

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



C36  
Ц-756

7/х. 74

P4 - 8086

3975/2-74

В.Ен, П.Цише

ОБОБЩЕННЫЕ ФАЗЫ РАССЕЯНИЯ ДЛЯ ДВУХ  
НЕПЕРЕКРЫВАЮЩИХСЯ ПОТЕНЦИАЛОВ

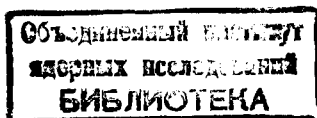
**1974**

ЛАБОРАТОРИЯ  
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P4 - 8086

В.Ен, П.Шише \*

ОБОБЩЕННЫЕ ФАЗЫ РАССЕЯНИЯ ДЛЯ ДВУХ  
НЕПЕРЕКРЫВАЮЩИХСЯ ПОТЕНЦИАЛОВ



---

\* Технический университет, Дрезден, ГДР

## 1. Введение

Потенциалы типа "маффин тин" (МТ-потенциалы) были введены в свое время для вычисления зонной структуры электронов в металлах с помощью метода присоединенных плоских волн (ППВ) и метода Корринги, Кона и Ростокера (ККР)<sup>/1/</sup>. В последнее время область применения МТ-потенциалов существенно расширилась. Они успешно применяются для вычисления поверхностных состояний электронов и описания рассеяния электронов низких энергий на поверхности металлов<sup>/2/</sup>, электронных явлений переноса в жидких металлах<sup>/3/</sup>, плотности состояний в сплавах<sup>/4/</sup> и аморфных полупроводниках<sup>/5/</sup>, электрон-фононного взаимодействия<sup>/6/</sup>, спектра электронов в комплексах и молекулах<sup>/7/</sup>. Это связано с тем, что введение МТ-потенциалов существенно упрощает решение соответствующей одночастичной задачи, причем во многих случаях потенциал описывается довольно точно с их помощью. Преимущество введения МТ-потенциалов очевидно, если мы описываем движение электрона как многократное рассеяние на них. К наиболее существенным преимуществам упомянутого метода относятся следующие:

1. В этом методе спектр электронов определяется сдвигами фаз рассеяния и положениями МТ-потенциалов в пространстве. Оказывается, что обычно достаточно учитывать только  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -фазы рассеяния, поскольку все остальные фазы являются пренебрежимо малыми.

2. Так называемые структурные константы, которые представляют собой характеристики пространственной структуры, не содержат МТ-потенциалов.

3. В простых металлах фазы рассеяния являются относительно малыми, тогда как в переходных металлах сдвиг  $d$ -фазы имеет резонанс. Это обстоятельство сильно облегчает качественное понимание зонной структуры и ряда других свойств металлов.

Следует отметить, что в ряде случаев возникает задача описания упругого рассеяния на конечной совокупности атомов. Этот подход оказывается весьма полезным для описания спектра электронов в веществах, у которых отсутствует дальний порядок, но сохраняется ближний. Например, в теории аморфных полупроводников используется кластерный подход для вычисления плотности состояний электронов<sup>/5/</sup>. Кластер, состоящий из нескольких МТ-потенциалов, успешно применяется и для изучения электронной структуры дефектов<sup>/8,9/</sup>, комплексов и молекул<sup>/7/</sup>. Кроме того, и для вычисления зонной структуры с помощью метода ККР в сложных структурах применение кластеров также может быть полезным<sup>/10/</sup>.

Кластер, состоящий из нескольких атомов, представляет собой несферический рассеиватель. Поэтому обычный метод частичных волн неприменим. Возникает вопрос, как можно удобным образом характеризовать упругое рассеяние на несферическом потенциале. В работе<sup>/11/</sup> вычислялась амплитуда рассеяния на несферическом рассеивателе с помощью разложения по сферическим гармоникам. В настоящей работе мы будем использовать разложение по собственным функциям  $S$ -матрицы, которое является обобщением метода частичных волн.

