2-26})$$

A l'aide de (A-2-1) et (A-2-5), I_3 devient :

$$I_3 = \frac{1}{4kk'} \left(\frac{60\alpha_i^2}{k^2 k'^2} + 1 \right) \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i}} \left(\exp\left(-\frac{(k-k')^2}{4\alpha_i}\right) + \exp\left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i}\right) \right)$$

$$- \frac{3\sqrt{\alpha_i \Pi}}{k^2 k'^2} \left(\frac{10\alpha_i^2}{k^2 k'^2} + 1 \right) \left(\exp \left(-\frac{(k-k')^2}{4\alpha_i} \right) - \exp \left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i} \right) \right) \quad (\text{A-2-27})$$

II-1-5 Calcul de J_0

$$\begin{aligned} J_0 &= \int_0^\infty r^4 j_0(kr) j_0(k'r) \exp(-\alpha_i r^2) dr = \frac{1}{kk'} \int_0^\infty r^2 \sin kr \sin k'r \exp(-\alpha_i r^2) dr \\ &= \frac{1}{2kk'} \int_0^\infty r^2 \cos(k-k')r \exp(-\alpha_i r^2) dr - \frac{1}{2kk'} \int_0^\infty r^2 \cos(k+k')r \exp(-\alpha_i r^2) dr \end{aligned} \quad (\text{A-2-28})$$

En utilisant la relation suivante (G et R [70]) :

$$\int_0^\infty x^2 \exp(-p^2 x^2) \cos ax dx = \sqrt{\Pi} \frac{(2p^2 - a^2)}{8p^5} \exp\left(-\frac{a^2}{4p^2}\right) \quad (\text{A-2-29})$$

On aboutit à :

$$J_0 = \frac{\sqrt{\Pi}}{16kk'\alpha_i^{5/2}} \left((2\alpha_i - (k'-k)^2) \exp\left(-\frac{(k-k')^2}{4\alpha_i}\right) - (2\alpha_i - (k'+k)^2) \exp\left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i}\right) \right) \quad (\text{A-2-30})$$

II-1-6 Calcul de J_1

$$\begin{aligned} J_1 &= \int_0^\infty r^4 j_1(kr) j_1(k'r) \exp(-\alpha_i r^2) dr \\ &= \frac{1}{k^2 k'^2} \int_0^\infty \sin kr \sin k'r \exp(-\alpha_i r^2) dr - \frac{1}{k^2 k'} \int_0^\infty r \sin kr \cos k'r \exp(-\alpha_i r^2) dr \\ &\quad - \frac{1}{kk'^2} \int_0^\infty r \sin k'r \cos kr \exp(-\alpha_i r^2) dr + \frac{1}{kk'} \int_0^\infty r^2 \cos kr \cos k'r \exp(-\alpha_i r^2) dr \end{aligned} \quad (\text{A-2-31})$$

Dans la relation (A-2-31) on peut remplacer :

$$\begin{aligned} \sin kr \cos k'r & \text{ par } \frac{1}{2} (\sin (k+k')r + \sin (k-k')r) \\ \sin k'r \cos kr & \text{ par } \frac{1}{2} (\sin (k+k')r + \sin (k'-k)r) \\ \text{et } \cos kr \cos k'r & \text{ par } \frac{1}{2} (\cos (k+k')r + \cos (k'-k)r) \end{aligned}$$

Il nous est maintenant possible d'utiliser les formules (A-1-2) et (A-2-29). On obtient finalement :

$$\begin{aligned} J_1 &= \frac{1}{4k^2 k'^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i}} \left(\exp \left(-\frac{(k'-k)^2}{4\alpha_i} \right) - \exp \left(-\frac{(k'+k)^2}{4\alpha_i} \right) \right) \\ &+ \frac{\sqrt{\pi}}{16kk'\alpha_i^{5/2}} \left((2\alpha_i - (k'+k)^2) \exp \left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i} \right) + (2\alpha_i - (k'-k)^2) \exp \left(-\frac{(k-k')^2}{4\alpha_i} \right) \right) \\ &- \frac{\sqrt{\pi}}{8kk'^2\alpha_i^{3/2}} \left((k+k') \exp \left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i} \right) + (k'-k) \exp \left(-\frac{(k'-k)^2}{4\alpha_i} \right) \right) \\ &- \frac{\sqrt{\pi}}{8k'k^2\alpha_i^{3/2}} \left((k+k') \exp \left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i} \right) + (k-k') \exp \left(-\frac{(k'-k)^2}{4\alpha_i} \right) \right) \quad (\text{A-2-32}) \end{aligned}$$

II-1-7 Calcul de J_2

$$J_2 = \int_0^{\infty} r^4 j_2(kr) j_2(k'r) \exp(-\alpha_i r^2) dr$$

On remplace j_2 par son expression, on développe les calculs et on utilise les résultats précédents. (Intégrations par parties, formules (A-1-2), (A-2-1), (A-2-5) et (A-2-9)). L'expression finale de J_2 est :

$$\begin{aligned} J_2 &= \frac{3}{4kk'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i}} \left(\exp \left(-\frac{(k-k')^2}{4\alpha_i} \right) - \exp \left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i} \right) \right) \left(-\frac{6\alpha_i}{k^2 k'^2} - \frac{1}{k'^2} - \frac{1}{k^2} \right) \\ &+ \frac{9}{4k^2 k'^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i}} \left(\exp \left(-\frac{(k'-k)^2}{4\alpha_i} \right) + \exp \left(-\frac{(k'+k)^2}{4\alpha_i} \right) \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{3\sqrt{\Pi}}{8 k' k^2 \alpha_i^{3/2}} \left((k+k') \exp \left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i} \right) - (k-k') \exp \left(-\frac{(k'-k)^2}{4\alpha_i} \right) \right) \\
& + \frac{3\sqrt{\Pi}}{8 k k'^2 \alpha_i^{3/2}} \left((k+k') \exp \left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i} \right) - (k'-k) \exp \left(-\frac{(k'-k)^2}{4\alpha_i} \right) \right) \\
& + \frac{\sqrt{\Pi}}{16 k k' \alpha_i^{5/2}} \left((2\alpha_i - (k'-k)^2) \exp \left(-\frac{(k-k')^2}{4\alpha_i} \right) - (2\alpha_i - (k'+k)^2) \exp \left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i} \right) \right)
\end{aligned} \tag{A-2-33}$$

II-1-8 Calcul de J_3

$$J_3 = \int_0^{\infty} r^4 j_3(kr) j_3(k'r) \exp(-\alpha_i r^2) dr$$

D'après les résultats précédents, on arrive à l'expression suivante pour J_3 :

$$\begin{aligned}
J_3 &= \frac{3}{2 k^2 k'^2} \sqrt{\frac{\Pi}{\alpha_i}} \left(\frac{5\alpha_i^2}{k^2 k'^2} + \frac{5\alpha_i}{k^2} + \frac{5\alpha_i}{k'^2} + 6 \right) \left(\exp \left(-\frac{(k-k')^2}{4\alpha_i} \right) - \exp \left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i} \right) \right) \\
& - \frac{15}{4 k k'} \sqrt{\frac{\Pi}{\alpha_i}} \left(\exp \left(-\frac{(k-k')^2}{4\alpha_i} \right) + \exp \left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i} \right) \right) \left(\frac{10\alpha_i}{k^2 k'^2} + \frac{1}{k'^2} + \frac{1}{k^2} \right) \\
& + \frac{\sqrt{\Pi}}{16 k k' \alpha_i^{5/2}} \left((2\alpha_i - (k'+k)^2) \exp \left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i} \right) + (2\alpha_i - (k'-k)^2) \exp \left(-\frac{(k-k')^2}{4\alpha_i} \right) \right) \\
& - \frac{3\sqrt{\Pi}}{4 k' k^2 \alpha_i^{3/2}} \left((k+k') \exp \left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i} \right) - (k'-k) \exp \left(-\frac{(k'-k)^2}{4\alpha_i} \right) \right) \\
& - \frac{3\sqrt{\Pi}}{4 k k'^2 \alpha_i^{3/2}} \left((k+k') \exp \left(-\frac{(k+k')^2}{4\alpha_i} \right) + (k'-k) \exp \left(-\frac{(k'-k)^2}{4\alpha_i} \right) \right)
\end{aligned} \tag{A-2-34}$$

II - 2 - Cas où $k = k'$

Pour le calcul des différentes intégrales dans le cas où $k = k'$, on peut procéder de la même manière qu'auparavant, c'est à dire le cas où

$k \neq k'$. On a montré que les résultats obtenus se déduisent de ceux calculés en prenant $k = k'$. On obtient des expressions plus simples.

ANNEXE B

I - Calcul du pseudopotentiel

```

C      CALCUL DU POTENTIEL DE BACHELET
C      MODIF. DU 20/10/87 POUR ERF(0)
C
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
      CHARACTER*10 DATDEB,TEMDEB,DATFIN,TEMFIN
      CHARACTER*10 KOR(2)
      DIMENSION S(6,6),Q(6,6),AL(6,4,2),C(6,2),SOM(6,6),QMOINS(6,6),
1MERKX(6),MERY(6),LMAX(2),AL1CO(2),AL2CO(2),C1COR(2),C2COR(2),
2A(6,4,2),ZV(2),LM(2)
      PI=3.141592653589793238462643D00
      KIN=3
      KTRAN=8
      KOUT=4
      KECRAN=6
      CALL ASSIGN(KTRAN,'TRANS.DAT')
      CALL ASSIGN(KIN,'LECBAC.DAT')
      CALL ASSIGN(KOUT,'ECRBAC.DAT')
      CALL DATE(DATDEB)
      CALL TIME(TEMDEB)
      DEBUT=SECNDS(0.0)
      WRITE(KOUT,2)DATDEB,TEMDEB
      WRITE(KECRAN,2)DATDEB,TEMDEB
2      FORMAT(1H0,30X,'DEBUT DU CALCUL:',2X,A10,2X,A10///)
      READ(KIN,3,END=9999)NPAS,PAS,KOD
3      FORMAT(I4,D15.8,I4)
      DO 4 I1=1,2
      READ(KIN,5)KOR(I1),LMAX(I1),C1COR(I1),C2COR(I1),AL1CO(I1),
1AL2CO(I1),ZV(I1)
      WRITE(KTRAN,7)KOR(I1),LMAX(I1),ZV(I1),C1COR(I1),C2COR(I1),
1AL1CO(I1),AL2CO(I1)
7      FORMAT(A10,I4,F8.2,F10.4,F10.4,F8.2,F8.2)
      WRITE(KOUT,6)KOR(I1),LMAX(I1),ZV(I1),C1COR(I1),C2COR(I1),
1AL1CO(I1),AL2CO(I1)
      WRITE(KECRAN,6)KOR(I1),LMAX(I1),ZV(I1),C1COR(I1),C2COR(I1),
1AL1CO(I1),AL2CO(I1)
5      FORMAT(A10,I4,2(4X,F8.4),2(4X,F6.2),F8.1)
6      FORMAT(1H0,20X,A10,15X,'LMAX=' ,I2,5X,'ZV=' ,D9.2/2X,'C1CORE=' ,
1F8.4,2X,'C2CORE=' ,F8.4,2X,'ALPHA1CORE=' ,F6.2,2X,'ALPHA2CORE='
2,F6.2)
      LM(I1)=LMAX(I1)+1
4      CONTINUE
      DO 180 I1=1,2          !*****BOUCLAGE SUR 2 CORPS
      DO 170 I2=1,LM(I1)    !*****BOUCLAGE SUR 1
      READ(KIN,10,END=9999)AL(1,I2,I1),AL(2,I2,I1),AL(3,I2,I1),
1C(1,I1),C(2,I1),C(3,I1),C(4,I1),C(5,I1),C(6,I1)
10     FORMAT(3(4X,F6.2)/3(4X,F8.4)/3(4X,F8.4))
      AL(4,I2,I1)=AL(1,I2,I1)
      AL(5,I2,I1)=AL(2,I2,I1)
      AL(6,I2,I1)=AL(3,I2,I1)
      WRITE(KOUT,20)KOR(I1),(I2-1),AL(1,I2,I1),AL(2,I2,I1),AL(3,I2,I1)
1,AL(4,I2,I1),AL(5,I2,I1),AL(6,I2,I1),C(1,I1),C(2,I1),
2C(3,I1),C(4,I1),C(5,I1),C(6,I1)
      WRITE(KECRAN,20)KOR(I1),(I2-1),AL(1,I2,I1),AL(2,I2,I1),
1AL(3,I2,I1),AL(4,I2,I1),AL(5,I2,I1),AL(6,I2,I1),C(1,I1),C(2,I1),

```

```

2C(3,I1),C(4,I1),C(5,I1),C(6,I1)
20  FORMAT(1H0,20X,'CALCUL DU POTENTIEL DE BACHELET POUR LE',A10,
1/4X,'L=',I4,2X,'AL(1)=' ,F6.2,1X,'AL(2)=' ,F6.2,1X,'AL(3)=' ,F6.2,
21X,'AL(4)=' ,F6.2,1X,'AL(5)=' ,F6.2,1X,'AL(6)=' ,F6.2/
32X,'C(1)=' ,F8.4,1X,'C(2)=' ,F8.4,1X,'C(3)=' ,F8.4,1X,
4'C(4)=' ,F8.4,1X,'C(5)=' ,F8.4,1X,'C(6)=' ,F8.4/)
WRITE(KTRAN,21)AL(1,I2,I1),AL(2,I2,I1),AL(3,I2,I1),
1AL(4,I2,I1),AL(5,I2,I1),AL(6,I2,I1)
21  FORMAT(6(F8.2))
DO 40 I=1,6
DO 30 J=1,6
IF(I .LT. 4 .AND. J .LT. 4)GO TO 23
IF(I .GT. 3 .AND. J .GT. 3)GO TO 24
S(I,J)=3.D0/8.D0*DSQRT(PI/(AL(I,I2,I1)+AL(J,I2,I1))**5)
GO TO 25
23  S(I,J)=.25D0*DSQRT(PI/(AL(I,I2,I1)+AL(J,I2,I1))**3)
GO TO 25
24  S(I,J)=15.D0/16.D0*DSQRT(PI/(AL(I,I2,I1)+AL(J,I2,I1))**7)
25  CONTINUE
IF(KOD.EQ.1)GO TO 30
WRITE (KOUT,26)I,J,S(I,J)
WRITE (KECRAN,26)I,J,S(I,J)
26  FORMAT(5X,'I=' ,I4,5X,'J=' ,I4,5X,'S(I,J)=' ,D23.17)
30  CONTINUE
40  CONTINUE
DO 70 I=1,6
DO 65 L=1,6
IF(I-L)53,56,58
53  SOM(I,L)=0.D0
IF(I .EQ. 1)GO TO 54
DO 54 K=1,I-1
SOM(I,L)=SOM(I,L)+Q(K,I)*Q(K,L)
54  CONTINUE
Q(I,L)=(S(I,L)-SOM(I,L))/Q(I,I)
GO TO 59
56  SOM(I,L)=0.D0
IF(I .EQ. 1)GO TO 57
DO 57 K=1,I-1
SOM(I,L)=SOM(I,L)+Q(K,I)*Q(K,I)
57  CONTINUE
Q(I,L)=DSQRT(S(I,L)-SOM(I,L))
GO TO 59
58  Q(I,L)=0.D0
59  CONTINUE
IF(KOD.EQ.1)GO TO 65
WRITE (KOUT,61)I,L,Q(I,L)
WRITE (KECRAN,61)I,L,Q(I,L)
61  FORMAT(5X,'I=' ,I4,5X,'L=' ,I4,5X,'Q(I,L)=' ,D23.17)
65  CONTINUE
70  CONTINUE
CALL XINVER(6,6,Q,QMOINS,MERKX,MERKY,S1,S2,IERR)
IF(IERR .NE.1)GO TO 90
WRITE(KOUT,85)
WRITE(KECRAN,85)
85  FORMAT(10X,'*****MATRICE SINGULIERE*****')

