

УДК 539.2.01

**УСТРАНЕНИЕ ПОЛЮСОВ ДЕТЕРМИНАНТА ККР В РАСЧЕТАХ  
ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ**

А. Ф. Татарченко, А. А. Кацнельсон, Л. И. Ястребов

(кафедра физики твердого тела)

Для расчета электронного спектра кристаллов широко используется метод Коринги, Кона и Ростокера (ККР) [1, 2]. Значения энергии электрона являются решениями секулярного уравнения, в которое входит функция Грина пустой решетки. При  $E_n = |\mathbf{k} + \mathbf{G}_n|^2$ , где  $\mathbf{G}_n$  — векторы обратной решетки, функция Грина имеет полюсы первого порядка, поэтому каждый матричный элемент секулярного уравнения также имеет полюс первого порядка при  $E = E_n$ . Вблизи  $E_n$  матрица секулярного уравнения ККР оказывается плохо обусловленной. Для вычисления электронного спектра  $E(\mathbf{k})$  необходимо найти те значения энергии  $E$ , при которых детерминант матрицы обратится в ноль. Для определения значений энергии, близких к  $E_n$ , приходится вычислять детерминант плохо обусловленной матрицы. Метод устранения полюсов детерминанта, предложенный в работе [3], не работает, когда корни детерминанта лежат вблизи  $E_n$ . В настоящей работе показано, что исходное секулярное уравнение можно преобразовать к виду, в котором матричные элементы не будут иметь полюсов внутри того интервала, на котором ищутся значения энергии электрона. Детерминант матрицы такого секулярного уравнения является непрерывной функцией энергии, и корни его в точности совпадают с корнями исходного уравнения.

1. **Секулярное уравнение метода ККР.** Как было показано в работах Коринги, Кона и Ростокера [1, 2], для определения электронного энергетического спектра  $E(\mathbf{k})$  необходимо решить систему однородных линейных уравнений

$$\sum_L [A_{L,L'}(E, \mathbf{k}) + \kappa \delta_{L,L'} \text{ctg } \eta_l(E)] C_l = 0, \quad L \equiv (l, m), \quad (1)$$

где  $\eta_l$  — фазовые сдвиги,  $\kappa = \sqrt{E}$ ,  $C_L$  — коэффициенты разложения волновой функции по решениям радиального уравнения Шрёдингера,  $A_{L,L'}(E, \mathbf{k})$  — структурные константы, имеющие вид [4]

$$A_{L,L'}(E, \mathbf{k}) = 4\pi \sum_{L''} C_{L,L'}^{L''} D_{L''}(E, \mathbf{k}),$$

где

$$C_{L,L'}^{L''} = \int Y_L Y_{L'}^* Y_{L''}^* d\Omega,$$

$$D_{L''}(E, \mathbf{k}) = D_{L''}^1(E, \mathbf{k}) + D_{L''}^2(E, \mathbf{k}) + \delta_{L'',0} D_0^3(E),$$

$$D_{L''}^1(E, \mathbf{k}) = -\frac{4\pi}{\tau \kappa^l} \sum_n \frac{\exp[-(\kappa_n^2 - E)/\eta]}{\kappa_n^2 - E} Y_{L''}(\hat{\mathbf{k}}_n), \quad (2)$$

$$D_{L''}^2(E, \mathbf{k}) = -\frac{2^{l''+1} i^{l''}}{\sqrt{\pi} \kappa^{l''}} \sum_n \exp(-ikR_n) R_n^{l''} Y_{L''}(\hat{R}_n) \int_{\eta/2}^{\infty} \exp\left(-R_n^2 z^2 + \frac{E}{4z}\right) z^{2l''} dz,$$

$$D_0^3(E) = -\frac{\sqrt{\eta}}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(E/\eta)^n}{n! (2n-1)}, \quad \mathbf{k}_n = \mathbf{k} + \mathbf{G}_n.$$

Однородная система уравнений (1) имеет решение, когда

$$\det[A_{L,L'}(E, \mathbf{k}) + \kappa \delta_{L,L'} \text{ctg } \eta_l(E)] = 0. \quad (3)$$

Корни уравнения (3) определяют закон дисперсии электронов  $E(\mathbf{k})$ . Отметим, что при  $E = k_n^2$  каждый матричный элемент имеет полюс первого порядка; матрица уравнения (3) вблизи  $k_n^2$  плохо обусловлена. Для вычисления значений детерминанта при энергиях  $E$ , близких к  $k_n^2$ , необходимо повышать точность, прибегать к специальным методам и пр. Покажем, как можно преобразовать систему линейных уравнений (1) к виду, при котором матричные элементы будут непрерывными функциями всюду на выбранном интервале.