## 2. Обобщенный метод частичных волн

В методе обобщенных частичных волн упругое рассеяние описывается собственными амплитудами и обобщенными фазами. Свойства обобщенных фаз были обсуждены Демковым и Рудаковым<sup>/12/</sup>. Вычисление обобщенных фаз для несферического потенциала является сложной проблемой. Однако нами было доказано<sup>/13/</sup>, что в случае, когда рассеиватель состоит из неперекрывающихся МТ-потенциалов, эта задача сводится к системе однородных уравнений, а обобщенные фазы определяются секулярным уравнением. Для частного случая потенциалов нулевого радиуса этот результат был уже получен в работе<sup>/12/</sup>. Представляется интересным проанализировать поведение обобщенных фаз численным методом. В данной работе это было сделано для случая двухатомного кластера.

Как было доказано, обобщенные фазы  $\eta_\lambda$  определяются следующим образом. Будем предполагать, что потенциал представляет собой совокупность  $N$  МТ-потенциалов

$$V(\vec{r}) = \sum_{n=1}^N v_n(|\vec{r} - \vec{R}_n|), \quad (1)$$

где МТ-потенциалы  $v_n$  имеют сдвиги фаз рассеяния  $\eta_n^n$ . Волновая функция связана с собственной функцией  $S$ -матрицы и имеет следующий асимптотический вид:

$$\varphi_\lambda(\vec{r}) \rightarrow -\frac{1}{2i\kappa r} \left\{ A_\lambda(\vec{n}) e^{i(\kappa r + \eta_\lambda)} - A_\lambda^*(\vec{n}) e^{-i(\kappa r + \eta_\lambda)} \right\}; \vec{n} = \frac{\vec{r}}{r}, (2)$$

где  $A_\lambda(\vec{n})$  - собственные амплитуды и  $\kappa = \sqrt{E}$ .

Амплитуда рассеяния  $f(\vec{n}, \vec{n}')$  выражается через собственные амплитуды и обобщенные фазы:

$$f(\vec{n}, \vec{n}') = \frac{4\pi}{2i} \sum_{\lambda} (e^{2i\eta_\lambda} - 1) A_\lambda^*(\vec{n}) A_\lambda(\vec{n}'), \quad (3)$$

где  $\vec{n}$  и  $\vec{n}'$  - единичные векторы, характеризующие направления падающей и рассеивающей волн. Обобщенные фазы определяются секулярным уравнением

$$\det | N_{LL'}^{ij} - \cot \eta_\lambda J_{LL'}^{ij} + \delta_{ij} \delta_{LL'} \cot \eta_\lambda^i | = 0. \quad (4)$$

Структурные матрицы  $N_{LL'}^{ij}$  и  $J_{LL'}^{ij}$  могут быть записаны в виде:

$$N_{LL'}^{ij} = (1 - \delta_{ij}) 4\pi \sum_{L''} C_{LL'L''} i^{\ell - \ell' + \ell''} n_{L''}(\kappa R_{ij}) Y_{L''}(\vec{R}_{ij}), \quad (5)$$

$$J_{LL'}^{ij} = 4\pi \sum_{L''} C_{LL'L''} i^{\ell - \ell' + \ell''} j_{L''}(\kappa R_{ij}) Y_{L''}(\vec{R}_{ij}), \quad (6)$$

где  $j_\ell$ ,  $n_\ell$  - сферические функции Бесселя и Неймана,  $Y_L$  - вещественные сферические функции,  $\vec{R}_{ij} = \vec{R}_i - \vec{R}_j$ .  $L$

обозначает квантовые числа момента количества движения  $\ell, m$ .

Коэффициенты Клебша-Гордона  $C_{LL'L''}$  определяются уравнением

$$C_{LL'L''} = \int d\vec{n} Y_L(\vec{n}) Y_{L'}(\vec{n}) Y_{L''}(\vec{n}). \quad (7)$$

В следующем разделе уравнение (4) анализируется численным методом.