```



```

GO TO 500
90 DO 100 I=1,6
DO 100 J=1,6
IF(KOD.EQ.1)GO TO 100
WRITE(KOUT,97)I,J,QMOINS(I,J)
WRITE(KECRAN,97)I,J,QMOINS(I,J)
97 FORMAT(5X,'I=',I4,5X,'J=',I4,5X,'QMOINS(I,L)=' ,D23.17)
100 CONTINUE
DO 130 I=1,6
A(I,I2,I1)=0.D0
DO 115 L=1,6
A(I,I2,I1)=A(I,I2,I1)-C(L,I1)*QMOINS(I,L)
115 CONTINUE
WRITE(KOUT,120)I,A(I,I2,I1)
WRITE(KECRAN,120)I,A(I,I2,I1)
120 FORMAT(10X,'I=',I4,10X,'A(I)=' ,D23.17)
WRITE(KTRAN,121)A(I,I2,I1)
121 FORMAT(D)
130 CONTINUE
R=-PAS
DO 150 K=1,NPAS
R=R+PAS
IF(K.NE.1)GO TO 300
C R=R+.0000001D00
300 CONTINUE
DELV=0.D0
DO 140 I=1,3
TERM=(A(I,I2,I1)+R*R*A(I+3,I2,I1))*DEXP(-AL(I,I2,I1)*R*R)
DELV=DELV+TERM
c WRITE(KOUT,82)A(I,I2,I1),A(I+3,I2,I1),AL(I,I2,I1),DELV,TERM
c WRITE(KECRAN,82)A(I,I2,I1),A(I+3,I2,I1),AL(I,I2,I1),DELV,TERM
c 82 FORMAT(5X,'A(I)=' ,D15.8,5X,'A(I+3)=' ,D15.8,5X,'AL(I)=' ,D15.8,
c 15X,'DELV=' ,D15.8,5X,'TERM=' ,D15.8)
140 CONTINUE
X1=DSQRT(AL1CO(I1))*R
X2=DSQRT(AL2CO(I1))*R
IF(R.LT.1.D-04)GOTO 86
Y1=C1COR(I1)*ERF(X1)
Y2=C2COR(I1)*ERF(X2)
VCORE=-ZV(I1)/R*(Y1+Y2)
GOTO 87
86 VCORE=-2.D0/DSQRT(PI)*ZV(I1)*(DSQRT(AL1CO(I1))*C1COR(I1)+
1DSQRT(AL2CO(I1))*C2COR(I1))
87 CONTINUE
c WRITE(KOUT,83)X1,X2,Y1,Y2
c WRITE(KECRAN,83)X1,X2,Y1,Y2
c 83 FORMAT(4D15.8)
VL=VCORE+DELV
WRITE(KOUT,145)R,DELV,VCORE,VL
WRITE(KECRAN,145)R,DELV,VCORE,VL
145 FORMAT(5X,'R=' ,F4.1,5X,'DELV=' ,F9.5,5X,'VCOEUR=' ,F12.5,5X,'VL=' ,
1F12.5)
IF(K.NE.1)GO TO 150
R=R-.0000001D00
150 CONTINUE

```

```
170 CONTINUE
180 CONTINUE
500 CALL DATE(DATFIN)
    CALL TIME(TEMFIN)
    DUREE=SECNDS(DEBUT)
    WRITE(KOUT,9006)DATFIN,TEMFIN,DUREE
    WRITE(KECRAN,9006)DATFIN,TEMFIN,DUREE
9006 FORMAT(1H0,30X,'FIN DU CALCUL:',X,A10,2X,A10,X,'DUREE DU CALCUL=
1,F10.2,'SECONDES'/)
9999 CALL EXIT
    END
```

```

SUBROUTINE XINVER(NDIM,N,A,B,MERKX,MERKY,S1,S2,IERR)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
DIMENSION A(NDIM,N),B(NDIM,N),MERKX(N),MERKY(N)
IERR=1
DO 100 I=1,N
MERKX(I)=0
MERKY(I)=0
DO 100 L=1,N
100 B(I,L)=A(I,L)
DO 400 I=1,N
PIVOT=0.0D0
DO 200 IX=1,N
IF(MERKX(IX).NE.0) GO TO 200
DO 180 IY=1,N
IF(MERKY(IY).NE.0) GO TO 180
IF(DABS(B(IX,IY)).LE.DABS(PIVOT)) GO TO 180
PIVOT=B(IX,IY)
INDX=IX
INDY=IY
180 CONTINUE
200 CONTINUE
IF (DABS(PIVOT).LE.0.0D0) GO TO 770
MERKX(INDX)=INDY
MERKY(INDY)=INDX
B(INDX,INDY)=1.0D0/PIVOT
DO 300 L=1,N
IF(L.EQ.INDX) GO TO 300
DO 280 M=1,N
IF(M.EQ.INDY) GO TO 280
B(L,M)=B(L,M)-B(L,INDY)*B(INDX,M)/PIVOT
280 CONTINUE
300 CONTINUE
DO 390 IX=1,N
IF(IX.NE.INDX) B(IX,INDY)=B(IX,INDY)/PIVOT
390 CONTINUE
DO 400 IY=1,N
IF(IY.NE.INDY) B(INDX,IY)=-B(INDX,IY)/PIVOT
400 CONTINUE
DO 500 I=2,N
IX=I-1
IF(MERKX(IX).EQ.IX) GO TO 500
DO 450 J=1,N
IY=J
IF(MERKX(IY).EQ.IX) GO TO 460
450 CONTINUE
460 DO 490 K=1,N
HILF=B(IX,K)
B(IX,K)=B(IY,K)
490 B(IY,K)=HILF
MERKX(IY)=MERKX(IX)
500 MERKX(IX)=IX
DO 600 I=2,N
IX=I-1
IF(MERKY(IX).EQ.IX) GO TO 600

```

```
DO 550 J=1,N
  IY=J
  IF(MERKY(IY).EQ.IX) GO TO 560
550 CONTINUE
560 DO 590 K=1,N
  HILF=B(K,IX)
  B(K,IX)=B(K,IY)
590 B(K,IY)=HILF
  MERKY(IY)=MERKY(IX)
600 MERKY(IX)=IX
  S1=0.0D0
  S2=0.0D0
  DO 720 I=1,N
  DO 720 K=1,N
  CIK=0.0D0
  DO 710 L=1,N
710 CIK=CIK+A(I,L)*B(L,K)
  IF(I.EQ.K) S1=S1+CIK
720 S2=S2+CIK
  S2=S2-S1
  S1=S1/FLOAT(N)
  IERR=0
770 RETURN
END
```



```
DOUBLE PRECISION FUNCTION ERF(X)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
P=.3275911D00
A1=.254829592D00
A2=-.284496736D00
A3=1.421413741D00
A4=-1.453152027D00
A5=1.061405429D00
T=1.D00/(1.D00+P*X)
T2=T*T
T4=T2*T2
ERF=1.D00-(A1*T+A2*T2+A3*T*T2+A4*T4+A5*T*T4)*DEXP(-X*X)
RETURN
END
```

II - Calcul du facteur de forme, de la résistivité et du pouvoir thermoélectrique absolu

CALCUL DE LA RESISTIVITE ET DU P.T.E. D'UN ALLIAGE
AVEC DIFFERENTS FACTEURS DE FORME

FONCTIONS D'INTERFERENCES DE SPHERES DURES
SOUS PROGRAMME ECHANGE-CORRELATION APPELE PAR G(Q)

1ERE CARTE: KOD1,KOD2,NOMBR5

KOD1=1 PERMET DE LIRE LA DENSITE EXPERIMENTALE DE L'ALLIAGE

KOD2=1 PERMET DE LIRE LES FONCTIONS D'INTERFERENCES PARTIELLES
D'ASHCROFT

NOMBR5 EST LE NOMBRE DE DONNEES DES FONCTIONS D'INTERFERENCE

2EME CARTE: KPOT,KDIE

KPOT=1:E.C.P.;2:O.M.P.;3:P.I.P.;4S.M.P.;5:T.M.M.P.;6:TABULE;7:D

KDIE=1:HARTREE KDIE=9:VASHISHTA

MAT:MASSE ATOMIQUE Z:VALENCE AD,AE,TM:COEF.POUR CALCULER

DENSITE AG,BG: PERMET DE CALCULER ETA(T)

RC:RAYON DE COEUR VIDE BE :PARAMETRE DU POT P.I.P.,GA DEP EN EN

IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)

DOUBLE PRECISION MELEC,NAVO,KF,KF3,

IN,L1,L2,MATMOY,MAT1,MAT2,N1,N2,LAMB2,I1,KB

CHARACTER*10 DATDEB,TEMDEB,DATFIN,TEMFIN

DIMENSION S11(50),S12(50),S22(50),QTAB(50),YS11(50),YS12(50)
1,YS22(50)

DIMENSION KOR1(10),KOR2(10)

COMMON/CORPS/KOR1,KOR2

COMMON G11,G22,G12,BET1,BET2,BET12,S,A1,A2,GAM1,GAM12,SIG1,SIG2,

1AL,C1,ET1,ET2,ETAL,X,C2,KF,RC1,RC2,PI,Z1,Z2,EELEC,VMOY,AB,CX,ZMOY

2LAMB2,ETA1,MAT1,DEN1,O1,N1,S1,ETA2,MAT2,DEN2,O2,N2,S2,CONST,XM,Q1

3,KONT,TC,RYD

COMMON/DIEL/KDIE

COMMON/STRUC/KK,N10,QTAB,S11,S12,S22,YS11,YS12,YS22

CALL DATE(DATDEB)

CALL TIME(TEMDEB)

DEBUT=SECNDS(0.0)

KIN=3

KOUT=4

KECRAN=6

KTRAN=8

KROS=2

CALL ASSIGN(KROS,'ROS.DAT')

CALL ASSIGN(KTRAN,'TRANS.DAT')

CALL ASSIGN(KIN,'LALBAC.DAT')

CALL ASSIGN(KOUT,'ECRBAC.DAT')

WRITE(KOUT,5)DATDEB,TEMDEB

WRITE(KECRAN,5)DATDEB,TEMDEB

WRITE(KROS,5)DATDEB,TEMDEB

5 FORMAT(1H0,20X,'DEBUT DU CALCUL:',2X,A10,2X,A10////)

```

PI=3.141592653589793238462643D00
MELEC=9.109558D-31
HBAR=1.0545919D-34
EELEC=-1.6021917D-19
NAVO=6.022169D23
CX=2.9979250D08
KB=1.380622D-23
AB=1.D07*HBAR/MELEC*HBAR/EELEC/EELEC/CX/CX
H22M=HBAR*.5D0/MELEC*HBAR
D=1./2.
U=1./3.
RYD=HBAR/2.D0/MELEC/AB/AB*HBAR
75 READ(KIN,75)KOD1,KOD2,NOMBR5
   FORMAT(3I10)
   1 READ(KIN,3,END=999)KPOT,KDIE
   3 FORMAT(2I10)
91  READ(KIN,100,END=999)MAT1,Z1,AD1,AE1,TM1,AG1,BG1,KOR1
   READ(KIN,100)MAT2,Z2,AD2,AE2,TM2,AG2,BG2,KOR2
100 FORMAT(5D15.8/2D15.8,10A2)
   WRITE(KOUT,99)
   WRITE(KECRAN,99)
99  FORMAT(1H ///10X,
1 '*****'
2*****' ///)
   WRITE(KOUT,103)KOR1,KOR2
   WRITE(KROS,103)KOR1,KOR2
   WRITE(KECRAN,103)KOR1,KOR2
103 FORMAT(1H0,20X,'RESISTIVITE D UN ALLIAGE , POTENTIEL DE BACHELET
1,//// 5X, 10A2, 10A2///)
   BG1=BG1*1.D-04
   BG2=BG2*1.D-04
   KONT=0
998 CONTINUE
   READ(KIN,101,END=999)TC,M
101 FORMAT(D15.8,I10)
   TK=TC+273.D0
   WRITE(KROS,102)KOR1,MAT1,Z1,AD1,AE1,TM1,AG1,BG1,TC,TK
   WRITE(KROS,102)KOR2,MAT2,Z2,AD2,AE2,TM2,AG2,BG2,TC,TK
   WRITE(KOUT,102)KOR1,MAT1,Z1,AD1,AE1,TM1,AG1,BG1,TC,TK
   WRITE(KECRAN,102)KOR1,MAT1,Z1,AD1,AE1,TM1,AG1,BG1,TC,TK
   WRITE(KOUT,102)KOR2,MAT2,Z2,AD2,AE2,TM2,AG2,BG2,TC,TK
   WRITE(KECRAN,102)KOR2,MAT2,Z2,AD2,AE2,TM2,AG2,BG2,TC,TK
102 FORMAT(1H0,50X,10A2/ 5X, 'MAT=',D15.8,5X,'Z=',D15.8,5X,'DENS= (',
1D15.8,'-',D15.8,'*1.D04*(TC-',D15.8,')')*1.D03'/5X,'AG1=',D15.8,
25X,'BG1=',D15.8,5X,'TC=',D15.8,5X,'TK=',D15.8//)
   DEN1=(AD1-AE1*1.D-04*(TC-TM1))*1.D03
   DEN2=(AD2-AE2*1.D-04*(TC-TM2))*1.D03
   ETA1=AG1*DEXP(-BG1*TK)
   ETA2=AG2*DEXP(-BG2*TK)
   O1=MAT1/NAVO/DEN1
   O2=MAT2/NAVO/DEN2
   SIG1=(6.D0*O1/PI*ETA1)**U
   SIG2=(6.D0*O2/PI*ETA2)**U
   AL=SIG1/SIG2
   IF(AL.LT.1.D0)GO TO 104