**2. Преобразование структурных констант.** В выражении (2) для  $D_{L''}(E, \mathbf{k})$  только первое слагаемое  $D_{L''}^{1,R}(E, \mathbf{k})$  содержит полюсы при  $E = k_n^2$ . На выбранном интервале энергий запишем  $D_{L''}^1(E, \mathbf{k})$  в виде суммы двух слагаемых:

$$D_{L''}^1(E, \mathbf{k}) = D_{L''}^{1,R}(E, \mathbf{k}) + D_{L''}^{1,S}(E, \mathbf{k}), \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} D_{L''}^{1,R}(E, \mathbf{k}) &= -\frac{4\pi}{\tau} \sum_{n \notin M} \frac{\exp[-(k_n^2 - E)/\eta]}{k_n^2 - E} \left(\frac{k_n}{\kappa}\right)^{l''} Y_{L''}(\hat{k}_n) - \\ &- \frac{4\pi}{\tau} \sum_{n \in M} \frac{\exp[-(k_n^2 - E)/\eta]}{k_n^2 - E} \left[\left(\frac{k_n}{\kappa}\right)^{l''} - 1\right] Y_{L''}(\hat{k}_n), \\ D_{L''}^{1,S}(E, \mathbf{k}) &= -\frac{4\pi}{\tau} \sum_{n \in M} \frac{\exp[-(k_n^2 - E)/\eta]}{k_n^2 - E} Y_{L''}(\hat{k}_n). \end{aligned}$$

$M$  представляет собой набор векторов обратной решетки, удовлетворяющих равенству  $E - k_n^2 = 0$  для любого волнового вектора  $\mathbf{k}$ , лежащего в  $1/48$  зоны Бриллюэна, и любого значения энергии из выбранного интервала. В выражении (4) только  $D_{L''}^{1,S}$  содержит полюсы. Следовательно,  $A_{L,L'}(E, \mathbf{k})$  можно теперь представить в виде

$$A_{L,L'}(E, \mathbf{k}) = 4\pi \sum_{L''} C_{L,L'}^{L''} D_{L''}^R - \frac{(4\pi)^2}{\tau} \sum_{n \in M} \sum_{L''} C_{L,L'}^{L''} \frac{\exp[-(k_n^2 - E)/\eta]}{k_n^2 - E} Y_{L''}(\hat{k}_n), \quad (5)$$

где непрерывное слагаемое  $D_{L''}^R(E, \mathbf{k})$  имеет вид

$$D_{L''}^R(E, \mathbf{k}) = D_{L''}^{1,R}(E, \mathbf{k}) + D_{L''}^2(E, \mathbf{k}) + \delta_{L'',0} D_0^3(E).$$

Воспользуемся равенством

$$Y_L Y_{L'}^* = \sum_{L''} C_{L,L'}^{L''} Y_{L''}$$

и перепишем (5), явно выделяя нерегулярную часть:

$$A_{L,L'}(E, \mathbf{k}) = A_{L,L'}^R(E, \mathbf{k}) - \sum_{n \in M} \frac{h_{L,n}^* h_{L',n}}{k_n^2 - E}, \quad (6)$$

где

$$A_{L,L'}^R(E, \mathbf{k}) = 4\pi \sum_{L''} C_{L,L'}^{L''} D_{L''}^R(E, \mathbf{k}),$$

$$h_{L,n}(E, \mathbf{k}) = \frac{4\pi}{\sqrt{\tau}} \exp[-(k_n^2 - E)/(2\eta)] Y_L(\hat{k}_n).$$

3. Преобразование секулярного уравнения. С учетом (6) секулярное уравнение (1) можно переписать в виде

$$\sum_L [A_{L,L'}^R(E, \mathbf{k}) + \kappa \delta_{L,L'} \text{ctg } \eta_l(E)] C_L - \sum_{n \in M} \sum_L \frac{h_{L,n} h_{L',n}^*}{k_n^2 - E} C_L = 0,$$

Введем новые переменные  $B_n$ :

$$B_n = - \sum_L \frac{h_{L,n}}{k_n^2 - E} C_L$$

и запишем систему

$$(k_n^2 - E) \delta_{n,n'} B_n + \sum_L h_{L,n}(E, \mathbf{k}) C_L = 0, \quad n \in M, \quad (7)$$

$$\sum_L [A_{L,L'}^R(E, \mathbf{k}) + \kappa \delta_{L,L'} \text{ctg } \eta_l(E)] C_L + \sum_{n \in M} h_{L',n}^* B_n = 0. \quad (8)$$

Система линейных однородных уравнений относительно неизвестных  $C_L$  и  $B_n$  имеет единственное решение для тех значений  $E$ , при которых

$$\det [\Lambda_{Ln,L'n'}(E, \mathbf{k})] = 0 \quad (9)$$

с матрицей  $\Lambda_{Ln,L'n'}(E, \mathbf{k})$ :

$$\Lambda_{Ln,L'n'}(E, \mathbf{k}) = \left( \begin{array}{c|c} A_{L,L'}^R + \kappa \text{ctg } \eta_l \delta_{L,L'} & h_{L',n}^* \\ \hline h_{L,n} & (k_n^2 - E) \delta_{n,n'} \end{array} \right).$$