### 3. Численные результаты

Мы рассматриваем кластер, состоящий из двух одинаковых атомов. Для численных расчетов был взят МТ-потенциал углерода, который также использовался в работах<sup>15/</sup> для вычисления плотности состояний электронов аморфного углерода. Соответствующие фазы рассеяния показаны на рис.1. Сдвиг  $d$ -фазы оказывается пренебрежимо малым. Так как ранг определителя (4) зависит от числа МТ-фаз (1 s- и 3 p-фазы для каждого потенциала), мы получаем 8 обобщенных фаз. Численные результаты представлены на рис.2, причем расстояние между ямами равно расстоянию между ближайшими соседями в решетке алмаза. Поскольку двухатомный кластер является осесимметричным, обобщенные фазы характеризуются моментом количества движения  $m$  вдоль оси и четностью. В пределе длинных волн не-сферичность потенциала не имеет значения, и обобщенные фазы можно классифицировать по квантовому числу  $\ell_0$ , так что при  $\kappa \rightarrow 0$   $\eta_\lambda$  будет пропорциональна  $\kappa^{2\ell_0+1}$ , где

$\ell_0 = 0, 1, 2, \dots$ . Поэтому обобщенные фазы можно обозначать

аналогично сферическому случаю в виде  $(\ell_0, m)$ . Четность учитывается, как обычно, с помощью фактора  $(-1)^{\ell_0}$ . Из-за симметрии отражения все фазы, кроме  $m = 0$ , являются двухкратно вырожденными. При  $E > 0$  область изменения обобщенных фаз равна  $0 < \eta_\lambda < \pi$ . Как было показано в работе<sup>13</sup>,  $\eta_\lambda$  при  $E > 0$  не может принимать значения  $n\pi$ ; ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ). При  $E = 0$  две фазы (0,0) и (1,0) обращаются в нуль. Согласно теореме Левинсона данный кластер имеет два связанных состояния. Из теоремы