```

```

WRITE(KOUT,106)AL
WRITE(KECRAN,106)AL
106  FORMAT(1H ,///'*****AL=',D15.8,
1'**** INVERSER L ORDRE DES DONNEES****'/)
GO TO 999
104  CONTINUE
C
C  DEBUT DE LA BOUCLE DES CONCENTRATIONS
C
J=1
DO 50 J=1,M
II=FLOAT(J)
X=(II-1.)/(FLOAT(M-1))
DO 1281 KK=1,2
IF(KOD2.NE.1) GO TO 1280
IF(KK.NE.1) GO TO 1282
WRITE(KOUT,1283)
WRITE(KECRAN,1283)
1283  FORMAT(1H0//5X,
1'FONCTIONS D INTERFERENCE PARTIELLES EXPERIMENTALES'//)
I=1
IF(NOMBR.S.LT.1)GO TO 9104
DO 71 I=1,NOMBR.S
9104  CONTINUE
II=I+1
READ(KIN,72,END=999) QTAB(II),S11(II),S12(II),S22(II)
72  FORMAT(4D15.9)
71  CONTINUE
READ (KIN,128,END=999) XLU
X=XLU
I=I-1
QTAB(1)=0.
S11(1)=S11(2)
S12(1)=S12(2)
S22(1)=S22(2)
N10=NOMBR.S+1
I=1
IF(N10.LT.1)GO TO 9105
DO 710 I=1,N10
9105  CONTINUE
WRITE(KOUT,711)QTAB(I),S11(I),S12(I),S22(I)
WRITE(KECRAN,711)QTAB(I),S11(I),S12(I),S22(I)
711  FORMAT(1X,4D15.9)
710  CONTINUE
I=I-1
CALL FITA(N10,QTAB,S11,YS11,IDIOT)
CALL FITA1(N10,QTAB,S12,YS12,IDIOT)
CALL FITA2(N10,QTAB,S22,YS22,IDIOT)
IF(IDIOT.EQ.2)GO TO 90
WRITE(KOUT,800)
WRITE(KECRAN,800)
800  FORMAT(1H0)
LL=LL-1
GO TO 1285
1280  CONTINUE

```

```

      IF(KK.EQ.1) GO TO 1281
1282 WRITE(KOUT,1284)
      WRITE(KECRAN,1284)
1284 FORMAT(1H0//5X,
1'FONCTIONS D INTERFERENCE PARTIELLES DE SPHERES DURES'//)
      IF(KOD2.NE.1)GO TO 1285
      WRITE(KOUT,800)
      WRITE(KECRAN,800)
      QT=0.
      DO 1112 LL=1,80
      QT=QT+.05D10
      CALL AIJK(QT,A11,A22,A12)
      WRITE(KOUT,1111)QT,A11,A22,A12
      WRITE(KECRAN,1111)QT,A11,A22,A12
1111 format(4(1X,D15.8))
1112 CONTINUE
      LL=LL-1
1285 CONTINUE
      IF(KOD1.NE. 1) GO TO 127
      IF(KK.EQ.2)GO TO 127
      READ (KIN,128,END=999) XLU
128  FORMAT(D15.8)
127  CONTINUE
      DO 501 KKK=1,2
      IF (KOD1.NE. 1) GO TO 126
      X=XLU
      IF(KKK.EQ. 2) GO TO 126
      WRITE(KOUT,1273)
      WRITE(KECRAN,1273)
1273 FORMAT(1H1,10X,
1'RESULTATS OBTENUS A PARTIR DES DENSITES EXPERIMENTALES',/)
      IF (KOD2.EQ.1) GO TO 1279
      IF(KK.EQ.1)GO TO 1275
1279 CONTINUE
      IF(KK.EQ.2)GO TO 1275
      READ (KIN,1271,END=999 )AD,AE,TM
1271 FORMAT(3D15.9)
1275 CONTINUE
      C1=1.-X
      C2=X
      X1=C1
      X2=C2
      MATMOY=C1*MAT1+C2*MAT2
      ZMOY=C1*Z1+C2*Z2
      DENS=(AD-AE*1.D-04*(TC-TM))*1.D03
      VMOY=MATMOY/NAVO/DENS
      N=1./VMOY
      GO TO 1272
126  CONTINUE
      IF(KKK.EQ.1)GO TO 501
      WRITE(KOUT,1274)
      WRITE(KECRAN,1274)
1274 FORMAT(1H1,5X,
1'RESULTATS OBTENUS A PARTIR DE L INTERPOLATION DES VOLUMES ATOMI(
2ES DES CORPS PURS'//)

```

```

C1=1.-X
C2=X
X1=C1
X2=C2
MATMOY=C1*MAT1+C2*MAT2
ZMOY=C1*Z1+C2*Z2
VMOY=C1*O1+C2*O2
N=1.D0/VMOY
DENS=MATMOY*N/NAVO
1272 CONTINUE
KF3=3.D0*PI*PI*ZMOY/VMOY
KF=KF3**U
XKF=KF
EF=H22M*KF*KF
N1=C1*N
N2=C2*N
ET1=PI/6.D0*N1*SIG1**3
ET2=PI/6.D0*N2*SIG2**3
ETAL=ET1+ET2
LAMB2=1.D0/(PI*AB*KF)
S1=2.D0*KF*RC1
S2=2.D0*KF*RC2
Q1=PI*PI*KB*TK/3.D0/EELEC/EF*KB
G11=((1.+0.5*ETAL)+1.5*ET2*(AL-1.))/(1.-ETAL)**2
G22=((1.+0.5*ETAL)+1.5*ET1*(1./AL-1.))/(1.-ETAL)**2
G12=((1.+0.5*ETAL)+1.5*(1.-AL)*(ET1-ET2)/(1.+AL))/(1.-ETAL)**2
BET1=-6.*(ET1*G11**2+0.25*ET2*(1.+AL)**2*AL*G12**2)
BET2=-6.*(ET2*G22**2+0.25*ET1/AL**3*(1.+AL)**2*G12**2)
BET12=-3.*AL*(1.+AL)*(ET1*G11/AL**2+ET2*G22)*G12
S=ET1+ET1**2+(3.*AL-2.-2.*AL**3+3.*AL**2)*ET1*ET2+ET1**3+
1*(AL**3-1.+6.*AL-3.*AL**2)*ET1**2*ET2+(1.-AL**3-3.*AL+6.*AL**2)*
2*ET1*ET2**2+AL**3*ET2+AL**3*ET2**2+AL**3*ET2**3
A1=((1.-ETAL)*(1.+2.*ET1+(3.*AL-2.-2.*AL**3+3.*AL**2)*ET2+3.*ET1
1**2+2.*(AL**3-1.+6.*AL-3.*AL**2)*ET1*ET2+(1.-AL**3-3.*AL+6.*AL**2)
2*ET2**2)+3.*S)/(1.-ETAL)**4
A2=((1.-ETAL)*((3.*AL-2.-2.*AL**3+3.*AL**2)*ET1+(AL**3-1.+6.*AL-
13.*AL**2)*ET1**2+2.*(1.-AL**3-3.*AL+6.*AL**2)*ET1*ET2+AL**3+2.*AL
2**3*ET2+3.*AL**3*ET2**2)+3.*S)/(1.-ETAL)**4)/AL**3
GAM1=(ET1*A1+AL**3*ET2*A2)*0.5
GAM12=2.*GAM1*(1.-AL)/AL
L=2000
VF=HBAR*KF/MELEC
XM =3.*PI*VMOY/EELEC/EELEC/VF/VF/HBAR
CONST=XM/4.D0/KF3/KF
WRITE(KOUT,110)X,ZMOY,MATMOY,DENS,VMOY,ETAL,KF,AL,TC,TK,CONST,XM
1,N,LAMB2,L,Q1
WRITE(KECRAN,110)X,ZMOY,MATMOY,DENS,VMOY,ETAL,KF,AL,TC,TK,
1,CONST,XM,N,LAMB2,L,Q1
110 FORMAT(1H0,5X,'CONC=' ,D15.8,5X,'ZMOY=' ,D15.8,5X,'MATMOY=' ,D15.8,5
1,'DENS=' ,D15.8,5X,'VMOY=' ,D15.8/5X,
2'ETA ALLIAGE=' ,D15.8, 5X,'KF=' ,D15.8,5X,'AL=' , D15.8/5X,'TC=' ,
3D15.8,5X,'TK=' ,D15.8,5X,'CONST=' ,D15.8,5X,'XM=' , D15.8/5X,'N=' ,
4D15.8,5X,'LAMB2=' ,D15.8,5X,'L=' ,I10,5X,'Q1=' ,D15.8/)
CALL SP5(KPOT)
501 CONTINUE

```

```
      KKK=KKK-1
1281 CONTINUE
      KK=KK-1
50   CONTINUE
      J=J+1
      GO TO 998
90   WRITE(KOUT,9333)
      WRITE(KECRAN,9333)
9333 FORMAT(1H0,5X,'TILT'/)
999  CALL DATE(DATFIN)
      CALL TIME(TEMFIN)
      DUREE=SECNDS(DEBUT)
      WRITE(KOUT,9006)DATFIN,TEMFIN,DUREE
      WRITE(KROS,9006)DATFIN,TEMFIN,DUREE
      WRITE(KECRAN,9006)DATFIN,TEMFIN,DUREE
9006 FORMAT(1H0,30X,'FIN DU CALCUL:',X,A10,2X,A10,X,'DUREE DU CALCUL=
1,F10.2,'SECONDES'/)
      CALL EXIT
      END
```

```

SUBROUTINE AIJK(K,AS11,AS22,AS12)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION K,KF,LAMB2,N1,N2,MAT1,MAT2
DIMENSION T11(50),T12(50),T22(50),QTAB(50),YS11(50),YS12(50)
1,YS22(50)
COMMON G11,G22,G12,BET1,BET2,BET12,S,A1,A2,GAM1,GAM12,SIG1,SIG2,
1AL,C1,ET1,ET2,ETAL,X,C2,KF,RC1,RC2,PI,Z1,Z2,EELEC,VMOY,AB,CX,ZMOY
2LAMB2,ETA1,MAT1,DEN1.01,N1,S1,ETA2,MAT2,DEN2,02,N2,S2,CONST,XM,Q
3,KONT,TC,RYD
COMMON/STRUC/KK,N10,QTAB,T11,T12,T22,YS11,YS12,YS22
IF(KK.EQ.1) GO TO 200
X=C2
Y=K*SIG2
U=AL*Y
V=.5*Y*(1.-AL)
X1=K/2./KF
C *****FILTRAGE DU CAS K=0
IF(K.GT.1.D8)GO TO 30
AS12=0.
AS11=0.
AS22=0.
GO TO 40
30 SU=DSIN(U)
CU=DCOS(U)
SV=DSIN(V)
CV=DCOS(V)
SZ=DSIN(Y)
CZ=DCOS(Y)
C11=-24.*ET1/(U**3)*(A1*(SU-U*CU)+BET1/U*(2.*U*SU-
1(U**2-2.)*CU-2.))+GAM1/(U**3)*((4.*U**3-24.*U)*SU-(U**4-
212.*U**2+24.)*CU+24.))
C22=-24.*ET2/(Y**3)*(A2*(SZ-Y*CZ)+BET2/Y*(2.*Y*SZ-(
1Y*Y-2.)*CZ-2.))+GAM1/(U**3)*((4.*Y**3-24.*Y)*SZ-(Y**4-12.
2*Y**2+24.)*CZ+24.))
A0=1.-AL
A3=AL**3
ALU=2.*AL*U
U2=U*U
U3=U2*U
U4=U3*U
CC12=-((3.*A0**3*ETAL*A1*(SV-V*CV)/((X+C1*A3)*V**3)+24.*ETAL*A3/(X
1C1*A3)*(SV/U4*(BET12*(2.*U*CU+(U2-2.)*SU)+GAM12/U*((3.*U2-6.)*CU+
2U3-6.*U)*SU+6.))+GAM1/U2*((4.*U3-24.*U)*CU+(U4-12.*U2+24.)*SU))+CV
3U4*(BET12*(2.*U*SU-(U2-2.)*CU-2.))+GAM12/U*((3*U2-6.)*SU-(U3-6.*U
4CU)+GAM1/U2*((4.*U3-24.*U)*SU-(U4-12.*U2+24.)*CU+24.))+A1/U*(CV*(
5SU-U*CU)/U2+A0*(1.-CU)/ALU)+SV*((CU+U*SU-1.)/U2+A0*SU/ALU)))
C12=CC12*SQRT(C1*C2)
S11=1./(1.-C11-C12**2/(1.-C22))
S22=1./(1.-C22-C12**2/(1.-C11))
S12=C12/((1.-C11)*(1.-C22)-C12**2)
IF(C1)102,101,102
101 AS11=1.
AS12=1.

```



```
GO TO 105
102 AS11=1.+(S11-1.)/C1
   IF(C2)106,104,106
   106 AS12=1.+S12/(C1*C2)**.5D0
103 IF(C2)105,104,105
104 AS22=1.
   AS12=1.
   GO TO 40
105 AS22=1.+(S22-1.)/C2
   40 CONTINUE
   RETURN
200 CONTINUE
   CALL FITID(N10,QTAB,T11,YS11,K,SS11,YSS11)
   AS11=SS11
   CALL FITID1(N10,QTAB,T12,YS12,K,SS12,YSS12)
   AS12=SS12
   CALL FITID2(N10,QTAB,T22,YS22,K,SS22,YSS22)
   AS22=SS22
   RETURN
END
```

```

SUBROUTINE VIJBAC(Q,V1,V2)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
  DOUBLE PRECISION K,KF,KS2,LAMB2,N1,N2,MAT1,MAT2
  DIMENSION AL(6,4,2),LMAX(2),AL1CO(2),AL2CO(2),C1COR(2),C2COR(2),
  1A(6,4,2),ZV(2),w(2)
  COMMON G11,G22,G12,BET1,BET2,BET12,S,A1,A2,GAM1,GAM12,SIG1,SIG2,
  1ALP,C1,ET1,ET2,ETAL,X,C2,KF,RC1,RC2,PI,Z1,Z2,EELEC,VMOY,AB,CX,
  1ZMOY,LAMB2,ETA1,MAT1,DEN1,O1,N1,S1,ETA2,MAT2,DEN2,O2,N2,S2,CONST
  3XM,Q1,KONT,TC,RYD

```

```

  COMMON/POTBAC/A,AL,LMAX,AL1CO,AL2CO,C1COR,C2COR,ZV
  IF(Q.GT.1.D06)GO TO 20

```

```

  QQ=1.D06

```

```

  X1=QQ/(2.D0*KF)

```

```

20 CONTINUE

```

```

  X1=Q/(2.D0*KF)

```

```

  IF(X1-0.D0)13,13,12

```

```

12 IF(X1-1.D0)15,14,15

```

```

13 FX=1.D0

```

```

  GO TO 16

```

```

14 FX=.5D0

```

```

  GO TO 16

```

```

15 GX=DABS((1.D0+X1)/(1.D0-X1))

```

```

  FX=.5D0+(1.D0-X1*X1)/(4.D0*X1)*DLOG(GX)

```

```

16 CONTINUE

```

```

  KS2=4.D0*KF/PI/AB

```

```

  DD=KS2*FX/Q/Q

```

```

  RS=(VMOY/ZMOY*3.D0/4.D0/PI/AB/AB/AB)**(1.D0/3.D0)

```

```

  CALL GQ(Q,KS2,RS,G)

```

```

  EPS=1.D0+(1.D0-G)*DD

```

```

  VMOI=VMOY/AB/AB/AB

```

```

  QQ=q*ab

```

```

*****

```

```

  DO 31 I1=1,2

```

```

  I4=LMAX(I1)+1

```

```

  TERM2=0.D00

```

```

  TERM3=0.D00

```

```

  term31=0.D00

```

```

  term32=0.D00

```

```

  term33=0.D00

```

```

  term34=0.D00

```

```

  term35=0.D00

```

```

  term36=0.D00

```

```

  QF=KF*AB

```

```

  QF2=QF*QF

```

```

  TERM1=-4*PI*ZV(I1)/VMOI/QQ/QQ*(C1COR(I1)*DEXP(-QQ*QQ/4.D0
  1/AL1CO(I1))+C2COR(I1)*DEXP(-QQ*QQ/4.D0/AL2CO(I1)))

