

Таким образом, проведенные исследования показали, что в облученных монокристаллах CsBr рост среднего размера пор в результате термической обработки при $T > 750$ К осуществляется посредством коалесценции. Лимитирующим звеном коалесценции является граничная кинетика, т. е. испарение (конденсация) вакансий с поверхности пор. В области температур ~ 900 К наблюдается переход лимитирующей стадии от граничной кинетики к объемной диффузии.

Л и т е р а т у р а

- [1] Котов Г. В., Громов Л. А., Колотилин В. В., Штанько В. И. ВАНТ. Физика радиационных повреждений. Харьков, 1980, № 3, с. 40—47.
- [2] Карпов И. К., Михальченко Г. А. В сб.: Проблемы чистоты и совершенства ионных кристаллов. Тарту, ИФ АН ЭССР, 1969, с. 11—15.
- [3] Слезов В. В., Кукушкин С. А. ФТТ, 1987, т. 29, № 6, с. 1812—1818.
- [4] Кукушкин С. А., Калинин И. П., Сергеева Л. А., Степанова Н. Д. Поверхность, 1985, № 3, с. 84—90.
- [5] Lynch D. W. Phys. Rev., 1960, vol. 118, N 2, p. 468—473.
- [6] Bollman W. Crystal Res. and Technol., 1982, vol. 17, N 7, p. 849—856.

Ленинградский технологический
институт им. Ленсовета
Ленинград

Поступило в Редакцию
10 июня 1988 г.

УДК 519.4+537.311+621.315/58

Физика твердого тела, том 30, в. 11, 1988
Solid State Physics, vol. 30, № 11, 1988

ЧАСТИЧНО ЛОКАЛЬНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ КРИСТАЛЛА

И. М. Резник

Хорошо известно, что распределение электронного заряда играет важнейшую роль в неопирающихся на феноменологию методах теории твердого тела [1]. Электронная плотность $\rho(r)$ (ЭП) обуславливает коллективные свойства основного состояния кристаллов, особенности химической связи, характеристики дефектов, поверхности, служит фундаментом, на котором строится количественная теория элементарных возбуждений. Между тем расчет ЭП даже идеальных кристаллов составляет весьма сложную проблему, решение которой невозможно без полного анализа одночастичной задачи, как правило, в рамках теории функционала плотности в форме Кона и Шэма [2]. Есть лишь два случая, когда имеется явная связь ЭП с полным потенциалом. Это томас-фермиевский предел локальной однородности, отвечающий медленно меняющемуся, но не обязательно малому потенциалу, и случай, когда применима теория возмущений. Последний реализуется достаточно хорошо в простых металлах. Подход Томаса—Ферми дал разумное описание ЭП полупроводников, во всяком случае Si, Ge и GaAs [3], несмотря на то, что полный потенциал нельзя считать плавным. В данной работе развита теория, применимость которой определяется возможностью представления полного эффективного потенциала в виде

$$V(r) = V_1(r) + V_2(r), \quad (1)$$

где $V_1(r)$ — достаточно плавная функция, а $V_2(r)$ может считаться малой по сравнению с характерными электронными энергиями.

Исходим из теории Марча и Мэррея [4] для матрицы плотности Дирака $\rho(r; r'; k)$. Можно показать, что она сводится к уравнению дайсоновского типа

$$\Gamma(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; \kappa) = \Gamma_0(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; \kappa) - \frac{1}{2\pi} \int V(\mathbf{r}') \Gamma_0(\mathbf{r}'; \mathbf{r}_0; \kappa) \Gamma(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \kappa) d^3\mathbf{r}', \quad (2)$$

причем

$$\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; k) = (k^2/2\pi^2) \int dq J_1(q) \Gamma(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0, kq), \quad (3)$$

$$J_1(q) = (-i/2) q \Theta(1 - |q|), \quad (4)$$

$$\Gamma_0(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; \kappa) = \exp(i\kappa R)/R, \quad R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|. \quad (5)$$

Здесь $J_1(q)$ — Фурье-образ сферической функции Бесселя $J_1(x)$; k — аналогичный фермиевскому импульсу параметр, определяемый по заданному числу частиц. Диагональный элемент $\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; k)$ представляет собой ЭП.

Учитывая представление (4), ищем решение уравнения (2) в виде

$$\Gamma(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; \kappa) = \Gamma_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; \kappa) + \Gamma_2(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; \kappa), \quad (6)$$

полагая Γ_1 нулевого, а Γ_2 первого порядка по V_2 и отбрасывая члены более высоких порядков. Тогда

$$\Gamma_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; \kappa) = \Gamma_0(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; \kappa) - \frac{1}{2\pi} \int V_1(\mathbf{r}') \Gamma_0(\mathbf{r}'; \mathbf{r}_0; \kappa) \Gamma_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \kappa) d^3\mathbf{r}', \quad (7)$$

$$\Gamma_2(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; \kappa) = -\frac{1}{2\pi} \int (V_2(\mathbf{r}') \Gamma_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \kappa) + V_1(\mathbf{r}') \Gamma_2(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; \kappa)) \Gamma_0(\mathbf{r}'; \mathbf{r}_0; \kappa) d^3\mathbf{r}'. \quad (8)$$

Известно, что в теории возмущений для ЭП предельная плавность потенциала позволяет заменить его аргумент \mathbf{r}' на \mathbf{r} , и это ведет к приближению Томаса—Ферми [1]. Мы воспользуемся таким приближением в уравнениях (7), (8) только по отношению к $V_1(\mathbf{r}')$. Тогда они превращаются в уравнения с разностным ядром, которые решаются преобразованием Фурье по r_0 . Обращая преобразование и используя формулы (3)—(5), находим

$$\rho_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; k) = (\Theta(\bar{k}^2)/2\pi^2 R) \bar{k}^2 J_1(\bar{k}R), \quad (9)$$

$$\rho_2(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; k) = -\frac{\Theta(\bar{k}^2)}{4\pi^3} \bar{k}^2 \int \frac{V_2(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \cdot |\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0|} J_1(\bar{k}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| + |\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0|)), \quad (10)$$

где

$$\bar{k}^2 = k^2 - 2V_1(\mathbf{r}), \quad (11)$$

$\Theta(x)$ — функция Хевисайда.

