

ЭФФЕКТ НЕЛОКАЛЬНОСТИ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА ПРИ РАСЧЕТЕ ПАРАМЕТРОВ МЕЖДОЛИННОГО РАССЕЯНИЯ НА ФОНОНАХ В КРЕМНИИ

А.Ф.Ревинский

Брестский государственный педагогический институт,
Брест, Белоруссия
(Поступило в Редакцию 17 декабря 1994 г.)

Известно [1], что ныне существующие псевдопотенциальные методы расчета электронного энергетического спектра кристаллов из первых принципов используют в своей основе сохраняющие норму псевдопотенциалы, которые по своей природе являются нелокальными. При этом вклад нелокальной части псевдопотенциала в величину энергетических зазоров, как правило, составляет несколько процентов. Вместе с тем полуэмпирические расчеты [2,3] показали, что эффект нелокальности псевдопотенциала оказывает достаточно большое влияние на величину параметров междолинного рассеяния электронов проводимости на фононах и составляет вклад порядка 20÷30%. Поскольку междолинное рассеяние электронов во многом определяет кинетические свойства кристаллов с многодолинным зонным спектром, представляет интерес провести последовательный расчет констант междолинного рассеяния из первых принципов. Проведение подобного рода расчетов оправдано еще и тем, что они в отличие от полуэмпирических подходов [2,3] дают возможность получить значения физических параметров, не используя для этого экспериментальных данных. При этом имеется возможность более точно оценить вклад нелокальной части псевдопотенциала в величину параметров междолинного рассеяния, так как влияние нелокальности можно учесть во всей расчетной схеме, начиная с зонной структуры.

В настоящей работе на примере кремния со структурой алмаза проведен расчет из первых принципов вышеуказанных констант электрон-фононного взаимодействия, а также оценен соответствующий вклад нелокальной части псевдопотенциала. Для вычисления зонной структуры и фононного спектра было использовано приближение функционала локальной плотности, суть которого детально изложена в обзоре [1]. В рамках данного подхода уравнение Кона-Шема запишется следующим образом:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \varepsilon_n(\mathbf{k}) \right] C_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}) + \sum_{\mathbf{G}'} V(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{k} + \mathbf{G}') C_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}') = 0, \quad (1)$$

где $V(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{k} + \mathbf{G}')$ — фурье-компоненты эффективного псевдопотенциала, который представляет собой сумму сохраняющих норму нелокальных псевдопотенциалов ионов Si^{4+} [4], а также экранирующего вклада кулоновского и обменно-корреляционного потенциалов

$$V(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{k} + \mathbf{G}') = V_{ps}^{\text{ion}}(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{k} + \mathbf{G}') + V_H(\mathbf{G} - \mathbf{G}') + V_{XC}(\mathbf{G} - \mathbf{G}'), \quad (2)$$

$$V_{ps}^{\text{ion}}(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{k} + \mathbf{G}') = S(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \left[V_{i_0}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') + \sum_l \Delta V_l(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{k} + \mathbf{G}') \right]. \quad (3)$$

Здесь $S(\mathbf{G} - \mathbf{G}')$ — структурный фактор. Одноэлектронные волновые функции

$$|nk\rangle = \sum_{\mathbf{G}} C_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \exp[i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r}] \quad (4)$$

и дисперсионные кривые $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ рассчитывались самосогласованным образом [5]. Вычисляя при помощи данной расчетной схемы полную энергию кристалла в основном состоянии в зависимости от величины деформации, соответствующей определенным нормальным колебаниям атомов в кристаллической решетке, можно получить частоты нормальных колебаний в гармоническом приближении [6].

В [7] на основании использования рассчитанных таким образом частот для наиболее симметричных точек зоны Бриллюэна и модели «жестких ионов» Борна-Кармана интерполяционным путем были получены из первых принципов фоновый спектр и термодинамические свойства кремния.

Как известно [8], для кремния при междолинном рассеянии разрешены только процессы переброса электрона между шестью эквивалентными минимумами зоны проводимости. При рассеянии электрона между минимумами $\mathbf{k} = [0, 0, \xi(2\pi/a)]$ и $\mathbf{k}' = [0, 0, -\xi(2\pi/a)]$ (g -процессы) принимают участие $\Delta_2'(LO)$ -фононы, а при рассеянии между взаимноперпендикулярными долинами $\mathbf{k} = [\xi(2\pi/a), 0, 0]$ и $\mathbf{k}' = [0, -\xi(2\pi/a), 0]$ (f -процессы) участвуют $S_1(LA)$ - и $S_1(TO)$ -фононы.