```

```

  TERM1=-4*PI*ZMOY/VMOI/QQ/QQ*(C1COR(I1)*DEXP(-QQ*QQ/4.D0
  1/AL1CO(I1))+C2COR(I1)*DEXP(-QQ*QQ/4.D0/AL2CO(I1)))

```

```

  DO 30 I3=1,3

```

```

  TERM21=DEXP(-QQ*QQ/4.D0/AL(I3,I4,I1))/AL(I3,I4,I1)**1.5D00
  1*(A(I3,I4,I1)+A(I3+3,I4,I1))/AL(I3,I4,I1)*(1.5D0-
  2QQ*QQ/4.D0/AL(I3,I4,I1))

```

```

  TERM2=TERM2+PI**1.5D00/VMOI*TERM21

```

```

IF(QQ.GT.2.D0*QF) GOTO 24
g1=A(I3,1,I1)*FI(QF2,AL(I3,1,I1))
g2=A((I3+3),1,I1)*FJ(QF2,AL((I3+3),1,I1))
g3=-A(I3,I4,I1)*FI(QF2,AL(I3,I4,I1))
g4=-A((I3+3),I4,I1)*FJ(QF2,AL((I3+3),I4,I1))
g5=A(I3,2,I1)*FI1(QF2,AL(I3,2,I1))
g6=A((I3+3),2,I1)*FJ1(QF2,AL((I3+3),2,I1))
g7=-A(I3,I4,I1)*FI1(QF2,AL(I3,I4,I1))
g8=-A((I3+3),I4,I1)*FJ1(QF2,AL((I3+3),I4,I1))
term31=TERM31+4.D0*PI/VMOI*(G1+G2)
term32=TERM32+4.D0*PI/VMOI*(G3+G4)
U=(1.D0-2.D0*X1*X1)
term33=TERM33+12.D0*PI/VMOI*U*(G5+G6)
term34=TERM34+12.D0*PI/VMOI*U*(G7+G8)
IF(I4.LT.4)GOTO 25
g9=A(I3,3,I1)*FI2(QF2,AL(I3,3,I1))
g10=A((I3+3),3,I1)*FJ2(QF2,AL((I3+3),3,I1))
g11=-A(I3,I4,I1)*FI2(QF2,AL(I3,I4,I1))
g12=-A((I3+3),I4,I1)*FJ2(QF2,AL((I3+3),I4,I1))
term35=TERM35+10.D0*PI/VMOI*(3.D0*U*U-1.D0)*(G9+G10)
term36=TERM36+10.D0*PI/VMOI*(3.D0*U*U-1.D0)*(G11+G12)
go to 25
24 g1=A(I3,1,I1)*FBI(QF,QQ,AL(I3,1,I1))
g2=A((I3+3),1,I1)*FBJ(QF,QQ,AL((I3+3),1,I1))
g3=-A(I3,I4,I1)*FBI(QF,QQ,AL(I3,I4,I1))
g4=-A((I3+3),I4,I1)*FBJ(QF,QQ,AL((I3+3),I4,I1))
g5=A(I3,2,I1)*FBI1(QF,QQ,AL(I3,2,I1))
g6=A((I3+3),2,I1)*FBJ1(QF,QQ,AL((I3+3),2,I1))
g7=-A(I3,I4,I1)*FBI1(QF,QQ,AL(I3,I4,I1))
g8=-A((I3+3),I4,I1)*FBJ1(QF,QQ,AL((I3+3),I4,I1))
term31=TERM31+4.D0*PI/VMOI*(G1+G2)
term32=TERM32+4.D0*PI/VMOI*(G3+G4)
term33=TERM33-12.D0*PI/VMOI*(G5+G6)
term34=TERM34-12.D0*PI/VMOI*(G7+G8)
IF(I4.LT.4)GOTO 25
g9=A(I3,3,I1)*FBI2(QF,QQ,AL(I3,3,I1))
g10=A((I3+3),3,I1)*FBJ2(QF,QQ,AL((I3+3),3,I1))
g11=-A(I3,I4,I1)*FBI2(QF,QQ,AL(I3,I4,I1))
g12=-A((I3+3),I4,I1)*FBJ2(QF,QQ,AL((I3+3),I4,I1))
term35=TERM35+10.D0*PI/VMOI*2.D0*(G9+G10)
term36=TERM36+10.D0*PI/VMOI*2.D0*(G11+G12)
25 TERM3=TERM31+TERM32+TERM33+TERM34+TERM35+TERM36
w(1)=(term1+term2+term3)/eps*2.D0*RYD
30 CONTINUE
C   xnorm=(4*PI*ZV(I1)/VMOI/QQ/QQ) !modif du 14/1/88
xnorm=(4*PI*ZMOY/VMOI/QQ/QQ) !modif du 15/3/88
t1=term1/xnorm
t2=term2/xnorm
t3=term3/xnorm
t=t1+T2+T3
C   write(6,32)qq,t1,t2,t3,t
C   write(4,32)qq,t1,t2,t3,t
C 32 format(1X,5D15.8)
31 CONTINUE
V1=w(1)
V2=w(2)
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FBJ2(QF,QQ,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
A=DEXP(-(DABS(QF-QQ)-QF)**2/4.DO/AL)
B=DEXP(-(QF+DABS(QF-QQ))**2/4.DO/AL)
E=DSQRT(PI/AL)
G=QF+DABS(QF-QQ)
H=DABS(QF-QQ)-QF
FBJ2=3.DO*E/4.DO*(B-A)*(6.DO*AL/QF/QF/DABS(QF-QQ)/DABS(QF-QQ)
1+1.DO/DABS(QF-QQ)/DABS(QF-QQ)+1.DO/QF/QF)*1.DO/QF/DABS(QF-QQ)
2+9.DO*E/4.DO/QF/QF/DABS(QF-QQ)/DABS(QF-QQ)*(A+B)+3.DO*E/8.DO
3/QF/QF/DABS(QF-QQ)/AL*(G*B+H*A)+3.DO*E/8.DO/QF/DABS(QF-QQ)
4/DABS(QF-QQ)/AL*(G*B-H*A)+1.DO*E/16.DO/AL/AL/QF/DABS(QF-QQ)
5*((2.DO*AL-H*H)*A-(2.DO*AL-G*G)*B)
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FBI2(QF,QQ,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
A=DEXP(-(DABS(QF-QQ)-QF)**2/4.DO/AL)
B=DEXP(-(QF+DABS(QF-QQ))**2/4.DO/AL)
E=DSQRT(PI/AL)
FBI2=E/4.DO*(A-B)*(1.DO/QF/DABS(QF-QQ)+12.DO/QF/
1QF/QF/DABS(QF-QQ)/DABS(QF-QQ)/DABS(QF-QQ)*AL*AL)-E
2/2.DO*(A+B)*3.DO*AL/QF/QF/DABS(QF-QQ)/DABS(QF-QQ)
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FBJ(QF,QQ,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
FBJ=1.DO/QF/DABS(QF-QQ)/2.DO*DSQRT(PI)*(2.DO*AL-(QF-DABS(QF-
1QQ))**2)*DEXP(-(QF-DABS(QF-QQ))**2/4.DO/AL)/8.DO/AL**2.5D0
2-1.DO/QF/DABS(QF-QQ)/2.DO*DSQRT(PI)*(2.DO*AL-(QF+DABS(QF
3-QQ))**2)*DEXP(-(QF+DABS(QF-QQ))**2/4.DO/AL)/8.DO/AL**2.5D0
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FBI(QF,QQ,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
FBI=1.DO/QF/DABS(QF-QQ)/4.DO*DSQRT(PI/AL)*(DEXP(-(QF-DABS(QF
1-QQ))**2/4.DO/AL)-DEXP(-(QF+DABS(QF-QQ))**2/4.DO/AL))
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FBI1(QF,QQ,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
A=DEXP(-(DABS(QF-QQ)-QF)**2/4.DO/AL)
B=DEXP(-(QF+DABS(QF-QQ))**2/4.DO/AL)
FBI1=1.DO/QF/DABS(QF-QQ)/4.DO*DSQRT(PI/AL)*(A+B)-1.DO/QF
1/DABS(QF-QQ)/QF/DABS(QF-QQ)/2.DO*AL*DSQRT(PI/AL)*(A-B)
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FBJ1(QF,QQ,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
A=DEXP(-(DABS(QF-QQ)-QF)**2/4.DO/AL)
B=DEXP(-(QF+DABS(QF-QQ))**2/4.DO/AL)
E=DSQRT(PI/AL)
G=QF+DABS(QF-QQ)
H=DABS(QF-QQ)-QF
FBJ1=1.DO/QF/DABS(QF-QQ)/QF/DABS(QF-QQ)/4.DO*E*(A-B)+1.DO
1/QF/DABS(QF-QQ)/AL/AL/16.DO*E*(B*(2.DO*AL-G*G)+A*(2.DO*AL
2-H*H))-1.DO/QF/DABS(QF-QQ)/DABS(QF-QQ)/AL/8.DO*E*(G*B+H*A)
3-1.DO/QF/QF/DABS(QF-QQ)/AL/8.DO*E*(G*B-H*A)
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FJ2(QF2,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
FJ2=4.5D0/QF2*DSQRT(PI*AL)/QF2*(-1.DO+DEXP(-QF2/AL))/QF2
1+0.75D0/QF2*(1.DO+5.DO*DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI/AL)/QF2+1.DO/QF2*
2(1.DO+11.DO*DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI/AL/AL/AL)/8.DO+0.25D0*
3DSQRT(PI)/AL**2.5D0*DEXP(-QF2/AL)
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FI2(QF2,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
FI2=3.DO/QF2*DSQRT(PI*AL*AL*AL)/QF2*(1.DO-DEXP(-QF2/AL))/QF2
1-1.5D0/QF2*(1.DO+DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI*AL)/QF2+0.25D0/QF2*
2(1.DO-DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI/AL)
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FI1(QF2,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
FI1=1.D0/4.D0/QF2*(1.D0+DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI/AL)
1-1.D0/QF2/2.D0*(1.D0-DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI*AL)/QF2
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FJ1(QF2,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
FJ1=1.D0/4.D0/QF2*(1.D0-DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI/AL)/QF2
1+1.D0/QF2/8.D0/AL**2.5D0*(AL-2.D0*QF2)*DEXP(-QF2/AL)*DSQRT(PI)
2+DSQRT(PI)/8.D0/QF2/AL**1.5D0*(1.D0-4.D0*DEXP(-QF2/AL))
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FI(QF2,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
FI=1.D0/4.D0/QF2*(1.D0-DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI/AL)
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FJ(QF2,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
FJ=1.D0/8.D0/QF2*(1.D0-DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI/AL**3)
1+DEXP(-QF2/AL)/4.D0*DSQRT(PI/AL**5)
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE GQ(K,KS2,RS,G)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION K,KF,KS2,LAMB2,N1,N2,MAT1,MAT2
COMMON G11,G22,G12,BET1,BET2,BET12,S,A1,A2,GAM1,GAM12,SIG1,SIG2,
IAL,C1,ET1,ET2,ETAL,X,C2,KF,RC1,RC2,PI,Z1,Z2,EELEC,VMOY,AB,CX,ZMOY
2LAMB2,ETA1,MAT1,DEN1,O1,N1,S1,ETA2,MAT2,DEN2,O2,N2,S2,CONST,XM,Q1
3,KONT,TC,RYD
COMMON/DIEL/KDIE
C G(Q) DE VASHISTA -SINGWI
IF(KDIE.EQ.9)GO TO 10
G=0.
GO TO 15
10 CALL GQVS(RS,AAA,BBB)
G=AAA*(1.D0-DEXP(-BBB*K*K/KF/KF))
15 CONTINUE
RETURN
END

```

```
DOUBLE PRECISION FUNCTION F1(K)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION K
CALL AIJK(K,A11,A22,A12)
CALL VIJBAC(K,V1,V2)
F1=A11*V1*K*K*K*V1
RETURN
END
```

```
DOUBLE PRECISION FUNCTION F2(K)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION K
CALL AIJK(K,A11,A22,A12)
CALL VIJBAC(K,V1,V2)
F2=A22*V2*K*K*K*V2
RETURN
END
```

```
DOUBLE PRECISION FUNCTION F3(K)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION K
CALL AIJK(K,A11,A22,A12)
CALL VIJBAC(K,V1,V2)
F3=A12*V2*K*K*K*V1
RETURN
END
```

```
DOUBLE PRECISION FUNCTION F4(K)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION K
CALL VIJBAC(K,V1,V2)
F4=(V1-V2)*K*K*K*(V1-V2)
RETURN
END
```

```

SUBROUTINE GQVS(XS,A,B)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
  DOUBLE PRECISION KF,LAMB2,N1,N2,MAT1,MAT2
  COMMON G11,G22,G12,BET1,BET2,BET12,S,A1,A2,GAM1,GAM12,SIG1,SIG2,
1AL,C1,ET1,ET2,ETAL,X,C2,KF,RC1,RC2,PI,Z1,Z2,EELEC,VMOY,AB,CX,ZMO
2LAMB2,ETA1,MAT1,DEN1,O1,N1,S1,ETA2,MAT2,DEN2,O2,N2,S2,CONST,XM,Q
3,KONT,TC,RYD
  RS=XS
  IF(RS-1.)1,2,3
3  IF(RS-2.)4,6,6
6  IF(RS-3.)7,9,9
9  IF(RS-4.)10,12,12
12 IF(RS-5.)13,15,15
15 IF(RS-6.)16,17,1
1  A=0.
   B=0.
   GO TO 20
2  A=.70853
   B=.36940
   GO TO 20
4  C=RS-1.
   A=.70853+C*.14656
   B=.36940-C*.03823
   GO TO 20
7  C=RS-2.
   A=.85509+C*.12296
   B=.33117-C*.02677
   GO TO 20
10 C=RS-3.
   A=.97805+C*.10677
   B=.30440-C*.02010
   GO TO 20
13 C=RS-4.
   A=1.08482+C*.09505
   B=.28430-C*.01580
   GO TO 20
16 C=RS-5.
   A=1.17987+C*.08582
   B=.26850-C*.01289
   GO TO 20
17 A=1.26569
   B=.25561
20 CONTINUE
   RETURN
   END

```


SUBROUTINE SP5(KF)

C***** POTENTIEL DE BACHELET *****

IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)

DOUBLE PRECISION L1,L2,KF,LAMB2,N1,N2,MAT1,MAT2

CHARACTER*10 NOM(2)

DIMENSION KOR1(10),KOR2(10)

DIMENSION AL(6,4,2),LMAX(2),AL1CO(2),AL2CO(2),C1COR(2),C2COR(2),

IA(6,4,2),ZV(2)

