

МОДЕЛЮВАННЯ ПАРАМЕТРІВ СПІН-ОРБІТАЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ

Запропоновано надійний метод розрахунку інтегралів спіно-орбітальної взаємодії для псевдопотенціального електронного спектру.

Сучасні дослідження електричних властивостей нових перспективних термоелектричних матеріалів не можливі без детального розрахунку зонної структури. Спін-орбітальне розщеплення приводить до зміни виродження зон, а у вузькозонних напівпровідниках ще і співрозмірне з шириною забороненої зони.

Однак, спроби розрахунку цих параметрів різними авторами виявляють неспівпадання. Тому в цій роботі конструювалась надійна техніка розрахунку спіно-орбітальної взаємодії для псевдопотенціального електронного спектру.

Матричні елементи спіно-орбітальної взаємодії у випадку псевдопотенціалу мають вид

$$\langle \mathbf{k}_i, v | W_{so} | \mathbf{k}_j, v' \rangle = (\mathbf{k}_i \times \mathbf{k}_j) \sigma_{vv'} \left[-i \lambda^s S^s (\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) + \lambda^a S^a (\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \right] \quad (1)$$

де $\lambda^s = (\lambda_1 + \lambda_2) / 2$, $\lambda^a = (\lambda_1 - \lambda_2) / 2$, (2)

описують симетричну та антисиметричну частину спіно-орбітальної взаємодії, $\sigma_{vv'}$ - спіновий оператор Паулі, v і v' - спінові індекси, \mathbf{k}_i , \mathbf{k}_j - вектори оберненої ґратки ($\mathbf{k}_i = \mathbf{k} + \mathbf{g}_i$; $\mathbf{k}_j = \mathbf{k} + \mathbf{g}_j$), S^s і S^a - симетричний та антисиметричний структурні фактори [1]. Для бінарних сполук λ_1 і λ_2 приймуть вигляд

$$\lambda_1 = \mu B_{nl}^{(1)}(\mathbf{k}_i) B_{nl}^{(1)}(\mathbf{k}_j) \quad (3)$$

$$\lambda_2 = \alpha B_{nl}^{(2)}(\mathbf{k}_i) B_{nl}^{(2)}(\mathbf{k}_j) \quad (4)$$

де μ - підгоночний параметр, α - підбирається так, щоб відношення

спін-орбітальної взаємодії для атомів в бінарній сполуці було таким, як і для вільних атомів.

Інтеграл B_{nl} - записують у виді [2]

$$B_{nl}^{(i)}(k) = C \int_0^{\infty} j_l(kr) R_{nl}^{(i)}(r) r^2 dr \quad (5)$$

де $R_{nl}^{(i)}(r)$ - радіальна частина хвильової функції, i - відповідає елементу бінарної сполуки ($i=1, 2$), j_l - сферична функція Бесселя.

Константа нормування C визначається з умови

$$\lim_{k \rightarrow 0} B_{nl}^{(i)}(k) \cdot k^{-l} = 1 \quad (6)$$

Для розрахунку інтеграла (5) використовувався метод Гауса восьмого порядку з точністю коренів і вагових коефіцієнтів до 10^{-16} . Елементарний відрізок інтегрування ділили навпіл, доки не була досягнута точність розрахунку 10^{-10} .

Розрахунок інтеграла (5) проводився з використанням аналітичної форми радіальної функції, одержаної за методом Roothaan - Hartree - Fock [3,4] і табульованої Herman - Skilman [5] і Climenti - Froese - Fisher [6].

В аналітичній формі радіальна функція має вид [3,4]

$$R_{nl}(r) = \sum_{p=1}^N C_{nlp} r^p \chi_{lp} \quad (7)$$

де N - число базисних функцій (орбіталей слетерівського типу), які визначаються як

$$\chi_{lp} = \left[(2n_{lp})! \right]^{-1/2} (2\xi_{lp})^{n_{lp} + 1/2} r^{n_{lp} - 1} e^{-\xi_{lp} r} \quad (8)$$

Параметри C_{nlp} , n_{lp} , ξ_{lp} і число N для кожного атома приведені в [3,4]. Як приклад, в таблиці 1 наведені параметри для $3p(\text{Zn})$ і $4p(\text{Te})$.

