

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ИДЕАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛОВ LiF и MgO С УЧЕТОМ КОРРЕКЦИИ НА САМОВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Б. Е. Кулябин, В. А. Лобач

Ввиду неадекватности описания теорией функционала плотности (ФП) величины энергетической щели (E_g) в диэлектриках значение E_g в рамках ФП и локальном приближении к нему (ФЛП) является заниженным на 40—50 %. Преодолеть этот недостаток в рамках одночастичной теории невозможно, поэтому единственно строгим в данном случае является многочастичное рассмотрение задачи [1, 2]. Это, однако, связано с большими вычислительными трудностями. Более доступным представляется приближение, которое учитывает коррекцию на самовзаимодействие (СВК), возникающую как следствие неадекватности описания обменно-корреляционного потенциала в рамках ФЛП, и в принципе может рассматриваться как хорошее приближение к точному массовому оператору уравнения Дайсона [3].

В настоящей работе мы использовали поправку, предложенную Либерманом [4] для кристаллов с одним атомом в примитивной ячейке. Там же был намечен путь обобщения этой процедуры на многоатомные кристаллы, который реализован нами для кристаллов со структурой типа NaCl. Сущность этого подхода состоит в выделении сферы (внутри ячейки Вигнера—Зейтца), суммарный заряд внутри которой равен $N-1$ электрону, а радиус находится из условия

$$\int_{r < R} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = N - 1. \quad (1)$$

Далее в явном виде учитываются все взаимодействия электронов внутри сферы, вне ее и между ними. Тогда одноэлектронное уравнение Шредингера имеет вид [4]

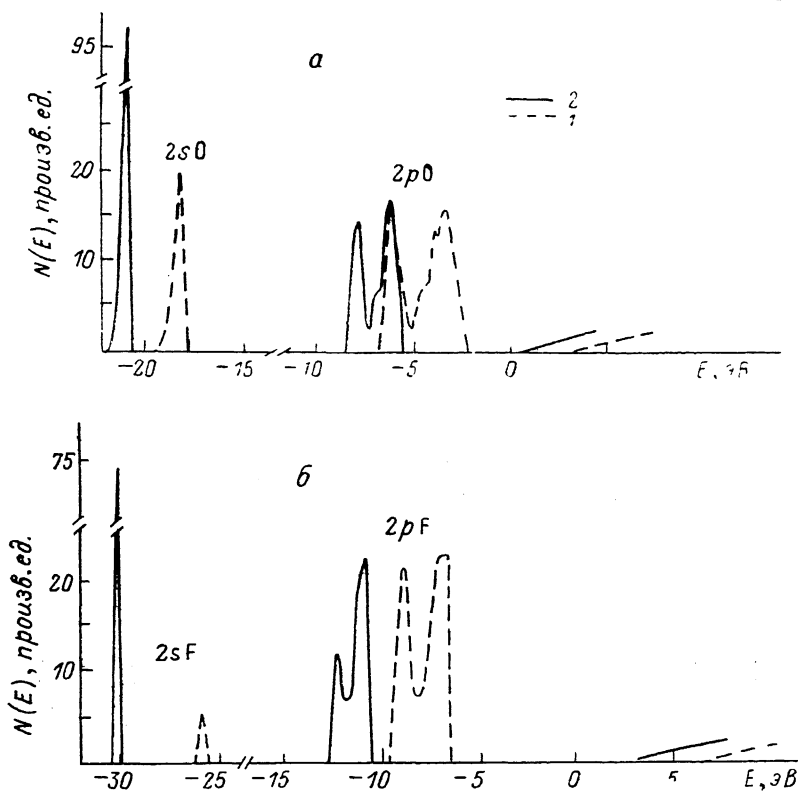
$$\left\{ -\nabla^2 + V(\mathbf{r}) + 2 \int \frac{\rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - V_{xc}[\rho(\mathbf{r})] - 2 \int_{r' > R} \frac{\rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}'|} + V_{xc}[\rho(\mathbf{R})] \right\} \psi_{\alpha\beta} = \\ = \epsilon_{\alpha\beta} \psi_{\alpha\beta}, \quad r < R, \\ \left\{ -\Delta^2 + V(\mathbf{r}) + 2 \int \frac{\rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right\} \psi_{\alpha\beta} = \epsilon_{\alpha\beta} \psi_{\alpha\beta}, \quad r > R. \quad (2)$$

Очевидно, формализм Либермана удачно вписывается в любую ячеечную схему расчета зонной структуры и, в частности, в приближения «muffin-tin» (МТ) и атомной сферы (АС).

В данной работе для расчета зонной структуры LiF и MgO использовался линеаризованный метод «muffin-tin» орбиталей в приближении атомной сферы (АМТО—ПАС) [5]. В вычислении полной и парциальных плотностей состояний включалось 50 точек на одну неприводимую часть зоны Бриллюэна (структура типа NaCl, 2 атома на элементарную ячейку). Были проведены расчеты для стандартной схемы ЛМТО—ПАС и с учетом СВК для внешнего электрона в сфере аниона. Радиусы сфер катиона и аниона выбирались равными и вычислялись из условия равенства объема элементарной ячейки суммарному объему сфер.