COMMON/POTBAC/A,AL,LMAX,AL1CO,AL2CO,C1COR,C2COR,ZV

COMMON G11,G22,G12,BET1,BET2,BET12,S,A1,A2,GAM1,GAM12,SIG1,SIG2,

IALP,C1,ET1,ET2,ETAL,X,C2,KF,RC1,RC2,PI,Z1,Z2,EELEC,VMOY,AB,CX,

LEMOY,LAMB2,ETA1,MAT1,DEN1,O1,N1,S1,ETA2,MAT2,DEN2,O2,N2,S2,CONST,

BXM,Q1,KONT,TC,RYD

COMMON/CORPS/KOR1,KOR2

EXTERNAL F1,F2,F3,F4

KONT=KONT+1

KPOT=KF

KIN=3

KOUT=4

KECRAN=6

KTRAN=8

IF (KONT.NE.1)GO TO 17

DO 4 I1=1,2

READ(KTRAN,7,END=999)NOM(I1),LMAX(I1),ZV(I1),C1COR(I1),C2COR(I1),

IAL1CO(I1),AL2CO(I1)

write(6,7)NOM(I1),LMAX(I1),ZV(I1),C1COR(I1),C2COR(I1),

IAL1CO(I1),AL2CO(I1)

7 FORMAT(A10,I4,F8.2,F10.4,F10.4,F8.2,F8.2)

4 CONTINUE

DO 5 I1=1,2

DO 5 I2=1,(LMAX(I1)+1)

READ(KTRAN,21,END=999)AL(1,I2,I1),AL(2,I2,I1),AL(3,I2,I1),

IAL(4,I2,I1),AL(5,I2,I1),AL(6,I2,I1)

write(6,21)AL(1,I2,I1),AL(2,I2,I1),AL(3,I2,I1),

IAL(4,I2,I1),AL(5,I2,I1),AL(6,I2,I1)

21 FORMAT(6(F8.2))

DO 5 I=1,6

READ(KTRAN,121,END=999)A(I,I2,I1)

write(6,121)A(I,I2,I1)

121 FORMAT(D)

5 CONTINUE

17 CONTINUE

C*****

WRITE(KOUT,14)

WRITE(KECRAN,14)

14 FORMAT(10X,'Q',18X,'V1',18X,'V2',18X,'A11',17X,'A22',17X,'A12',

15X//)

L1=.1D07

L2=2.D0*KF

QPAS=(L2-L1)/100.D0

QPAS=(L2-L1)/20.D0

Q=L1

C DO 15 I=1,21

```

DO 15 I=1,101
CALL AIJK(Q,A11,A22,A12)
CALL VIJBAC(Q,V1,V2)
c***** V est en U.S.I      W est en Ryd      modif du 9/4/89

w1=v1/2.179914d-18
w2=v2/2.179914d-18
WRITE(KECRAN,16)Q,w1,w2,A11,A22,A12
WRITE(KOUT,16)Q,w1,w2,A11,A22,A12
16  FORMAT(6(5X,D15.8))
    Q=Q+QFAS
15  CONTINUE
c*****
224  L1=.1D07
    L2=2.D0*KF
    IE=0
    MAXL=10
    PREC=.1D-3
    R011=CONST*DRBHV1(F1,L1,L2,PREC,IE,MAXL)
    WRITE(KOUT,205)MAXL,PREC
    WRITE(KECRAN,205)MAXL,PREC
205  FORMAT(1H ,5X,'MAXL=',I8,5X,'PREC=',D13.7/)
    MAXL=10
    PREC=.1D-3
    R022=CONST*DRBHV1(F2,L1,L2,PREC,IE,MAXL)
    WRITE(KOUT,205)MAXL,PREC
    PREC=.1D-3
    MAXL=10
    R012=CONST*DRBHV1(F3,L1,L2,PREC,IE,MAXL)
    WRITE(KOUT,205)MAXL,PREC
    PREC=.1D-3
    MAXL=10
    R03=CONST*DRBHV1(F4,L1,L2,PREC,IE,MAXL)
    WRITE(KOUT,205)MAXL,PREC
    ROCAL1=C1*C1*R011
    ROCAL2=C2*C2*R022
    ROCAL3=C1*C2*2.D0*R012
    ROCAL4=C1*C2*R03
    ROCAL=ROCAL1+ROCAL2+ROCAL3+ROCAL4
    WRITE(KOUT,210)R011,R022,R012,R03,ROCAL1,ROCAL2,ROCAL3,ROCAL4,
1KOR2,C2,ROCAL
    WRITE(KECRAN,210)R011,R022,R012,R03,ROCAL1,ROCAL2,ROCAL3,ROCAL4,
1KOR2,C2,ROCAL
210  FORMAT(1H0,/ 5X,'R011=',D15.9,5X,'R022=',D15.9,5X,'R012=',D15.9
15X,'R03=',D15.9/ 5X,'ROCAL1=',D15.9,5X,'ROCAL2=',D15.9,5X,
2'ROCAL3=',D15.9,5X,'ROCAL4=',D15.9,5X,/ 5X,'CONCENTRATION EN',
310A2,'=',D15.8/50X,'RESISTIVITE DE L ALLIAGE=',D15.8/)
    R11S2=0.D0
    R22S2=0.D0
    ALPHA=0.D0
    BETA=0.D0
    CALL VIJBAC(2.D0*KF,V1,V2)
    CALL AIJK(2.D0*KF,A11,A22,A12)
    WRITE(KOUT,400)V1,V2,A11,A22,A12
    WRITE(KECRAN,400)V1,V2,A11,A22,A12
400  FORMAT(1H0,5(5X,D15.9)/)

```

```

DEQ11=2.D0*V1*A11*XM/RO11*V1
DEQ22=2.D0*V2*A22*XM/RO22*V2
X3XI11=DEQ11+R11S2
X3XI22=DEQ22+R22S2
ROXI11=RO11*X3XI11
ROXI22=RO22*X3XI22
ROV1V2=2.D0*CONST*(2.D0*KF)**2*((V1-V2)*(2.D0*KF)**2*(V1-V2)
1+2.D0*V1*(2.D0*KF)**2*V2*A12)/4.D0
WRITE(KOUT,332)DEQ11,DEQ22,X3XI11,X3XI22,ROXI11,ROXI22,ROV1V2
WRITE(KECRAN,332)DEQ11,DEQ22,X3XI11,X3XI22,ROXI11,ROXI22,ROV1V2
332 FORMAT(1H0,5X,'2*Q11=',D15.9,5X,'2*Q22=',D15.9,5X,'3-XI11=',D15.
1,5X,'3-XI22=',D15.9/5X,'RO11*(3-XI11)=' ,D15.9,5X,
2'RO22*(3-XI22) =' ,D15.9,5X,'ROV1V2=' ,D15.9 )
TERM1=C1*C1/ROCAL*ROXI11
TERM2=C2*C2/ROCAL*ROXI22
TERM3=C1*C2*ROV1V2/ROCAL
TERM4=C1*C2*(ALPHA+BETA)/ROCAL
XI=3.D0-TERM1-TERM2-TERM3-TERM4
PTE=Q1*XI
KROS=2
WRITE(KROS,335)ROCAL,PTE,KOR2,X,TC
335 FORMAT(2X,'RESISTIVITE:' ,D15.9,2X,'PTA:' ,D15.9,2X,'CONCENTRATION E
1:' ,10A2,' : ' ,F8.4,2X,'TC:' ,F8.2)
WRITE(KOUT,333)TERM1,TERM2,TERM3,TERM4,XI,PTE
WRITE(KECRAN,333)TERM1,TERM2,TERM3,TERM4,XI,PTE
333 FORMAT(1H0,5X,'TERM1=' ,D15.9,5X,'TERM2=' ,D15.9,5X, 'TERM3=' ,
1D15.9,5X,'TERM4=' ,D15.9,5X,/ 50X,'XI ALLIAGE=' ,D15.9/
250X,'PTE DE L ALLIAGE=' ,D15.9 )
999 RETURN
END

```

III - Calcul de la fonction énergie- vecteur de transfert et du potentiel effectif

```

C   CALCUL DU POTENTIEL DE BACHELET
C   MODIF. DU 20/10/87 POUR ERF(0)
c   *****
C   * modif du 17/2/87 :association de bache et d'une partie de rosbac *
c   * calcul du pseudopotentiel et du facteur de forme pour un alliage *
c   *****
C       CALCUL DU POTENTIEL EFFECTIF D'UN ALLIAGE
C       AVEC LE
C
C   SOUS PROGRAMME ECHANGE-CORRELATION APPELE PAR G(Q) ( VASHISHTA- SINGWI )
C
C   MAT:MASSE ATOMIQUE   Z:VALENCE   AD,AE, TM:COEF.POUR CALCULER LA DENSITE
C
C   KDIE=1 HARTREE
C   KDIE=2 VASHISTA-SINGWI
C   KDIE=3 ICHIMARU
C   KDIE=4 SSTL
C   KDIE=5 TOIGO_WOODRUFF
C   KDIE=6 STLS
C
C
C   IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C   DOUBLE PRECISION MELEC,NAVO,KF,KF3,N,L1,L2,MATMOY,MAT1,MAT2,I5
C   CHARACTER*10 DATDEB,TEMDEB,DATFIN,TEMFIN
C   CHARACTER*10 KOR(2)
C   DIMENSION S(6,6),Q(6,6),AL(6,4,2),C(6,2),SOM(6,6),QMOINS(6,6),
C   1MERKX(6),MERYK(6),LMAX(2),AL1CO(2),AL2CO(2),C1COR(2),C2COR(2),
C   2A(6,4,2),ZV(2),LM(2),KOR1(10),KOR2(10)
C   dimension xtv(46),ytv(46),yytv(46)
C   DIMENSION XRS(6),AVS(6),BVS(6),YAVS(6),YBVS(6),ASSTL(6),BSSTL(6),
C   1YASSTL(6),YBSSTL(6)
C   COMMON X,KF,PI,VMOY,AB,ZMOY,RYD
C   COMMON/POTBAC/A,AL,LMAX,AL1CO,AL2CO,C1COR,C2COR,ZV,KDIE,AA,B
C   COMMON/AVECF/R,a0
C   common/avectv/xtv,ytv,yytv
C   data ytv/.00251D0,.01001D0,.02257D0,.04021D0,.06296D0,.09081D0,
C   1.12374D0,.16171D0,.20461D0,.25231D0,.30460D0,.36117D0,
C   2.42162D0,.48534D0,.55147D0,.61871D0,.68493D0,.74631D0,
C   3.79435D0,.80667D0,.78999D0,.74824D0,.73439D0,.72756D0,
C   4.72416D0,.72275D0,.72254D0,.72309D0,.72418D0,.72558D0,
C   5.72710D0,.72873D0,.73037D0,.73199D0,.73355D0,.73503D0,
C   6.73644D0,.73776D0,.73900D0,.74016D0,.74124D0,.74886D0,
C   7.75300D0,.75547D0,.75705,.76213D0/
C   data xtv/.1D0,.2D0,.3D0,.4D0,.5D0,.6D0,.7D0,.8D0,.9D0,1.0D0,
C   11.1D0,1.2D0,1.3D0,1.4D0,1.5D0,1.6D0,1.7D0,1.8D0,1.9D0,1.95D0,
C   22.0D0,2.1D0,2.2D0,2.3D0,2.4D0,2.5D0,2.6D0,2.7D0,2.8D0,2.9D0,
C   33.0D0,3.1D0,3.2D0,3.3D0,3.4D0,3.5D0,3.6D0,3.7D0,3.8D0,3.9D0,
C   44.0D0,5.0D0,6.0D0,7.0D0,8.0D0,2000.D0/
C   DATA AVS/.70853D0,.85509D0,.97805D0,1.08482D0,1.17987D0,1.26569D0
C   DATA BVS/.36940D0,.33117D0,.30440D0,.28430D0,.26850D0,.25561D0/
C   DATA ASSTL/.7756D0,.8994D0,.9629D0,.9959D0,1.0138D0,1.0218D0/
C   DATA BSSTL/.4307D0,.3401D0,.2924D0,.2612D0,.2377D0,.2189D0/
C   DATA XRS/1.D0,2.D0,3.D0,4.D0,5.D0,6.D0/

```

```

EXTERNAL F1,F2,F3
KIN=3
KOUT=4
KECRAN=6
CALL ASSIGN(KIN,'LBACVR.DAT')
CALL ASSIGN(KOUT,'ECRVEF.DAT')
CALL DATE(DATDEB)
CALL TIME(TEMDEB)
DEBUT=SECNDS(0.0)
WRITE(KOUT,2)DATDEB,TEMDEB
WRITE(KECRAN,2)DATDEB,TEMDEB
2  FORMAT(1H0,30X,'DEBUT DU CALCUL:',2X,A10,2X,A10///)
PI=3.141592653589793238462643D00
MELEC=9.109558D-31
HBAR=1.0545919D-34
EELEC=-1.6021917D-19
NAVO=6.022169D23
CX=2.9979250D08
AB=1.D07*HBAR/MELEC*HBAR/EELEC/EELEC/CX/CX
a0=ab
H22M=HBAR*.5D0/MELEC*HBAR
D=1./2.
U=1./3.
RYD=HBAR/2.D0/MELEC/AB/AB*HBAR
3  READ(KIN,3,END=999)NPAS,PAS,KOD,KODBAC,KODVQ,KDIE
  FORMAT(I4,D15.8,4I4)
  DO 4 I1=1,2
    READ(KIN,5)KOR(I1),LMAX(I1),C1COR(I1),C2COR(I1),AL1CO(I1),
1  AL2CO(I1),ZV(I1)
7  FORMAT(A10,I4,F8.2,F10.4,F10.4,F8.2,F8.2)
  IF(KODBAC.NE.1)GOTO 8
  WRITE(KOUT,6)KOR(I1),LMAX(I1),ZV(I1),C1COR(I1),C2COR(I1),
1  AL1CO(I1),AL2CO(I1)
  WRITE(KECRAN,6)KOR(I1),LMAX(I1),ZV(I1),C1COR(I1),C2COR(I1),
1  AL1CO(I1),AL2CO(I1)
5  FORMAT(A10,I4,2(4X,F8.4),2(4X,F6.2),F8.1)
6  FORMAT(1H0,20X,A10,15X,'LMAX=',I2,5X,'ZV=',D9.2/2X,'C1CORE=',
1  F8.4,2X,'C2CORE=',F8.4,2X,'ALPHA1CORE=',F6.2,2X,'ALPHA2CORE='
2,F6.2)
8  continue
  LM(I1)=LMAX(I1)+1
4  CONTINUE
  DO 180 I1=1,2      !*****BOUCLAGE SUR 2 CORPS
  DO 170 I2=1,LM(I1) !*****BOUCLAGE SUR 1
    READ(KIN,10,END=999)AL(1,I2,I1),AL(2,I2,I1),AL(3,I2,I1),
1  C(1,I1),C(2,I1),C(3,I1),C(4,I1),C(5,I1),C(6,I1)
10  FORMAT(3(4X,F6.2)/3(4X,F8.4)/3(4X,F8.4))
    AL(4,I2,I1)=AL(1,I2,I1)
    AL(5,I2,I1)=AL(2,I2,I1)
    AL(6,I2,I1)=AL(3,I2,I1)
    IF(KODBAC.NE.1)GOTO 11
    WRITE(KOUT,20)KOR(I1),(I2-1),AL(1,I2,I1),AL(2,I2,I1),AL(3,I2,I1)
1,AL(4,I2,I1),AL(5,I2,I1),AL(6,I2,I1),C(1,I1),C(2,I1),
2C(3,I1),C(4,I1),C(5,I1),C(6,I1)
    WRITE(KECRAN,20)KOR(I1),(I2-1),AL(1,I2,I1),AL(2,I2,I1),