Уравнение (9) эквивалентно (3), но теперь детерминант является непрерывной функцией энергии. В некотором смысле проделанные преобразования эквивалентны процедуре, предложенной Займаном [5]. Действительно, воспользуемся следующим матричным тождеством. Пусть

$$X = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$\det X = \det D \cdot \det(A - BD^{-1}C). \quad (10)$$

Положим

$$A = A_{L,L'}^R + \kappa \delta_{L,L'} \text{ctg } \eta_l, \quad B = h_{L',n}^*, \quad C = h_{L,n}, \quad D = (k_n^2 - E) \delta_{n,n'}.$$

Из равенства (10) видно, что преобразование уравнения (3) к виду (9) есть матричное преобразование.

4. Численные оценки и выводы. Описанная процедура использовалась в методе ККР для вычисления электронного спектра соединения с двумя атомами на элементарную ячейку в решетке типа CsCl. Вычисление детерминанта с точностью 5–6 знаков по стандартной процедуре оказалось неустойчивым при  $|E - k_n^2| < 0,02 R_y$ , в отдельных

случаях оказывался неверным даже знак детерминанта, что приводило к появлению ложных энергетических уровней.

При вычислении учитывалось 8 векторов  $G_n$ , т. е. размерность матрицы увеличивалась с 18 до 26. Несмотря на то что увеличивается время, затрачиваемое на вычисление детерминанта, экономия, возникающая за счет автоматизации программы, существенно облегчает проведение вычислений.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Korringa J. *Physica*, 1947, 13, p. 392. [2] Kohn W., Rostoker N. *Phys. Rev.*, 1954, 94, p. 1111. [3] Segall B., Chen A.-B. *Phys. Rev.*, 1977, B 16, p. 2556. [4] Ham F. S., Segall B. *Phys. Rev.*, 1961, 124, p. 1786. [5] Займан Дж. *Вычисление блоховских функций*. М.: Мир, 1973.

Поступила в редакцию  
04.04.84

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1985, Т. 26, № 2

УДК 548.732

### РЕНТГЕНОВСКИЕ ПОВЕРХНОСТНЫЕ ВОЛНЫ В УСЛОВИЯХ ТРЕХВОЛНОВОЙ ДИФРАКЦИИ

А. В. Андреев, В. Е. Горшков, Ю. А. Ильинский

(кафедра общей физики и волновых процессов;  
кафедра квантовой радиофизики)

Возможность возбуждения рентгеновских поверхностных волн при двухволновой дифракции была рассмотрена в работе [1]. Поверхностные волны возникают в этом случае при одновременном выполнении условия полного внешнего отражения [2] и условия возникновения в вакууме неоднородной волны (полное внутреннее отражение [3]).

В настоящей работе установлена возможность существования рентгеновских поверхностных волн для скользких углов падения при трехволновой дифракции, а также проведено обобщение на трехволновой случай результатов работы [1]. Представлены результаты численного расчета интенсивностей дифрагированных и зеркально отраженной волн, а также дисперсионной поверхности кристалла кремния для комбинации отражений 311/311/600 в случае, когда вектор поляризации падающей волны перпендикулярен плоскости векторов обратной решетки.

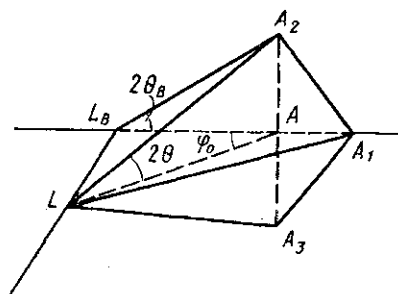


Рис. 1. Геометрия дифракции

Геометрия дифракции аналогична рассмотренной в работе [4] и изображена на рис. 1. Здесь  $A_i$  — узлы обратной решетки,

$$|A_1 A_2| = |A_1 A_3| = H, \quad |L_B A_i| = 1/\lambda_B, \quad |L A_i| = 1/\lambda = \kappa = |\kappa|,$$

где  $\lambda_B$  — длина волны, соответствующая условиям компланарной трехволновой дифракции, а  $\kappa$  — волновой вектор падающей на кристалл плоской волны  $\vec{E}(\mathbf{r}) = e\vec{E} \exp[-2\pi i \kappa \mathbf{r}]$  ( $e$  — вектор поляризации). В дальнейшем символами  $k_i$  и  $\kappa_i$  будем обозначать волновые векторы волн в кристалле и в вакууме соответственно. Будем также считать, что фурье-компоненты поляризуемости  $\chi(\mathbf{r})$  удовлетворяют соотношениям  $\chi_{13} = -\chi_{12} = \chi_h$ ,  $\chi_{23} = 0$ .