

ВЛИЯНИЕ РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ СОЕДИНЕНИЯ AgCd

В. И. Анисимов, М. А. Коротин, Э. З. Курмаев

Для расчета электронной структуры неупорядоченных сплавов используется вариант метода средней t -матрицы (АТА-2) в приближении атомных сфер (АСА—ККР). Для изучения влияния разупорядочения на электронную структуру сплавов проведен расчет соединения AgCd в упорядоченной (CsCl-структура) и неупорядоченной (ОЦК твердый раствор) фазах. Результаты используются для объяснения изменений в фотоэлектронном спектре данного соединения при разупорядочении.