```

```

1AL(3,I2,I1),AL(4,I2,I1),AL(5,I2,I1),AL(6,I2,I1),C(1,I1),C(2,I1),
2C(3,I1),C(4,I1),C(5,I1),C(6,I1)
20  FORMAT(1H0,20X,'CALCUL DU POTENTIEL DE BACHELET POUR LE',A10,
1/1X,'L=',I1,'AL(1)=' ,F6.2,1X,'AL(2)=' ,F6.2,1X,'AL(3)=' ,F6.2,
21X,'AL(4)=' ,F6.2,1X,'AL(5)=' ,F6.2,1X,'AL(6)=' ,F6.2/
3X,'C(1)=' ,F8.4,'C(2)=' ,F8.4,'C(3)=' ,F8.4,
4'C(4)=' ,F8.4,'C(5)=' ,F8.4,'C(6)=' ,F8.4/)
11  continue
DO 40 I=1,6
DO 30 J=1,6
IF(I .LT. 4 .AND. J .LT. 4)GO TO 23
IF(I .GT. 3 .AND. J .GT. 3)GO TO 24
S(I,J)=3.D0/8.D0*DSQRT(PI/(AL(I,I2,I1)+AL(J,I2,I1))*5)
GO TO 25
23  S(I,J)=.25D0*DSQRT(PI/(AL(I,I2,I1)+AL(J,I2,I1))*3)
GO TO 25
24  S(I,J)=15.D0/16.D0*DSQRT(PI/(AL(I,I2,I1)+AL(J,I2,I1))*7)
25  CONTINUE
IF(KOD.EQ.1)GO TO 30
WRITE (KOUT,26)I,J,S(I,J)
WRITE (KECRAN,26)I,J,S(I,J)
26  FORMAT(5X,'I=' ,I4,5X,'J=' ,I4,5X,'S(I,J)=' ,D23.17)
30  CONTINUE
40  CONTINUE
DO 70 I=1,6
DO 65 L=1,6
IF(I-L)53,56,58
53  SOM(I,L)=0.D0
IF(I .EQ. 1)GO TO 54
DO 54 K=1,I-1
SOM(I,L)=SOM(I,L)+Q(K,I)*Q(K,L)
54  CONTINUE
Q(I,L)=(S(I,L)-SOM(I,L))/Q(I,I)
GO TO 59
56  SOM(I,L)=0.D0
IF(I .EQ. 1)GO TO 57
DO 57 K=1,I-1
SOM(I,L)=SOM(I,L)+Q(K,I)*Q(K,I)
57  CONTINUE
Q(I,L)=DSQRT(S(I,L)-SOM(I,L))
GO TO 59
58  Q(I,L)=0.D0
59  CONTINUE
IF(KOD.EQ.1)GO TO 65
WRITE (KOUT,61)I,L,Q(I,L)
WRITE (KECRAN,61)I,L,Q(I,L)
61  FORMAT(5X,'I=' ,I4,5X,'L=' ,I4,5X,'Q(I,L)=' ,D23.17)
65  CONTINUE
70  CONTINUE
CALL XINVER(6,6,Q,QMOINS,MERKX,MERKY,S1,S2,IERR)
IF(IERR .NE.1)GO TO 90
WRITE(KOUT,85)
WRITE(KECRAN,85)
85  FORMAT(10X,'*****MATRICE SINGULIERE*****'/)
GO TO 999

```

```

90 DO 100 I=1,6
DO 100 J=1,6
IF(KOD.EQ.1)GO TO 100
WRITE(KOUT,97)I,J,QMOINS(I,J)
WRITE(KECRAN,97)I,J,QMOINS(I,J)
97 FORMAT(5X,'I=',I4,5X,'J=',I4,5X,'QMOINS(I,L)=' ,D23.17)
100 CONTINUE
DO 130 I=1,6
A(I,I2,I1)=0.D0
DO 115 L=1,6
A(I,I2,I1)=A(I,I2,I1)-C(L,I1)*QMOINS(I,L)
115 CONTINUE
IF(KODBAC.NE.1)GOTO 121
WRITE(KOUT,120)I,A(I,I2,I1)
WRITE(KECRAN,120)I,A(I,I2,I1)
120 FORMAT(10X,'I=',I4,10X,'A(I)=' ,D23.17)
121 continue
130 CONTINUE
R=-PAS
DO 150 K=1,NPAS
R=R+PAS
IF(K.NE.1)GO TO 300
300 CONTINUE
DELV=0.D0
DO 140 I=1,3
TERM=(A(I,I2,I1)+R*R*A(I+3,I2,I1))*DEXP(-AL(I,I2,I1)*R*R)
DELV=DELV+TERM
140 CONTINUE
X1=DSQRT(AL1CO(I1))*R
X2=DSQRT(AL2CO(I1))*R
IF(R.LT.1.D-04)GOTO 86
Y1=C1COR(I1)*ERF(X1)
Y2=C2COR(I1)*ERF(X2)
VCORE=-ZV(I1)/R*(Y1+Y2)
GOTO 87
86 VCORE=-2.D0/DSQRT(PI)*ZV(I1)*(DSQRT(AL1CO(I1))*C1COR(I1)+
1DSQRT(AL2CO(I1))*C2COR(I1))
87 CONTINUE
VL=VCORE+DELV
IF(KODBAC.NE.1)GOTO 92
WRITE(KOUT,145)R,DELV,VCORE,VL
WRITE(KECRAN,145)R,DELV,VCORE,VL
145 FORMAT(5X,'R=',F4.1,5X,'DELV=' ,F9.5,5X,'VCOEUR=' ,F12.5,5X,'VL=' ,
1F12.5)
92 CONTINUE
IF(K.NE.1)GO TO 150
R=R-.0000001D00
150 CONTINUE
170 CONTINUE
180 CONTINUE
91 READ(KIN,105,END=999)MAT1,Z1,AD1,AE1,TM1,AG1,BG1,KOR1
READ(KIN,105)MAT2,Z2,AD2,AE2,TM2,AG2,BG2,KOR2
105 FORMAT(5D15.8/2D15.8,10A2)
WRITE(KOUT,99)
WRITE(KECRAN,99)

```

```

99  FORMAT(1H ///1X,
1'*****
2*****' ///)
WRITE(KOUT,103)KOR1,KOR2
WRITE(KECRAN,103)KOR1,KOR2
103  FORMAT(1H0,20X,' POTENTIEL EFFECTIF A PARTIR DU POTENTIEL DE BAC
1LET ',//// 5X, 10A2, 10A2///)
998  CONTINUE
98   READ(KIN,101,END=999)TC,X
101  FORMAT(D15.8,D15.8)
READ(KIN,106,END=999)RINIT,RPAS,XINF,XSUP,PREC,IE,MAXL,NVR,PRECI
106  FORMAT(5D15.8/3I10,D15.8)
TK=TC+273.D0
WRITE(KOUT,102)KOR1,MAT1,Z1,TC,TK,AG1,BG1,AD1,AE1,TM1
WRITE(KECRAN,102)KOR1,MAT1,Z1,TC,TK,AG1,BG1,AD1,AE1,TM1
WRITE(KOUT,102)KOR2,MAT2,Z2,TC,TK,AG2,BG2,AD2,AE2,TM2
WRITE(KECRAN,102)KOR2,MAT2,Z2,TC,TK,AG2,BG2,AD2,AE2,TM2
102  FORMAT(1H0,50X,10A2/5X,' MAT=' ,D15.8,5X,' Z=' ,D15.8,5X,' TC=' ,D15.8,
15X,' TK=' ,D15.8,5X,' AG1=' ,D15.8,5X,' BG1=' ,D15.8/5X,' DENS= ( ' ,
2D15.8,' - ' ,D15.8,' *1.D04*(TC-' ,D15.8,' )'*1.D03' /)
DEN1=(AD1-AE1*1.D-04*(TC-TM1)) *1.D03
DEN2=(AD2-AE2*1.D-04*(TC-TM2))*1.D03
O1=MAT1/NAVO/DEN1
O2=MAT2/NAVO/DEN2
WRITE(KOUT,107)RINIT,RPAS,XINF,XSUP,PREC,IE,MAXL,NVR,PRECI
WRITE(KECRAN,107)RINIT,RPAS,XINF,XSUP,PREC,IE,MAXL,NVR,PRECI
107  FORMAT(X,' RINITIAL=' ,D15.8,X,' RPAS=' ,D15.8,X,' XINF=' ,
1D15.8/X,' XSUP=' ,D15.8,X,' PREC=' ,D15.8,X,' IE=' ,I4,' MAXL=' ,I4
2/X,' NOMBRE DE VALEURS DE R:' ,I4,X,' PRECI=' ,D15.8/)
WRITE(KOUT,1274)
WRITE(KECRAN,1274)
1274  FORMAT(1H1,X,
1'RESULTATS OBTENUS PAR INTERPOLATION DES VOLUMES ATOMIQUES DES CO
2PS PURS' /)
C1=1.-X
C2=X
MATMOY=C1*MAT1+C2*MAT2
ZMOY=C1*Z1+C2*Z2
VMOY=C1*O1+C2*O2
N=1.D0/VMOY
DENS=MATMOY*N/NAVO
KF3=3.D0*PI*PI*ZMOY/VMOY
KF=KF3**U
WRITE(KOUT,110)X,ZMOY,MATMOY,DENS,VMOY,KF,TC,TK,N
WRITE(KECRAN,110)X,ZMOY,MATMOY,DENS,VMOY,KF,TC,TK,N
110  FORMAT(1H0,5X,' CONC=' ,D15.8,5X,' ZMOY=' ,D15.8,5X,' MATMOY=' ,D15.8,
1,' DENS=' ,D15.8,5X,' VMOY=' ,D15.8/5X,' KF=' ,D15.8,5X,' TC=' ,
2D15.8,5X,' TK=' ,D15.8,/5X,' N=' ,D15.8,5X,/)

RS=(VMOY/ZMOY*3.D0/4.D0/PI/AB/AB/AB)**(1.D0/3.D0)
*****

```



```

      GOTO(1001,1002,1003,1004,1005,1006)KDIE
1001 WRITE(4,1011)
      WRITE(6,1011)
1011 FORMAT(10X,'FONCTION DIELECTRIQUE DE HARTREE')
      GOTO 1020
1002 WRITE(4,1012)
      WRITE(6,1012)
1012 FORMAT(10X,'FONCTION DIELECTRIQUE DE VASHISTA-SINGWI')
      call fita(6,XRS,AVS,YAVS)
      CALL FITID(6,XRS,AVS,YAVS,RS,AA,YAA)
      call fita(6,XRS,BVS,YBVS)
      CALL FITID(6,XRS,BVS,YBVS,RS,B,YB)
      GOTO 1020
1003 WRITE(4,1013)
      WRITE(6,1013)
1013 FORMAT(10X,'FONCTION DIELECTRIQUE DE ICHIMARU-UTSUMI')
      GOTO 1020
1004 WRITE(4,1014)
      WRITE(6,1014)
1014 FORMAT(10X,'FONCTION DIELECTRIQUE DE S.S.T.L.')
      call fita(6,XRS,ASSTL,YASSTL)
      CALL FITID(6,XRS,ASSTL,YASSTL,RS,AA,YAA)
      call fita(6,XRS,BSSTL,YBSSTL)
      CALL FITID(6,XRS,BSSTL,YBSSTL,RS,B,YB)
      GOTO 1020
1005 WRITE(4,1015)
      WRITE(6,1015)
1015 FORMAT(10X,'FONCTION DIELECTRIQUE DE TOIGO-WOODRUFF')
      ntv=46
      call fita(ntv,xtv,ytv,yytv)
      GOTO 1020
1006 WRITE(4,1016)
      WRITE(6,1016)
1016 FORMAT(10X,'FONCTION DIELECTRIQUE DE S.T.L.S.')
1020 CONTINUE

```

```

      IF(KODVQ.NE.1)GOTO 12
      WRITE(KOUT,14)
      WRITE(KECRAN,14)
14  FORMAT(10X,'Q',18X,'V1',18X,'V2',18X,'F11',18X,'F12',18X,'F22',//
12  continue
      L1=.1D07
      L2=2.D0*KF
      QPAS=(L2-L1)/20.D0
      QX=L1
      IF(KODVQ.NE.1)GOTO 17
      DO 15 I=1,101
      CALL VIJBAC(QX,V1,V2,F11,F12,F22)
      WRITE(KECRAN,16)QX,V1,V2,F11,F12,F22
      WRITE(KOUT,16)QX,V1,V2,F11,F12,F22
16  FORMAT(6(5X,D15.8))
      QX=QX+QPAS
15  CONTINUE
17  CONTINUE
      R=RINIT

```

```
DO 2000 I=1,NVR
```

```
C*****
V11=0.D0
V12=0.D0
V22=0.D0
v111=Z1*Z1/R
v112=0.D0
xinfl=xinf
DO 3000 IX=1,100
XSUP=PI/R*FLOAT(IX)
prel=prec/(2.D0*Z1*Z1/PI/R)
max1=max1
FONC1=2.D0*Z1*Z1/PI/R*DRBHV1(F1,XINF1,XSUP,PRE1,IE,MAX1)
V112=V112+FONC1
c WRITE(KOUT,3100)R,FONC1,V112,PRE1,MAX1
c WRITE(KECRAN,3100)R,FONC1,V112,PRE1,MAX1
c 3100 FORMAT(X,'R=',D13.6,X,'FONC=',D13.6,X,'V=',D13.6,X,'PRE=',D13.6,
c IX,'MAX1=',I2)
XINF1=XSUP
IF(DABS(FONC1).LT.DABS((V112*PRECI)))GOTO 3010
3000 CONTINUE
3010 CONTINUE
V11=V111-V112
write(kout,2010)r,v111,v112,v11
write(kecran,2010)r,v111,v12,v11
2010 FORMAT(X,'R=',D15.8,X,'V111=',D15.8,X,'V112=',D15.8,X,'V11=',
1d15.8)
V121=Z1*Z2/R
V122=0.D0
xinfl=xinf
DO 3020 IX=1,100
XSUP=PI/R*FLOAT(IX)
prel=prec/(2.D0*Z1*Z2/PI/R)
max1=max1
FONC2=2.D0*Z1*Z2/PI/R*DRBHV1(F2,XINF1,XSUP,PRE1,IE,MAX1)
V122=V122+FONC2
c WRITE(KOUT,3100)R,FONC2,V122,PRE1,MAX1
c WRITE(KECRAN,3100)R,FONC2,V122,PRE1,MAX1
XINF1=XSUP
IF(DABS(FONC2).LT.DABS((V122*PRECI)))GOTO 3030
3020 CONTINUE
3030 CONTINUE
V12=V121-V122
write(kout,2011)r,v121,v122,v12
write(kecran,2011)r,v121,v122,v12
2011 FORMAT(X,'R=',D15.8,X,'V121=',D15.8,X,'V122=',D15.8,X,'V12=',
1d15.8)
V221=Z2*Z2/R
V222=0.D0
XINF1=XINF
DO 3040 IX=1,100
XSUP=PI/R*FLOAT(IX)
prel=prec/(2.D0*Z2*Z2/PI/R)
max1=max1
FONC3=2.D0*Z2*Z2/PI/R*DRBHV1(F3,XINF1,XSUP,PRE1,IE,MAX1)
```

```

V222=V222+FONC3
c   WRITE(KOUT,3100)R,FONC3,V222,PRE1,MAX1
c   WRITE(KECRAN,3100)R,FONC3,V222,PRE1,MAX1
XINF1=XSUP
IF(DABS(FONC3).LT.DABS((V222*PRECI)))GOTO 3050
3040 CONTINUE
3050 CONTINUE
V22=V221-V222
write(kout,2012)r,v221,v222,v22
write(kecran,2012)r,v221,v222,v22
2012 FORMAT(X,'R=',D15.8,X,'V221=',D15.8,X,'V222=',D15.8,X,'V22=',
1d15.8)
*****
R=R+RPAS
2000 CONTINUE
GOTO 98
999 CALL DATE(DATFIN)
CALL TIME(TEMFIN)
DUREE=SECNDS(DEBUT)
WRITE(KOUT,9006)DATFIN,TEMFIN,DUREE
WRITE(KECRAN,9006)DATFIN,TEMFIN,DUREE
9006 FORMAT(1H0,5X,'FIN DU CALCUL:',X,A10,2X,A10,X,'DUREE DU CALCUL='
1,F10.2,'SECONDES'/)
CALL EXIT
END