Вероятность перехода электрона из состояния $|nk\rangle$ в состояние $|n'k'\rangle$ определяется потенциалом электрон-фононного взаимодействия V_{e-ph} следующим образом [2]:

$$P(nk, n'k') = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{N'} \left| \langle n'k'N' | V_{e-ph} | nkN \rangle \right|^2 \delta [E(n'k'N') - E(nkN)], \quad (5)$$

где $|nkN\rangle$ — волновая функция электрон-фононной системы, $E(nkN)$ — полная энергия данной системы. Потенциал V_{e-ph} при небольших смещениях $u(l, \kappa)$ (l — номер элементарной ячейки, κ — номер атома в ячейке) атомов из положения равновесия линейно зависит от $u(l, \kappa)$, и деформационный потенциал рассеяния электрона из состояния $|nk\rangle$ в состояние $|n'k'\rangle$ рассчитывается по формуле

$$D = \sum_{\kappa} \sqrt{\frac{M}{m_{\kappa}}} \mathbf{e}(\kappa, \mathbf{q}) \mathbf{D}^{\kappa}(nk, n'k'). \quad (6)$$

Здесь M — масса ячейки, m_{κ} — масса κ -го атома, $\mathbf{e}(\kappa, \mathbf{q})$ — вектор поляризации фонона с волновым вектором $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{G}_u$, где \mathbf{G}_u —

вектор переброса, равный нулю в случае нормальных процессов. Векторный матричный элемент $D^*(nk, n'k')$ в базе волновых функций (4) равен

$$D^*(nk, n'k') = -i \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} C_{n'}^*(\mathbf{k}' + \mathbf{G}') C_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \\ \times \exp[-i(\mathbf{k}' + \mathbf{G}' - \mathbf{k} - \mathbf{G})\tau_x](\mathbf{k}' + \mathbf{G}' - \mathbf{k} - \mathbf{G})V^*(\mathbf{k}' + \mathbf{G}', \mathbf{k} + \mathbf{G}), \quad (7)$$

где $V^*(\mathbf{k}' + \mathbf{G}', \mathbf{k} + \mathbf{G})$ — формфактор экранированного нелокального псевдопотенциала иона Si^{4+} .

В результате расчета зонной структуры кремния [5] минимум зоны проводимости был получен для значения $\xi = 0.85$. С учетом данного значения ξ волновые векторы фононов, участвующих соответственно в g - и f -процессах, равны

$$\mathbf{q}_g = \frac{2\pi}{a}(0, 0, 0.3), \quad \mathbf{G}_u^g = \frac{2\pi}{a}(0, 0, 2), \\ \mathbf{q}_f = \frac{2\pi}{a}(0.15, 0.15, 1.0), \quad \mathbf{G}_u^f = \frac{2\pi}{a}(1, 1, 1). \quad (8)$$

Векторы поляризации фононов $\Delta'_2(LO)$, $S_1(LA)$ и $S_1(TO)$ для данных волновых векторов были рассчитаны как собственные векторы ранее полученной динамической матрицы [7].

Вычисленные параметры междолинного рассеяния (6), а также относительный вклад нелокальной части псевдопотенциала в величину данных параметров представлены в таблице в сравнении с ныне существующими экспериментальными и теоретическими данными. Следует отметить, что матричные элементы (7) и векторы поляризации $\mathbf{e}(\kappa, \mathbf{q})$ для произвольных \mathbf{q} являются комплексными величинами. Получить значения потенциала рассеяния (6) вещественным можно посредством выбора соответствующей разности фаз между состояниями $|nk\rangle$ и $|n'k'\rangle$.

Как видно из приведенных результатов, эффект нелокальности псевдопотенциала для междолинного рассеяния в кремнии является весьма существенным. Это обстоятельство следует учитывать при псевдопотенциальных расчетах из первых принципов констант электрон-фононного взаимодействия, определяющих температуру сверхпроводящего перехода в сверхпроводниках с фононным механизмом спаривания электронов.