Використовуючи відомі співвідношення для сферичних функцій Бесселя

$$j_l(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2k}} r^{-1/2} I_{l+1/2}(kr), \quad (9)$$

а також радіальну хвильову функцію (7), інтеграл (5) можна

розрахувати аналітично[2].

$$B_{n_l}(k) = C \frac{k^l \sqrt{\pi}}{2^{l+1}} \sum_{p=1}^N C_{n_l p} [(2n_l)_p!]^{-\frac{1}{2}} (2\xi_{l p})^{n_l p + \frac{1}{2}} \cdot \frac{\Gamma(1+n_l p + 3)}{\sqrt{(\xi_{l p}^2 + k^2)^{l+n_l p + 3}} \Gamma(l + \frac{3}{2})} \cdot F\left(\frac{l+n_l p + 3}{2}, \frac{l-n_l p - 1}{2}, l + \frac{3}{2}, \frac{k^2}{\xi_{l p}^2 + k^2}\right), \quad (10)$$

Таблиця 1. Параметри для 3p(Zn) і 4p(Te) радіальної частини хвильової функції.

Zn			Te		
n_{lp}	ξ_{lp}	C_{nlp}	n_{lp}	ξ_{lp}	C_{nlp}
2	12,37110	-0,35894	2	33,61480	-0,00925
2	20,71820	-0,02867	2	22,33970	-0,22003
3	8,82555	-0,14269	3	12,13790	0,23812
3	6,89964	0,64545	3	10,60150	0,42691
3	4,13660	0,58274	4	7,18478	-0,58604
3	2,20119	0,02297	4	4,88471	-0,62258
			5	2,97927	-0,02040
			5	1,87617	0,00313
			5	1,22654	-0,00118

Константа C визначається із співвідношення

$$C^{-1} = \frac{\sqrt{\pi}}{2^{l+1}} \sum_{p=1}^N C_{n_l p} [(2n_l)_p!]^{-\frac{1}{2}} (2\xi_{l p})^{n_l p + \frac{1}{2}} \cdot \frac{\Gamma(l+n_l p + 3)}{\xi_{l p}^{l+n_l p + 3} \Gamma(l + \frac{3}{2})}, \quad (11)$$

де $F(a,b,c,d)$ - гіпергеометрична функція.

Таблиця 2. Результати розрахунку B_{n_l} з використанням аналітичної і табульованої радіальної хвильової функції.

k	$B_{31}(k)$ (Zn)					$B_{41}(k)$	
	HS (spline)	HS (Newton)	CFE (Newton)	RHF	[1]	HS (Newton)	[1]
(000)	0	0	0	0	0	0	0
(111)	0,76776	0,767962	0,747019	0,74228	0,64263	0,774809	0,59026
(200)	0,82958	0,829839	0,802957	0,79712	0,66482	0,838379	0,62239
(220)	0,91527	0,915634	0,874971	0,86743	0,64071	0,923694	0,61678
(311)	0,90487	0,905254	0,860177	0,85306	0,58477	0,906570	0,56440

Радіальна функція RHF (7) використовувалась також для чисельного інтегрування. Співпадання зазначених результатів з точністю до 10^{-6} говорить про стійкість процедури чисельного інтегрування. Інтегрування за табульованими радіальними функціями проводилось з використанням процедури інтерполяції за методом Ньютона і кубічними сплайнами. Для радіальних функцій Herman-Skilman результати інтегрування з використанням інтерполяції Ньютона і сплайнами наведені в таблиці 2 в колонках HS (Newton) і HS (Spline) відповідно. Використання табульованих функцій Charlotte-Froese-Fischer[6] та інтерполяції за методом Ньютона дає результат, який наведений в колонці CFF (Newton).

Співпадання вказаних результатів при використанні різних радіальних функції і методів інтерполяції говорить про стійкість чисельної процедури інтегрування і можливість використання результатів розрахунку, різних радіальних хвильових функцій, а також запропонованої в роботі методики розрахунку для дослідження електронного спектру з врахуванням спин-орбітальної взаємодії.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Masovic D.R., Vukajlovic F.R. // J.Comput.Phys.-1983.-**50**.-P.505-510.
2. Clementi E., Roetti C. At. Data Nucl. Data Tables.-1974.-177p.
3. McLean A.D., McLean R.S. At. Data Nucl. Data Tables.-1981.-197p.
4. Herman F., Skilman E. Atomic Structure Calculation.- New-York, 1966.-257p.
5. Froese Fischer C. Atomic Data, 1972.-301p.
6. Chelikowsky J.R., Cohen M.L. // Phys Rev.B.-1976.-**14**,N2.-P556-561.

SUMMARY

CHERNOV V.M.

SIMULATION OF SPIN-ORBIT INTERACTION PARAMETERS

The reliable method of the calculation of spin - orbit interaction integrals of pseudopotential electronical spectrum has been ordered.