```

```
DOUBLE PRECISION FUNCTION F1(Qq)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
COMMON/AVECF/R,a0
q=qq/a0
CALL VIJBAC(Q,V1,V2,F11,F12,F22)
F1=F11*DSIN(QQ*R)/QQ
RETURN
END
```

```
DOUBLE PRECISION FUNCTION F2(Qq)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
COMMON/AVECF/R,a0
q=qq/a0
CALL VIJBAC(Q,V1,V2,F11,F12,F22)
F2=F12*DSIN(QQ*R)/QQ
RETURN
END
```

```
DOUBLE PRECISION FUNCTION F3(Qq)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
COMMON/AVECF/R,a0
q=qq/a0
CALL VIJBAC(Q,V1,V2,F11,F12,F22)
F3=F22*DSIN(QQ*R)/QQ
RETURN
END
```

```

SUBROUTINE VIJBAC(Q,V1,V2,F11,F12,F22)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION K,KF,KS2,kfq,kfq2
DIMENSION AL(6,4,2),LMAX(2),AL1CO(2),AL2CO(2),C1COR(2),C2COR(2),
1A(6,4,2),ZV(2),w(2)
COMMON X,KF,PI,VMOY,AB,ZMOY,RYD
COMMON/POTBAC/A,AL,LMAX,AL1CO,AL2CO,C1COR,C2COR,ZV,KDIE,AA,B
IF(Q.GT.1.D06)GO TO 20

```

```
Q=1.D06
```

```
20 CONTINUE
```

```
X1=Q/(2.D0*KF)
```

```
IF(X1-0.D0)13,13,12
```

```
12 IF(X1-1.D0)15,14,15
```

```
13 FX=1.D0
```

```
GO TO 16
```

```
14 FX=.5D0
```

```
GO TO 16
```

```
15 GX=DABS((1.D0+X1)/(1.D0-X1))
```

```
FX=.5D0+(1.D0-X1*X1)/(4.D0*X1)*DLOG(GX)
```

```
16 CONTINUE
```

```
KS2=4.D0*KF/PI/AB
```

```
DD=KS2*FX/Q/Q
```

```
RS=(VMOY/ZMOY*3.D0/4.D0/PI/AB/AB/AB)**(1.D0/3.D0)
```

```
-----
GOTO(1001,1002,1003,1004,1005,1006)KDIE
```

```
1001 G=0.D0
```

```
!HARTREE
```

```
GOTO 1020
```

```
1002 G=AA*(1.D0-DEXP(-B*Q*Q/KF/KF))
```

```
CALL GQVS(RS,AA,B)
```

```
!VASHISTA-SINGWI
```

```
GOTO 1020
```

```
1003 CALL GICHI(Q,KF,RS,G)
```

```
!ICHIMARU
```

```
GOTO 1020
```

```
1004 G=AA*(1.D0-DEXP(-B*Q*Q/KF/KF))
```

```
CALL SSTL(RS,AA,B)
```

```
!SINGWI SJOLANDER TOSI LAND
```

```
GOTO 1020
```

```
1005 CALL QTV(Q,KF,G)
```

```
!TOIGO WOODRUFF
```

```
GOTO 1020
```

```
1006 QKF=Q/KF
```

```
!SINGWI TOSI LAND SJOLANDER
```

```
QKF2=QKF*QKF
```

```
KFQ=KF/Q
```

```
KFQ2=KFQ*KFQ
```

```
G=9.D0/32.D0*QKF2*(2.D0/105.D0*(24.D0*KFQ2+44.D0+QKF2)-2.D0*
```

```
1*KFQ*(8.D0/35.D0*KFQ2-4.D0/15.D0+1.D0/6.D0*QKF2)*DLOG(DABS((.5D0
```

```
2*QKF+1.D0)/(.5D0*QKF-1.D0))+QKF2*(1.D0/210.D0*QKF2-2.D0/15.D0)
```

```
3*DLOG(DABS((Q*Q-KF*KF*4.D0)/Q/Q)))
```

```
1020 CONTINUE
```

```
-----
EPS=1.D0+(1.D0-G)*DD
```

```
VMOI=VMOY/AB/AB/AB
```

```
QQ=q*ab
```

```

C*****
DO 31 I1=1,2
I4=LMAX(I1)+1
TERM2=0.D00
TERM3=0.D00
term31=0.D00
term32=0.D00
term33=0.D00
term34=0.D00
term35=0.D00
term36=0.D00
QF=KF*AB
QF2=QF*QF
TERM1=-4*PI*ZMOY/VMOI/QQ/QQ*(C1COR(I1)*DEXP(-QQ*QQ/4.DO
1/AL1CO(I1))+C2COR(I1)*DEXP(-QQ*QQ/4.DO/AL2CO(I1)))
DO 30 I3=1,3
TERM21=DEXP(-QQ*QQ/4.DO/AL(I3,I4,I1))/AL(I3,I4,I1)**1.5D00
1*(A(I3,I4,I1)+A(I3+3,I4,I1)/AL(I3,I4,I1)*(1.5D0-
2QQ*QQ/4.DO/AL(I3,I4,I1)))
TERM2=TERM2+PI**1.5D00/VMOI*TERM21
IF(QQ.GT.2.DO*QF) GOTO 24
g1=A(I3,1,I1)*FI(QF2,AL(I3,1,I1))
g2=A((I3+3),1,I1)*FJ(QF2,AL((I3+3),1,I1))
g3=-A(I3,I4,I1)*FI(QF2,AL(I3,I4,I1))
g4=-A((I3+3),I4,I1)*FJ(QF2,AL((I3+3),I4,I1))
g5=A(I3,2,I1)*FI1(QF2,AL(I3,2,I1))
g6=A((I3+3),2,I1)*FJ1(QF2,AL((I3+3),2,I1))
g7=-A(I3,I4,I1)*FI1(QF2,AL(I3,I4,I1))
g8=-A((I3+3),I4,I1)*FJ1(QF2,AL((I3+3),I4,I1))
term31=TERM31+4.DO*PI/VMOI*(G1+G2)
term32=TERM32+4.DO*PI/VMOI*(G3+G4)
U=(1.DO-2.DO*X1*X1)
term33=TERM33+12.DO*PI/VMOI*U*(G5+G6)
term34=TERM34+12.DO*PI/VMOI*U*(G7+G8)
IF(I4.LT.4)GOTO 25
g9=A(I3,3,I1)*FI2(QF2,AL(I3,3,I1))
g10=A((I3+3),3,I1)*FJ2(QF2,AL((I3+3),3,I1))
g11=-A(I3,I4,I1)*FI2(QF2,AL(I3,I4,I1))
g12=-A((I3+3),I4,I1)*FJ2(QF2,AL((I3+3),I4,I1))
term35=TERM35+10.DO*PI/VMOI*(3.DO*U*U-1.DO)*(G9+G10)
term36=TERM36+10.DO*PI/VMOI*(3.DO*U*U-1.DO)*(G11+G12)
go to 25
24
g1=A(I3,1,I1)*FBI(QF,QQ,AL(I3,1,I1))
g2=A((I3+3),1,I1)*FBJ(QF,QQ,AL((I3+3),1,I1))
g3=-A(I3,I4,I1)*FBI(QF,QQ,AL(I3,I4,I1))
g4=-A((I3+3),I4,I1)*FBJ(QF,QQ,AL((I3+3),I4,I1))
g5=A(I3,2,I1)*FBI1(QF,QQ,AL(I3,2,I1))
g6=A((I3+3),2,I1)*FBJ1(QF,QQ,AL((I3+3),2,I1))
g7=-A(I3,I4,I1)*FBI1(QF,QQ,AL(I3,I4,I1))
g8=-A((I3+3),I4,I1)*FBJ1(QF,QQ,AL((I3+3),I4,I1))
term31=TERM31+4.DO*PI/VMOI*(G1+G2)
term32=TERM32+4.DO*PI/VMOI*(G3+G4)
term33=TERM33-12.DO*PI/VMOI*(G5+G6)
term34=TERM34-12.DO*PI/VMOI*(G7+G8)
IF(I4.LT.4)GOTO 25

```

```

g9=A(I3,3,I1)*FBI2(QF,QQ,AL(I3,3,I1))
g10=A((I3+3),3,I1)*FBJ2(QF,QQ,AL((I3+3),3,I1))
g11=-A(I3,I4,I1)*FBI2(QF,QQ,AL(I3,I4,I1))
g12=-A((I3+3),I4,I1)*FBJ2(QF,QQ,AL((I3+3),I4,I1))
term35=TERM35+10.D0*PI/VM01*2.D0*(G9+G10)
term36=TERM36+10.D0*PI/VM01*2.D0*(G11+G12)
25 TERM3=TERM31+TERM32+TERM33+TERM34+TERM35+TERM36
w(i1)=(term1+term2+term3)/eps*2.D0*RYD
30 CONTINUE
xnorm=(4*PI*ZM0Y/VM01/QQ/QQ)
31 CONTINUE
V1=w(1)
V2=w(2)
F11=V1/2.D0/RYD*V1/2.D0/RYD/XNORM/XNORM*(EPS-1.D0)*EPS/(1.D0-G)
F12=V1/2.D0/RYD*V2/2.D0/RYD/XNORM/XNORM*(EPS-1.D0)*EPS/(1.D0-G)
F22=V2/2.D0/RYD*V2/2.D0/RYD/XNORM/XNORM*(EPS-1.D0)*EPS/(1.D0-G)
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FBJ2(QF,QQ,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
A=DEXP(-(DABS(QF-QQ)-QF)**2/4.DO/AL)
B=DEXP(-(QF+DABS(QF-QQ))**2/4.DO/AL)
E=DSQRT(PI/AL)
G=QF+DABS(QF-QQ)
H=DABS(QF-QQ)-QF
FBJ2=3.DO*E/4.DO*(B-A)*(6.DO*AL/QF/QF/DABS(QF-QQ)/DABS(QF-QQ)
1+1.DO/DABS(QF-QQ)/DABS(QF-QQ)+1.DO/QF/QF)*1.DO/QF/DABS(QF-QQ)
2+9.DO*E/4.DO/QF/QF/DABS(QF-QQ)/DABS(QF-QQ)*(A+B)+3.DO*E/8.DO
3/QF/QF/DABS(QF-QQ)/AL*(G*B+H*A)+3.DO*E/8.DO/QF/DABS(QF-QQ)
4/DABS(QF-QQ)/AL*(G*B-H*A)+1.DO*E/16.DO/AL/AL/QF/DABS(QF-QQ)
5*((2.DO*AL-H*H)*A-(2.DO*AL-G*G)*B)
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FBI2(QF,QQ,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
A=DEXP(-(DABS(QF-QQ)-QF)**2/4.DO/AL)
B=DEXP(-(QF+DABS(QF-QQ))**2/4.DO/AL)
E=DSQRT(PI/AL)
FBI2=E/4.DO*(A-B)*(1.DO/QF/DABS(QF-QQ)+12.DO/QF/
1QF/QF/DABS(QF-QQ)/DABS(QF-QQ)/DABS(QF-QQ)*AL*AL)-E
2/2.DO*(A+B)*3.DO*AL/QF/QF/DABS(QF-QQ)/DABS(QF-QQ)
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FBJ(QF,QQ,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
FBJ=1.DO/QF/DABS(QF-QQ)/2.DO*DSQRT(PI)*(2.DO*AL-(QF-DABS(QF-
1QQ))**2)*DEXP(-(QF-DABS(QF-QQ))**2/4.DO/AL)/8.DO/AL**2.5D0
2-1.DO/QF/DABS(QF-QQ)/2.DO*DSQRT(PI)*(2.DO*AL-(QF+DABS(QF
3-QQ))**2)*DEXP(-(QF+DABS(QF-QQ))**2/4.DO/AL)/8.DO/AL**2.5D0
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FBI(QF,QQ,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
FBI=1.DO/QF/DABS(QF-QQ)/4.DO*DSQRT(PI/AL)*(DEXP(-(QF-DABS(QF
1-QQ))**2/4.DO/AL)-DEXP(-(QF+DABS(QF-QQ))**2/4.DO/AL))
RETURN
END

```



```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FBI1(QF,QQ,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
A=DEXP(-(DABS(QF-QQ)-QF)**2/4.D0/AL)
B=DEXP(-(QF+DABS(QF-QQ))**2/4.D0/AL)
FBI1=1.D0/QF/DABS(QF-QQ)/4.D0*DSQRT(PI/AL)*(A+B)-1.D0/QF
1/DABS(QF-QQ)/QF/DABS(QF-QQ)/2.D0*AL*DSQRT(PI/AL)*(A-B)
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FBJ1(QF,QQ,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
A=DEXP(-(DABS(QF-QQ)-QF)**2/4.D0/AL)
B=DEXP(-(QF+DABS(QF-QQ))**2/4.D0/AL)
E=DSQRT(PI/AL)
G=QF+DABS(QF-QQ)
H=DABS(QF-QQ)-QF
FBJ1=1.D0/QF/DABS(QF-QQ)/QF/DABS(QF-QQ)/4.D0*E*(A-B)+1.D0
1/QF/DABS(QF-QQ)/AL/AL/16.D0*E*(B*(2.D0*AL-G*G)+A*(2.D0*AL
2-H*H))-1.D0/QF/DABS(QF-QQ)/DABS(QF-QQ)/AL/8.D0*E*(G*B+H*A)
3-1.D0/QF/QF/DABS(QF-QQ)/AL/8.D0*E*(G*B-H*A)
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FJ2(QF2,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
FJ2=4.5D0/QF2*DSQRT(PI*AL)/QF2*(-1.D0+DEXP(-QF2/AL))/QF2
1+0.75D0/QF2*(1.D0+5.D0*DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI/AL)/QF2+1.D0/QF2*
2(1.D0+11.D0*DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI/AL/AL/AL)/8.D0+0.25D0*
3DSQRT(PI)/AL**2.5D0*DEXP(-QF2/AL)
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FI2(QF2,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
FI2=3.D0/QF2*DSQRT(PI*AL*AL*AL)/QF2*(1.D0-DEXP(-QF2/AL))/QF2
1-1.5D0/QF2*(1.D0+DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI*AL)/QF2+0.25D0/QF2*
2(1.D0-DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI/AL)
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FI1(QF2,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
FI1=1.D0/4.D0/QF2*(1.D0+DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI/AL)
1-1.D0/QF2/2.D0*(1.D0-DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI*AL)/QF2
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FJ1(QF2,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
FJ1=1.D0/4.D0/QF2*(1.D0-DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI/AL)/QF2
1+1.D0/QF2/8.D0/AL**2.5D0*(AL-2.D0*QF2)*DEXP(-QF2/AL)*DSQRT(PI)
2+DSQRT(PI)/8.D0/QF2/AL**1.5D0*(1.D0-4.D0*DEXP(-QF2/AL))
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FI(QF2,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
FI=1.D0/4.D0/QF2*(1.D0-DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI/AL)
RETURN
END