Как и следовало ожидать, приближенные матрицы плотности в отличие от точных несимметричны по отношению к перестановке аргументов. Для ЭП формулы (9), (10) дают

$$\rho_1(\mathbf{r}; k) = (\Theta(\bar{k}^2)/6\pi^2) \bar{k}^3, \quad (12)$$

$$\rho_2(\mathbf{r}; k) = -\bar{k}^2 \frac{\Theta(\bar{k}^2)}{4\pi^3} \int \frac{V_2(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} J_1(2\bar{k}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|). \quad (13)$$

Выражение (12) полностью совпадает с теорией Томаса—Ферми для потенциала $V_1(\mathbf{r})$ (в атомной системе единиц, которая используется в данной работе, $e = \hbar = m_e = 1$), а (13) — с первым порядком теории возмущений по $V_2(\mathbf{r})$, но с фермиевским импульсом, локально соответствующим $V_1(\mathbf{r})$ согласно (11). Поэтому предлагаемое приближение естественно назвать частично локальным. Если потенциал $V_2(\mathbf{r})$ задан своими Фурье-компонентами, отвечающими векторам обратной решетки \mathbf{G} , то

$$\rho_2(\mathbf{r}; k) = -\frac{\Theta(\bar{k}^2)}{2\pi^2} \bar{k} \sum_{\mathbf{G}} V_2(\mathbf{G}) F\left(\frac{\mathbf{G}}{2\bar{k}}\right) \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}), \quad (14)$$

где $F(x)$ — функция Линдхарда. Заметим, что вышеприведенные формулы для ЭП и матриц плотности отвечали системе электронов с параллельными спинами. Для замкнутых оболочек их нужно просто удвоить.

В качестве примера, следуя работе [3], рассмотрим ЭП кремния как реакцию электронного газа на эмпирический псевдопотенциал [4]. В отличие от работы [3] к $V_1(r)$ относим только вклад самой длинноволновой и одновременно наибольшей Фурье-компоненты с $G=(1; 1; 1)$; оставшуюся часть потенциала рассматриваем как $V_2(r)$. Результаты расчета главных Фурье-компонент ЭП сведены в таблицу.

Результаты расчета Фурье-компонент ЭП

| G | V(G) | ρG | | | |
|-----|---------|--------|--------|--------|--------|
| | | 1 | 2 | 3 | 4 |
| 111 | 0.07425 | -1.733 | -1.734 | -1.651 | -1.639 |
| 220 | -0.02 | 0.340 | 0.476 | 0.418 | 0.300 |
| 311 | -0.0283 | 0.293 | 0.692 | 0.474 | 0.431 |
| 222 | 0 | 0 | 0.391 | 0.331 | 0.465 |
| 400 | 0 | 0 | 0.268 | 0.296 | 0.286 |

Примечание. Псевдопотенциал дан с учетом структурного фактора, ЭП — в электронных ячейках. 1 — стандартная теория линейного отклика, 2 — теория Томаса—Ферми для полного псевдопотенциала, 3 — теория настоящей работы, 4 — «точный» зонный расчет по двум специальным точкам в приведенной части зоны Бриллюэна [3].

Можно видеть, что предлагаемая теория существенно ближе к «точной». Некоторое уменьшение «запрещенной» (222)-компоненты незначительно. Таким образом, найдено новое приближение, связывающее ЭП с полным потенциалом. Его простота и довольно высокая точность позволяют надеяться, что оно найдет применение в тех случаях, когда полный расчет электронного спектра оказывается слишком сложной задачей.

Отметим в заключение, что в данной статье не рассматривалось построение самосогласованного потенциала по заданным потенциалам ионов. Организация соответствующего итерационного процесса благодаря явной связи ЭП с полным псевдопотенциалом довольно очевидна.

Л и т е р а т у р а

- [1] Теория неоднородного электронного газа / Под ред. О. Лундqvиста и Н. Марча. М.: Мир, 1987. 400 с.
- [2] Kohn W., Sham L. J. Phys. Rev., 1965, vol. A140, N 4, p. 1133—1140.
- [3] Baldereschi A., Mashke K., Milchev A. et al. Phys. St. Sol. B, 1981, vol. 108, N 2, p. 511—520.
- [4] Хейне В., Козн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала. М.: Мир, 1973. 546 с.
- [5] Chadi D., Cohen L. Phys. Rev. B, 1973, vol. 8, N 10, p. 5747—5753.

Донецкий физико-технический институт АН УССР
Донецк

Поступило в Редакцию
8 февраля 1988 г.
В окончательной редакции
13 июня 1988 г.

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА ФЛУКТУАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В МЕТАЛЛОКЕРАМИЧЕСКИХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

В. М. Свистунов, В. Ю. Таренков, А. И. Дьяченко, О. В. Григуть,
О. И. Черняк, А. В. Василенко

В большинстве опубликованных исследований влияния давления на сверхпроводящие свойства металлооксидов Y—Ba—Cu—O наблюдалось уширение резистивного $R(T)$ перехода в сверхпроводящее состояние [1–3],