Ранее нами проводились расчеты данных объектов без учета СВК [6, 7], которые, как и предполагалось, дали заниженное значение E_g . Из рисунка, а, б видно, что для MgO значение E_g без поправки на СВК равно 5.98 эВ, с поправкой — 7.35 эВ (экспериментальное значение 7.77 эВ). Для LiF результаты соответственно 10.34 и 11.97 эВ. Экспериментальное значение

щели для LiF равно 14.2 эВ. Полные плотности состояний для кристаллов LiF и MgO (см. рисунок) испытывают неоднородный сдвиг в сторону низких энергий, максимум которого приходится на $2s$ -полосу аниона. Для потолка валентной зоны (ВЗ) LiF этот сдвиг составил 3.8 эВ, для $2sF$ -полосы 4.08 эВ. Для MgO 3 эВ для потолка ВЗ и 3.2 эВ для $2sO$ -зоны соответственно. Из рисунка, *a*, *б* видно, что в целом структура плотности состояний осталась неизменной, за исключением некоторого перераспре-



Полная плотность состояний кристаллов LiF(*a*) и MgO (*б*) без СВК (1) и с ее учетом (2).

деления интенсивности пиков состояний, особенно ярко выраженного для LiF. Ширина ВЗ для обоих кристаллов несколько уменьшилась, что характерно и для других расчетов с учетом СВК [8]. При этом заряды в сферах изменились несущественно, однако рост p -составляющей в сфере кислорода оказался более существенным, чем в сфере фтора. Соответственно

	q_{Li}^s	q_{Li}^p	q_F^s	q_F^p
LiF без СВК с СВК	0.16	0.36	1.96	5.52
	0.15	0.29	1.95	5.61
	q_{Mg}^s	q_{Mg}^p	q_O^s	q_O^p
MgO без СВК с СВК	0.35	0.53	1.9	5.22
	0.28	0.42	1.91	5.39

более значительным оказалось уменьшение зарядов в сфере Mg. Значения зарядов в сферах аниона и катиона для обоих кристаллов приведены в таб-

лице. Увеличение заряда в сфере аниона обусловлено эффектом понижения потенциала на анионе, которое и вызывает дополнительное затягивание заряда в сферу кислорода или фтора. Сравнивая результаты для LiF и MgO, необходимо отметить, что распределение электронного заряда в оксиде магния в большей степени соответствует модели слабого связывания десятого электрона кислородным потенциалом и его значительной делокализации [6, 7]. К сожалению, мы не можем сопоставить наши результаты с другими теоретическими данными, поскольку нам не известны ФЛП-расчеты MgO с учетом СВК. Вместе с тем наши расчеты зонной структуры LiF хорошо согласуются с результатами [9], полученными с помощью строгой процедуры учета СВК.

Таким образом, даже простая процедура СВК приводит к значительному улучшению в описании диэлектрической щели в широкозонных диэлектриках LiF и MgO. При этом форма спектра и распределения электронной плотности практически не отличаются от полученных ранее в рамках стандартного ФЛП. Тенденция большей делокализации $2p$ -электронов из сферы аниона в оксиде по сравнению с фторидом, установленная ранее в ФЛП-расчетах [6, 7], имеет место и при учете СВК.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Perdew J. P., Levy M. // Phys. Rev. Lett. 1983. V. 51. N 20. P. 1884—1887.
- [2] Sham L. J., Schlüter M. // Phys. Rev. Lett. 1983. V. 51. N 20. P. 1888—1891.
- [3] Perdew J. P., Norman M. R. // Phys. Rev. 1982. V. B26. N 10. P. 5445—5450.
- [4] Liberman D. A. // Phys. Rev. 1970. V. B2. N 2. P. 244—248.
- [5] Andersen O.-K. // Phys. Rev. 1975. V. B12. P. 3060—3083.
- [6] Лобач В. А., Кулябин В. Е., Жуков В. П. и др. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 7. С. 2238—2240.
- [7] Кулябин В. Е., Лобач В. А. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 5. С. 315—317.
- [8] Heaton R. A., Lin C. C. // J. Phys. C: Sol. St. Phys. 1984. V. 17. P. 1853—1866.
- [9] Erwin S. C., Lin C. C. // J. Phys. C: Sol. St. Phys. 1988. V. 20. N 23. P. 4285—4311.

Уральский политехнический институт
им. С. М. Кирова
Свердловск

Поступило в Редакцию
4 июля 1989 г.
В окончательной редакции
2 октября 1989 г.

ВЛИЯНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ ФОТОНОВ НА ИХ ОДНОМЕРНУЮ ЛОКАЛИЗАЦИЮ В НЕУПОРЯДОЧЕННОМ ДИЭЛЕКТРИКЕ

В. А. Кособукин

В статье [1] исследована задача об одномерной андерсоновской локализации s -поляризованных электромагнитных волн с учетом резонансного пропускания света рассеивателями, приводящего к делокализации возбуждений. В данной работе обсуждаются результаты, полученные при обобщении теории [1] на волны с p -поляризацией; среди них — зависящий от поляризации эффект делокализации волн, падающих на плоские рассеиватели под углом Брюстера [2].

Как и в работе [1], неупорядоченная среда моделируется одинаковыми параллельными друг другу диэлектрическими пластинами толщиной $2a$, заключенными в областях $z_j - a < z < z_j + a$ в направлении оси z , где z_j — случайная координата j -й пластины. Диэлектрическая проницаемость пластин ϵ_2 , окружающей среды — ϵ_1 . Рассматриваются волны вида $F(\mathbf{r}, \omega) = \vec{F}_z(z) \exp(ixx) e_y$; под F понимается вектор напряженности