```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION FJ(QF2,AL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PI=3.141592653589793238462643D00
FJ=1.D0/8.D0/QF2*(1.D0-DEXP(-QF2/AL))*DSQRT(PI/AL**3)
1+DEXP(-QF2/AL)/4.D0*DSQRT(PI/AL**5)
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE XINVER(NDIM,N,A,B,MERKX,MERKY,S1,S2,IERR)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
DIMENSION A(NDIM,N),B(NDIM,N),MERKX(N),MERKY(N)
IERR=1
DO 100 I=1,N
MERKX(I)=0
MERKY(I)=0
DO 100 L=1,N
100 B(I,L)=A(I,L)
DO 400 I=1,N
PIVOT=0.0D0
DO 200 IX=1,N
IF(MERKX(IX).NE.0) GO TO 200
DO 180 IY=1,N
IF(MERKY(IY).NE.0) GO TO 180
IF(DABS(B(IX,IY)).LE.DABS(PIVOT)) GO TO 180
PIVOT=B(IX,IY)
INDX=IX
INDY=IY
180 CONTINUE
200 CONTINUE
IF (DABS(PIVOT).LE.0.0D0) GO TO 770
MERKX(INDX)=INDY
MERKY(INDY)=INDX
B(INDX,INDY)=1.0D0/PIVOT
DO 300 L=1,N
IF(L.EQ.INDX) GO TO 300
DO 280 M=1,N
IF(M.EQ.INDY) GO TO 280
B(L,M)=B(L,M)-B(L,INDY)*B(INDX,M)/PIVOT
280 CONTINUE
300 CONTINUE
DO 390 IX=1,N
IF(IX.NE.INDX) B(IX,INDY)=B(IX,INDY)/PIVOT
390 CONTINUE
DO 400 IY=1,N
IF(IY.NE.INDY) B(INDX,IY)=-B(INDX,IY)/PIVOT
400 CONTINUE
DO 500 I=2,N
IX=I-1
IF(MERKX(IX).EQ.IX) GO TO 500
DO 450 J=1,N
IY=J
IF(MERKX(IY).EQ.IX) GO TO 460
450 CONTINUE
460 DO 490 K=1,N
HILF=B(IX,K)
B(IX,K)=B(IY,K)
490 B(IY,K)=HILF
MERKX(IY)=MERKX(IX)
500 MERKX(IX)=IX
DO 600 I=2,N
IX=I-1
IF(MERKY(IX).EQ.IX) GO TO 600

```

```
DO 550 J=I,N
  IY=J
  IF(MERKY(IY).EQ.IX) GO TO 560
550 CONTINUE
560 DO 590 K=1,N
    HILF=B(K,IX)
    B(K,IX)=B(K,IY)
590 B(K,IY)=HILF
    MERKY(IY)=MERKY(IX)
600 MERKY(IX)=IX
    S1=0.0D0
    S2=0.0D0
    DO 720 I=1,N
      DO 720 K=1,N
        CIK=0.0D0
        DO 710 L=1,N
910 CIK=CIK+A(I,L)*B(L,K)
          IF(I.EQ.K) S1=S1+CIK
720 S2=S2+CIK
        S2=S2-S1
        S1=S1/FLOAT(N)
        IERR=0
770 RETURN
    END
```

```

DOUBLE PRECISION FUNCTION ERF(X)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
P=.3275911D00
A1=.254829592D00
A2=-.284496736D00
A3=1.421413741D00
A4=-1.453152027D00
A5=1.061405429D00
T=1.D00/(1.D00+P*X)
T2=T*T
T4=T2*T2
ERF=1.D00-(A1*T+A2*T2+A3*T*T2+A4*T4+A5*T*T4)*DEXP(-X*X)
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE GICHI(Q,KF,RS,G)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION KF
PI=3.141592653589793238462643D00
AICHI=.029D0
B0=.0621814D0
B1=9.81379D0
B2=2.82224D0
B3=.736411D0
ALPHA=.52106176D0
C1=.06250D0
C2=.0026042D0
C3=5.4244D-05
C4=6.7986D-07
C5=5.4830D-09
C6=4.1909D-11
X=DSQRT(RS)
Z1=4.D0*DSQRT(ALPHA*RS/PI)
G0=1.D0/8.D0/(.5D0+C1*Z1**2+C2*Z1**4+C3*Z1**6+C4*Z1**8+C5*Z1**10+
1C6*Z1**12)
GAMMA1=(6.D0+12.D0*B1*X+(8.D0*B2+6.D0*B1*B1)*X**2+
1(9.D0*B3+7.D0*B1*B2)*X**3+8.D0*B1*B3*X**4)
GAMMA2=B0*PI*ALPHA*X**2
GAMMA3=48.D0*(1.D0+B1*X+B2*X**2+B3*X**3)**2
GAMMA=GAMMA1*GAMMA2/GAMMA3+.25D0
BICHI=.5625D0*GAMMA-.046875D0*(1.D0-G0)-16.D0/15.D0*AICHI
CICHI=.5625D0*(1.D0-G0)-.75D0*GAMMA-3.2D0*AICHI
ETA=Q/KF
G2=AICHI*ETA**4+BICHI*ETA**2+CICHI
1F(DABS((ETA-2.D0)/2.D0)-1.D-6) 1410,1410,1400
1410 G=G2
GO TO 205
1400 G3=DLOG(DABS((2.D0+ETA)/(2.D0-ETA)))
G4=G3/4.D0/ETA*(4.D0-ETA**2)
G5=AICHI*ETA**4+(BICHI+8.D0/3.D0*AICHI)*ETA**2-CICHI
G=G2+G4*G5
205 CONTINUE
RETURN
END

```

```
SUBROUTINE QTV(XK,XKF,CTV)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION K
dimension xtv(46),ytv(46),yytv(46)
common/avectv/xtv,ytv,yytv
K=XK/XKF
ntv=46
call fitid(ntv,xtv,ytv,yytv,k,gtv,ygtv)
return
END
```

BIBLIOGRAPHIE

- (1) BACHELET G.B., HAMANN D.R. et SCHLÜTER M.; Phys. Rev. B 26 (1982) 4199.
- (2) ANIMALU A. O. E. ; Phil. Mag. 11 (1965) 379.
- (3) ZIMAN J. M. ; Principles of the theory of Solids (1972). Editeur : Cambridge Univ. Press.
- (4) ABARENKOV I. V. et HEINE V. ; Phil. Mag. 12 (1965) 529.
- (5) HEINE V. et ABARENKOV I. V. ; Phil. Mag. 9 (1964) 451.
- (6) ANIMALU A. O. E. et HEINE V. ; Phil. Mag. 12 (1965) 1249.
- (7) ANIMALU A. O. E. ; Phys. Rev. B 8 (1973) 3542.
- (8) SHAW R. W. et HARRISON W. A. ; Phys. Rev. 163 (1967) 604.
- (9) SHAW R. W. ; Phys. Rev. B 5 (1972) 4742.
- (10) SO C. B. , MOORE R. A. et WANG S. ; J. Phys. F 8 (1978) 785.
- (11) AUSTIN B. J. , HEINE V. et SHAM L. J. ; Phys. Rev. 127 (1962) 276.
- (12) HEINE V. et WEAIRE D. ; Solid State Physics Vol. 24 1970 (Academic press, New-York et London).
- (13) SHAM L. J. ; Proc. Phys. Soc. 78 (1961) 895.
- (14) HAFNER J. ; Phys. rev. B 15 (1977) 617.
- (15) HAM F. S. ; Solid State Physics 1 (1955) 127. Editeur : SEITZ et TURNBULL.
- (16) SHAW R. W. ; Ph. D. Thesis : Reformulation of the model potential theory of Simple metals. (1968) Standford University.
- (17) ASHCROFT N. W. ; Phys. Lett. 23 (1966) 48.
- (18) ASHCROFT N. W. ; J. Phys. C 1 (1968) 232.

- (19) SHAW R.W. ; Phys. Rev. 174 (1968) 769.
- (20) HALLERS J.J., MARIEN T. et VAN DER LUGT W. ; Physica 78 (1974) 259.
- (21) WOO C.H., WANG S. et MATSUURA M. ; J. Phys. F 5 (1975) 1836.
- (22) WANG S., LAI S.K. et SO C.B. ; J. Phys. F 10 (1980) 445.
- (23) WANG S., LAI S.K. ; J. Phys. F 10 (1980) 2717.
- (24) LINHARDT J. ; Kgl. Danske Videnskab. Selskab. Mat. Fys. Medd. 28 (1954) 8.
- (25) SHAW R.W. ; J. Phys. C 2 (1969) 2350.
- (26) SINGWI K.S., SJÖLANDER A., TOSI M.P. et LAND R.H. ; Phys. Rev. B 1 (1970) 1044.
- (27) VASHISHTA P. et SINGWI K.S. ; Phys. Rev. B 6 (1972) 875.
- (28) TOIGO F. et WOODRUFF T.O. ; Phys. Rev. B 2 (1970) 3958.
- (29) SINGWI K.S., TOSI M.P., LAND R.H. et SJÖLANDER A. ; Phys. Rev. 176 (1968) 589.
- (30) ICHIMARU S. et UTSUMI K. ; Phys. Rev. B 24 (1981) 7385.
- (31) HARRISON W.A. ; Pseudopotentials in the theory of metals (1966). Ed. Benjamin, New-York.
- (32) SHAW R.W. ; J. Phys. C 2 (1969) 2335.
- (33) SHAW R.W. ; J. Phys. C 3 (1970) 1140.
- (34) HAMANN D.R., SCHLÜTER M. et CHIANG C. ; Phys. Rev. Vol. 43 (1979) 1494.
- (35) HAFNER J. ; From Hamiltonians to Phase Diagrams (The Electronic and Statistical-Mechanical Theory of sp-Bonded Metals and Alloys). Vol. 70 (1987). Editeur : FULDE P. (Springer-Verlag Berlin Heidelberg New-York London Paris Tokyo).
- (36) SO C.B., MOORE R.A. et WANG S. ; J. Phys. F 8 (1978) 785.

- (37) ABRAMOWITZ M. et STEGUN I.A. ; Handbook of mathematical functions (1972). Dover publications, New-York.
- (38) ESE O. et REISSLAND J.A. ; J. Phys. F 3 (1973) 2066.
- (39) CRAWLEY A.F. ; Int. Met. Rev. 19 (1974) 32.
- (40) KOUBAA N. et GASSER J.G. ; Analytical local screened form factor obtained from Bachelet, Hamann and Schluter pseudopotential. Accepté par J. Non-Crystalline Solids (1989).
- (41) FABER T.E et ZIMAN J.M. ; Phil. Mag. 11 (1965) 153.
- (42) WASEDA Y. ; The Structure of non Crystalline materials (1980). Editeur : Mc Graw. Hill int. Book Compagny.
- (43) PERCUS J.D. et YEVICK G.W. ; Phys. Rev. 110 (1958) 1.
- (44) ASCHROFT N.W. et LEKNER J. ; Phys; Rev. 145 (1966) 83.
- (45) MARCH N.H. Liquid metals. Inst. Ser. Monogr. in National Phylosophy. Vol. 15 (1968) Editeur : Ter Haar D. Pergamon Press.
- (46) BRETONNET J.L. ; Thèse de Doctorat d'Etat (1982). Université de Metz.
- (47) ASHCROFT N.W. et LANGRETH D.C. ; Phys. Rev. 156 (1967) 685.
- (48) BHATIA A.B. et THORNTON D.E. ; Phys. Rev. B 2 (1970) 3004.
- (49) VAN ZYTVELD J.B. ; J. Phys. F 5 (1975) 506.
- (50) HENNEPHOF J., VAN DER LUGT W. et WRIGHT G.W. ; Physica 52 (1971) 279.
- (51) VAN DER LUGT W., DEVLIN J.F., HENNEPHOF J. et LEENSTRA M.R. ; The properties of liquid metals (1973) p. 345. Ed. TAKEUCHI S. Taylor et Francis, London.
- (52) CUSACK N.E. ; Rep. Progr. Phys. 26 (1963) 361.
- (53) FEITSMA P.D., LEE T. et VAN DER LUGT W. ; Physica B 93 (1978) 52.
- (54) CUBIOTTI R. et STANCANELLI A. ; J. Phys. F 5 (1975) L 129.

- (55) GASSER J.G. ; Thèse de Doctorat d'Etat (1982). Université de Metz.
- (56) MAYOUFI M. Thèse (1985). Université de Metz.
- (57) ANNO L. ; Mémoire d'Ingénieur CNAM (1985). Université de Metz.
- (58) KOUBAA N. , ANNO L. et GASSER J.G. ; Electronic properties of liquid gallium-germanium alloys. Accepté par J. Non-Crystalline Solids (1989).
- (59) BATH A. ; Thèse de Doctorat d'Etat (1983). Université de Metz.
- (60) COHEN M.H. ; in Metallic Solid Solutions (1963). Ed FRIEDEL J. et GUINIER A. (BENJAMIN W.A., Inc, New-York).
- (61) SHYU Wei-Mei et GASPARI G.D. ; Phys. Rev. 163 (1967) 667.
- (62) SHYU Wei-Mei et GASPARI G.D. ; Phys. Rev. 170 (1968) 687.
- (63) KAHL G. et HAFNER J. Phys. Chem. 156 (1988) 645.
- (64) KAHL G. et HAFNER J. ; Sol. St. Comm. 49 (1984) 1125.
- (65) BRETONNET J.L. et REGNAUT C. ; Phys Rev. B 31 (1985) 5071.
- (66) REGNAUT C. et BRETONNET J.L. ; Phys. Rev. B 38 (1988) 10922.
- (67) FRIEDEL J. ; Phil. Mag. 43 (1952) 153.
- (68) EDWARDS D.J. et JARZYNSKI J. ; J. Phys. C 5 (1972) 1745.
- (69) KOUBAA N. et GASSER J.G. ; Interatomic potentials of alloys obtained from non local model potentials. Accepté par J. Non-Crystalline Solids (1989).
- (70) GRADSHTEYN I. S. et RYSHIK I.M. ; Tables of integrals series and products (1965). Academic Press. New-York et London.
- (71) MESSIAH A. ; Mécanique Quantique (1964). Editeur : DUNOD, Paris.