РОЗРАХУНОК ЕЛЕКТРОННОГО ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРУ КРИСТАЛА GAN ЗА МЕТОДОМ ПРИЄДНАНИХ ПРОЕКТОРАМИ ХВИЛЬ З УРАХУВАННЯМ ЛОКАЛЬНИХ СИЛЬНИХ МІЖЕЛЕКТРОННИХ КОРЕЛЯЦІЙ

В.М. Швед
Національний університет "Львівська політехніка", кафедра НПЕ

Метод приєднаних проекторами хвиль поєднує риси псевдопотенціала і все електронного методу приєднаних плоских хвиль. Хвильова $|\Psi_n>$ та $|\tilde{\Psi}_n>$ псевдохвильова функції зв'язані між собою за допомогою проекційного оператора t так :

$$|\Psi_n>=|\tilde{\Psi}_n>+\sum_i(|f_i>-|\tilde{f}_i>)<\tilde{p}_i|\tilde{\Psi}_n>=t\,|\tilde{\Psi}_n>, \qquad (1)$$

де $|f_i>$ – атомна хвильова функція, $|\tilde{f}_i>$ – псевдоатомна хвильова функція, $<\tilde{p}_i|$ – функція проектор.

Математичне сподівання оператора фізичної величини A виражається через хвильові й псевдохвильові функції так:

$$<A>=\sum_n f_n<\Psi_n|A|\Psi_n>=\sum_n f_n<\tilde{\Psi}_n|t^*At\,|\tilde{\Psi}_n>. \qquad (2)$$

Густина електронів

$$n(r)=\tilde{n}(r)+\sum_R(n_1^R(r)-\tilde{n}_1^R(r)), \qquad (3)$$

енергія

$$E=\tilde{E}+\sum_R(E_1^R-\tilde{E}_1^R), \qquad (4)$$

де $\tilde{n}(r)=\sum_n f_n\tilde{\Psi}_n^*(r)\tilde{\Psi}_n(r)$ – повільно змінна густина, що обчислюється через плоскі хвилі; $n_1^R(r)=\sum_{i,j}r_{ij}^R f_i^*(r)f_j(r)$ та $\tilde{n}_1^R(r)=\sum_{i,j}r_{ij}^R\tilde{f}_i^*(r)\tilde{f}_j(r)$ – одновузлові внески, які знаходяться на радіальній сітці. Псевдохвильові функції основного стану знаходимо з системи рівнянь Кона-Шема

$$t^+Ht\,\tilde{\Psi}_n^*=e_n t^+t\,\tilde{\Psi}_n^*. \qquad (5)$$

Урахування сильних кореляцій електронів у кристалі GaN привело до суттєвого покращення зонних енергій фактично в рамках одноелектронного наближення.

[1] P. E. Blőchl, Projector augmented-wave method. Physical Review B, 50(23), 17953–17979, 1994.

Lviv Polytechnic National University Institutional Repository http://ena.lp.edu.ua