Потенциалы (eV Å) междолинного рассеяния электронов проводимости кремния

Потенциал междолинного рассеяния	Данная работа			Расчет [9]	Расчет [10]	Эксперимент [11]
	Локальный псевдопотенциал ($\Delta V_l = 0$)	Нелокальный псевдопотенциал	$\frac{\Delta D}{D_{loc}}, \%$			
$D[\Delta'_2(LO)]$	4.18	3.35	20	4.32	5.3, 5.8	3.0
$D[S_1(LA)]$	1.54	1.70	10	2.69	2.3, 1.9	2.5
$D[S_1(TO)]$	6.82	6.05	11	5.27	4.6, 3.3	4.0

- [1] Pickett W.E. *Comp. Phys. Rep.* **9**, 3, 115 (1989).
- [2] Гриняев С.Н., Караваяев Г.Ф., Тютюрев В.Г. *ФТП* **23**, 8, 1458 (1989).
- [3] Yoder P.D., Natoli V.D., Martin R.M. *J. Appl. Phys.* **73**, 9, 4378 (1993).
- [4] Bachelet G.R., Greenside H.S., Baraff G., Schluter M. *Phys. Rev.* **B24**, 8, 4745 (1981).
- [5] Ревинский А.Ф. *Вестн АНБ. Сер. Физ.-мат. наук*, 2, 47 (1992).
- [6] Yin M.T., Cohen M.L. *Phys. Rev.* **B26**, 6, 3259 (1982).
- [7] Ревинский А.Ф. *Вестн. БГУ. Сер. 1*, 2, 33 (1994).
- [8] Гантмахер В.Ф., Левинсон И.Б. *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках*. М. (1984). 349 с.
- [9] Palomo A., Verges J.A. *Phys. Rev.* **B30**, 4, 2104 (1984).
- [10] Klenner M., Falter C., Ludwig W. *Ann. Phys.* **1**, 1, 24 (1992).
- [11] Jacoboni C., Reggiani L. *Adv. Phys.* **28**, 4, 493 (1979).

© *Физика твердого тела*, том 37, № 9, 1995
Solid State Physics, vol. 37, N 9, 1995

ОСОБЕННОСТИ РАЗМЕРНОГО МАГНИТОУПРУГОГО РЕЗОНАНСА В БОРАТЕ ЖЕЛЕЗА В МНОГОДОМЕННОМ СОСТОЯНИИ

*Х.Г.Богданова, В.А.Голенищев-Кутузов, М.И.Куркин,
 И.Р.Низамиев, М.М.Шахирзянов*

Казанский физико-технический институт Российской академии наук,
 420029, Казань, Россия

(Поступило в Редакцию 20 февраля 1995 г.)

Как известно, сильное магнитоупругое (МУ) взаимодействие в FeVO_3 обуславливает возбуждение интенсивных МУ колебаний переменным магнитным полем, что используется при возбуждении размерного МУ резонанса (РМУР) [1,2]. Одним из достоинств РМУР является то, что он позволяет изучать влияние МУ взаимодействия на магнитные и упругие свойства одновременно, что особенно важно при изучении магнитных и структурных фазовых переходов [3], доменной структуры и процессов монодоменизации в магнетиках. При этом доменная структура, на наш взгляд, должна оказывать существенное влияние на интенсивность и частоту РМУР.

В настоящей работе сообщается о результатах экспериментального исследования РМУР в борате железа при электромагнитном способе его возбуждения. Исследуемые монокристаллические образцы FeVO_3 помещались в катушку индуктивности колебательного контура с переменной емкостью, позволяющей перестраивать его собственную частоту. Переменное ($\mathbf{h}(t)$) и постоянное (\mathbf{H}) магнитные поля были приложены в базисной плоскости (111) кристалла (перпендикулярно оси третьего порядка C_3) перпендикулярно друг другу ($\mathbf{h}(t) \perp \mathbf{H} \perp C_3$). Сигнал РМУР регистрировался по изменению добротности РЧ-контура (вставка на рис. 1), что соответствует сигналу поглощения в режиме непрерывного прохождения. В качестве образцов использовались тонкие пластинки FeVO_3 толщиной $L = 0.77$ и 0.26 мм, основная плоскость (8.2×1.7 мм) которых совпадала с базисной плоскостью кристалла.