УДК 539.2:530

А.И. Нажалов, М.А. Нажалов

Об одной формулировке метода функции Грина для периодических решеток

Уравнение Шредингера в расчетах энергетического спектра кристаллических твердых тел может быть методом функции Грина преобразовано к однородному интегральному уравнению [1]

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} G_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}', E)V(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'. \qquad (1)$$

Здесь интегрирование ведется по объему элементарной ячейки Ω, $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ – волновая функция электрона в состоянии с квазимпульсом (волновым вектором) $\mathbf{k}$, удовлетворяющая теореме Блоха

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{kr})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \qquad (2)$$

где $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}_p) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ – периодическая часть волновой функции, $\mathbf{R}_p$ –вектор трансляции прямой решетки, $V(\mathbf{r}+\mathbf{R}_p)=V(\mathbf{r})$ – кристаллический потенциал, в зонных вычислениях принимаемый равным сумме кулоновской и обменной составляющей. Подходящее для него выражение приведено в работе [2]. $G_{\mathbf{k}}$ – функция Грина свободного электрона удовлетворяет теореме Блоха и может быть записана в виде суммы по прямой или обратной решетке. Здесь мы приведем только сумму по прямой решетке

$$G_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}', E) = \sum_p \exp(i\mathbf{kR}_p)G_0(\mathbf{r}-\mathbf{r}'-\mathbf{R}_p, E), \qquad (3)$$

где

$$G_0(\mathbf{r}-\mathbf{r}'-\mathbf{R}_p, E) = -\frac{1}{4\pi}\frac{\exp iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'-\mathbf{R}_p|}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'-\mathbf{R}_p|}. \qquad (4)$$

Здесь $q = \sqrt{E}$, если $E>0$, и $q = i\sqrt{-E}$, если $E<0$, $E = E(\mathbf{k})$ — одноэлектронные энергии. Интегральное уравнение в форме (1) обычно не используется, так как, во-первых, решить его аналитически не представляется возможным, а явный вид функции Грина из-за плохой сходимости решеточного ряда (3) и сингулярности затрудняет численное интегрирование, во-вторых, очень трудно выполнить интегрирование по объему элементарной ячейки из-за ее сложной геометрической формы.

Настоящая публикация преследует цель преобразования этого уравнения к форме, свободной от этих недостатков.

Для реализации цели подставим функцию Грина в (1) и вынесем за знак интеграла сумму по векторам решетки. Это можно сделать, так как сходимость решеточного ряда от этой замены не ухудшается. В результате получим следующее выражение:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_p \exp(i\mathbf{kR}_p)\int_{\Omega} G_0(\mathbf{r}-\mathbf{r}'-\mathbf{R}_p, E)V(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'. \qquad (5)$$

Правую часть этого выражения можно рассматривать как сумму интегралов по объемам элементарных ячеек, сдвинутых друг относительно друга на векторы трансляции. Но тогда, вследствие аддитивности интеграла по отношению к областям интегрирования, заменой переменной интегрирования $r' = x + R_p$ сумму интегралов можно заменить интегрированием по всему пространству, т.е.

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \int G_0(\mathbf{r}-\mathbf{x}, E)V(\mathbf{x})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})d\mathbf{x}. \qquad (6)$$

Это преобразование ликвидирует сумму по решетке в функции Грина. Чтобы теперь избавиться от сингулярности, разложим G_0 по сферическим гармоникам

$$G_0(\mathbf{r}-\mathbf{x}, E) = q\sum_{lm} j_l(qr)[n_l(qx) - ij_l(qx)]Y_{lm}(\mathbf{r})Y^*_{lm}(\mathbf{x}) \qquad (7)$$

где j_l и n_l – сферические функции Бесселя и Неймана соответственно [3].

Y_{lm} – сферические гармоники. Разложение (7) справедливо, если $r<x$, в противном случае x и r следует поменять местами. Введем обозначения

$$\Phi^n_{lm}(q,\mathbf{k}) = \int n_l(qx)Y_{lm}(\mathbf{x})V(\mathbf{x})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})d\mathbf{x},$$
$$\Phi^j_{lm}(q,\mathbf{k}) = \int j_l(qx)Y_{lm}(\mathbf{x})\mathbf{V}(\mathbf{x})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})d\mathbf{x} \qquad (8)$$

Тогда формула (6) может быть представлена в двух формах:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = q\sum_{lm} j_l(qr)[\Phi^n_{lm}(q,\mathbf{k}) - i\,\Phi^j_{lm}(q,\mathbf{k})]\; Y_{lm}(\mathbf{r}); \qquad (9)$$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = q\sum_{lm} \Phi^j_{lm}(q,\mathbf{k})[n_l(qr) - ij_l(qr)]Y^*_{lm}(\mathbf{r}). \qquad (10)$$

Выражения (9) и (10) завершают решение поставленной задачи.

Литература

1. Немошкаленко В.В., Антонов В.Н. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Зонная теория металлов. Киев, 1985.
2. Нажалов А.И. Новая фрма кулоновского потенциала в кристаллах // Известия вузов. Физика. 1995. №5.
3. Никифоров А.Ф., Уваров В.В. Специальные функции математической физики. М., 1978.