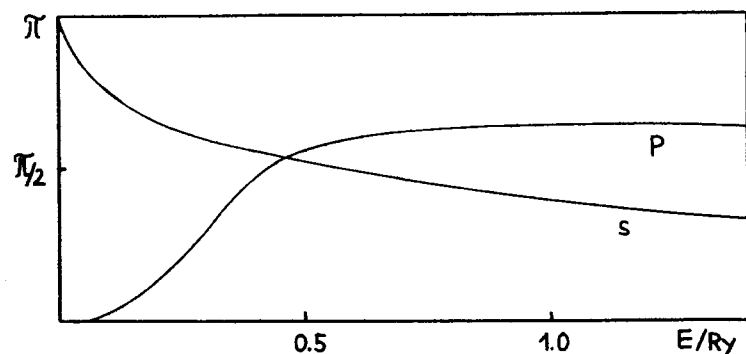


Рис. 1. Фазы рассеяния для MT-потенциала углерода

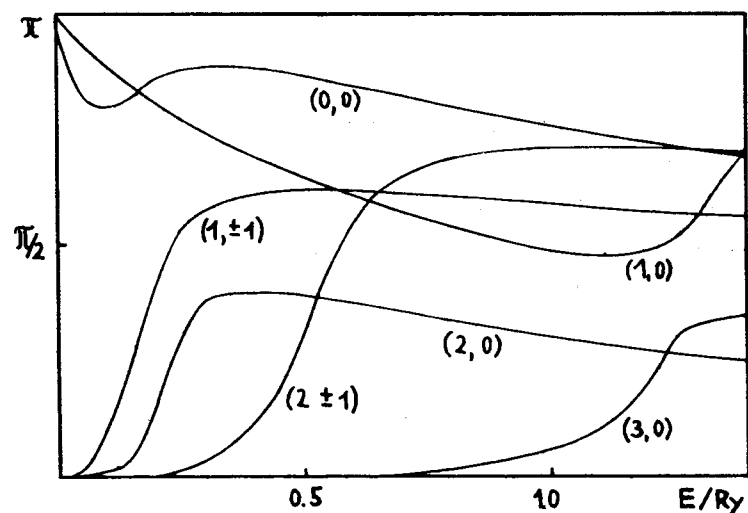


Рис. 2. Обобщенные фазы рассеяния для двухатомного кластера углерода

Неймана-Вигнера следует, что обобщенные фазы, относящиеся к одному и тому же неприводимому представлению, не могут пересекаться друг с другом <sup>/12/</sup>. Это видно из рис. 2, в частности, для пары фаз (0,0) и (2,0), а также для пары (1,0) и (3,0), которые принадлежат одинаковым неприводимым представлениям. Обобщенные фазы (1, 1) и (2, 1) не зависят от S-фазы MT-потенциалов. Многократное рассеяние между MT-потенциалами сводится к расщеплению слабого p-резонанса на два резонанса для обобщенных фаз (1, 1) и (2, 1).

Расчет обобщенных фаз с помощью уравнения (3) похож на вычисление связанных состояний для потенциала (1). Как было показано в работе <sup>/13/</sup>, уравнение для расчета уровней энергии связанных состояний получается непосредственно из (4), если мы переходим к  $E < 0$  и заменяем  $\cot \eta_\lambda \rightarrow i$ .

Следует отметить, что развитый нами метод можно обобщить на случай, когда совокупность MT-потенциалов окружена сферическим потенциалом. Эту модель можно также применить для описания упругого рассеяния электронов низких энергий на молекулах. Применимость MT-потенциалов в теории рассеяния на молекулах остается еще невыясненной. Имеются все основания считать, что этот подход будет весьма эффективным в этой области, так как рассматриваемая модель успешно использовалась для вычисления связанных состояний электронов в молекулах <sup>/7/</sup>.

### Литература

1. Дж.Зейман. Вычисление блоховских функций. Мир, Москва, 1973.
2. J.L.Beeby, J.Phys. C6, 1242 (1973).  
D.W.Jepsen, P.M.Marcus, G.Jona, Phys.Rev.Lett. 26, 1365 (1971).
3. R.Evans, D.A.Greenwood and P.Lloyd. Phys.Lett. 35A, 57 (1971).
4. B.L.Gyorffy and G.Stocks, J.de Physique 35 (C4), 75 (1974).
5. T.C.Mc Gill and J.Klima, Phys.Rev. B5, 1517 (1972).  
J.Keller in Computational Methods for Large Molecules and Localized States in Solid, eds. F.Herman, A.D.McLean and R.K.Nesbet, Plenum Press, 1972, p.341.  
W.John, phys. stat.sol. (b) 55, 801 (1973).
6. R.Evans, G.D.Gaspari and B.L.Gyorffy, J.Phys. F3, 39 (1973).
7. J.C.Slater and K.H.Johnson, Phys.Rev. B5, 844 (1972).  
K.H.Johnson and F.C.Smith. Phys.Rev. B5, 831 (1972).
8. G.D.Watkins and R.P.Messmer, Phys.Rev.Lett. 32, 1244 (1974).
9. P.Rennert and P.Ziesche, JINR, E4-6746, Dubna (1972).
10. W.John, G.Lehmann and P.Ziesche, phys.stat.sol. (b), 53,  
287 (1972).
11. J.Keller, P.V.Smith, J.Phys. C5, 1109 (1972).
12. Д.Н.Демков, В.С.Рудаков. ЖТФ 59, 2035 (1970).
13. W.John and P.Ziesche, phys.stat.sol. (b) 47, 555 (1971).

Рукопись поступила в издательский отдел  
II июля 1974 г.