

В однофононном приближении ($m=1$) потенциал рассчитывался при фиксированной энергии E_2 падающего атома без усреднения (14).

В результате численных расчетов были получены зависимости величины $\ln \gamma_{av}$ в бесфононном приближении от угла падения α_0 при температуре газовой фазы $T_g = 250$ К для различных уровней молекулы H_2 в конечном состоянии и трех адсорбционных уровней H на LiF (001). На рис. 1 и 2 приведены некоторые результаты выполненных расчетов.

Существование резонансных состояний у молекулы в потенциале $\tilde{V}(z_1+z_2)/2$ приводит к резкому возрастанию γ_{av} при определенных сочетаниях θ_g , α_0 , $\varepsilon_{12}^{(n)}$, E_i^{abs} . Так, на рис. 2 изображен вид кривых $\ln \gamma_{av}$ в окрестности резонанса на уровне $E_3 = 0,5$ мэВ (кривая 3). Поведение $\ln \gamma_{av}$ для $E_2 = 3,5$ мэВ близко к резонансному (острый максимум). Аналогичная кривая для $E_1 = 12,2$ мэВ резонансных особенностей не имеет. Этот эффект отражает чисто квантовые свойства системы и является аналогом известного эффекта в ядерной физике: взаимодействия в конечном состоянии.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Гудман Ф., Вахман Г. Динамика рассеяния газа поверхностью. М., 1980. [2] Тейлор Дж. Теория рассеяния. М., 1975. [3] Komarov V. V., Shablov V. L., Porova A. M., Osborn T. A. // Phys. Rev. 1980. C22. P. 976. [4] Finzel H. U., Fromk H. // Surf. Sci. 1975. 49. P. 577. [5] O'Keefe D. R., Smith J. N. // J. Chem. Phys. 1970. 52. P. 4447. [6] Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. М., 1979. Т. 2.

Поступила в редакцию
28.06.89

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1990. Т. 31, № 3

УДК 538.915

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА BaO

А. А. Григоренко, В. С. Степанюк, А. А. Кацнельсон,
О. В. Фарберович, В. В. Михайлин

(кафедра физики твердого тела)

Проведен полностью самосогласованный расчет зонной структуры оксида бария. Впервые теоретически получена зависимость мнимой части функции диэлектрической проницаемости от энергии. Наблюдается удовлетворительное согласие полученных результатов с экспериментальными данными.

Кристаллы щелочноземельных оксидов обладают высокой прочностью и оптической прозрачностью в инфракрасной и видимой областях спектра, что обуславливает широкое применение этих кристаллов в технике. Ранее был предпринят цикл исследований электронной структуры соединений $A^{II}B^{VI}$ [1—3]. В настоящей работе выполнен расчет электронной структуры и впервые теоретически определен спектр мнимой части функции диэлектрической проницаемости $\varepsilon_2(\omega)$ для BaO.

Оксид бария обладает структурой типа NaCl с параметром решетки 5,534 Å [4]. Расчет зонной структуры проводился линейным методом присоединенных плоских волн [5], полностью самосогласованно, в рамках теории функционала электронной плотности. Зонная структура вычислялась в 89 точках неприводимой части зоны Бриллюэна.

На рис. 1 представлена плотность состояний BaO на элементарную ячейку. Первый пик в валентной зоне обусловлен s -состояниями кислорода и имеет ширину 1,1 эВ. Второй пик составлен в основном p -состояниями бария (80% p -состояний бария; 20% s -состояний кислорода) и имеет ширину 9,5 эВ. Третий пик имеет дублетную структуру с расстоянием между максимумами 4,8 эВ и шириной 10,9 эВ. Его состав — 80% p -состояний кислорода и 20% s -состояний бария. Далее следует запрещенная зона с шириной 10,9 эВ. Дно зоны проводимости обусловлено d -состояниями бария, которые гибридизуются с s -состояниями. В работе [6] расстояние в энергетической шкале между пиками $2s$ - и $2p$ -состояний кислорода равно 16,2 эВ, а между $5p$ -состояниями бария и $2p$ -состояниями кислорода — 10,4 эВ. В наших расчетах были получены значения 15,0 и 10,8 эВ соответственно.

В работе [7] с помощью синхротронного излучения экспериментально исследованы оптические свойства BaO, поэтому представляются интересными расчет и сравнение с экспериментом величины $\epsilon_2(\omega)$. Рис. 2 иллюстрирует экспериментальную (пунктирная линия) и теоретическую (сплошная) зависимости $\epsilon_2(\omega)$ от энергии. Расчет проводился с учетом энергозависимости матричных элементов оптических переходов. Подробное исследование влияния матричных элементов на спектр $\epsilon_2(\omega)$ проведен нами ранее в работе [8], где установлено, что их учет является принципиальным.

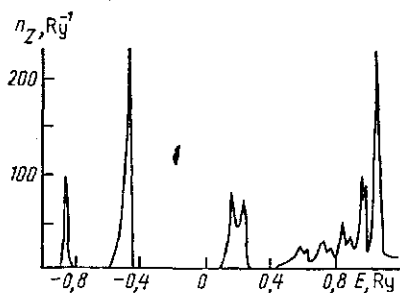


Рис. 1

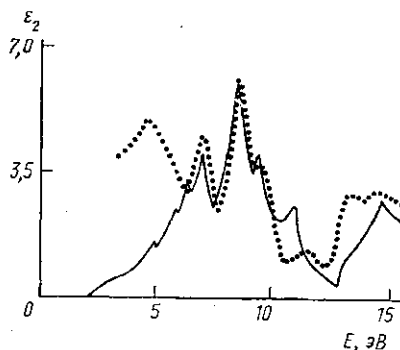


Рис. 2

Вследствие того что локальное приближение теории функционала плотности дает заниженное значение диэлектрической щели, расчетный спектр был сдвинут вправо на 1,3 эВ до совмещения с экспериментальным по положению основных пиков. Из рис. 2 можно видеть, что расчетный спектр в целом правильно передает основные особенности экспериментальной зависимости $\epsilon_2(\omega)$.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Степанова Е. В., Григоренко А. А., Степанюк В. С. и др. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1989. 30, № 1. С. 61.
- [2] Степанюк В. С., Григоренко А. А., Кацнельсон А. А. и др. // ФТТ. 1988. 30, № 12. С. 3061.
- [3] Степанюк В. С., Григоренко А. А., Кацнельсон А. А. и др. // ФТТ. 1989. 31, № 2. С. 58.
- [4] Миркин Л. И. Справочник по рентгеноструктурному анализу кристаллов. М., 1961.
- [5] Koeling D. D., Arberman G. O. // J. Phys. F. 1975. 5, N 11. P. 2041.
- [6] Doveren H. van, Verhoeven J. A. Th. // J. Elect. Relat. Phen. 1980. 21. P. 265.
- [7] Конeko К., Morimoto K., Koda T. // J. Phys. Soc. Japan. 1983. 52, N 12. P. 4385.
- [8] Кацнельсон А. А., Степанюк В. С., Козлов А. В. и др. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1989. 30, № 5. С. 26.

Поступила в редакцию
13.09.89