

РОЗРАХУНОК ЕЛЕКТРОННОГО ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРУ НАПІВПРОВІДНИКІВ ЗА ДОПОМОГОЮ ОПЕРАТОРА ВЛАСНОЇ ЕНЕРГІЇ

С.В. Сиротюк

Національний університет "Львівська політехніка", кафедра НПЕ

Більшість явищ і процесів у напівпровідниках і діелектриках тісно зв'язана з властивостями збуджених станів, недосяжних в одноелектронних теоріях. Вихід за межі одноелектронного наближення був запропонований у формалізмі GW [1], в основі якого лежить апроксимація оператора власної енергії Σ таким виразом:

$$\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; w) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' W(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; w) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; w + \omega') e^{i\omega' d}, \quad (1)$$

у якому d – мала часова величина, а W є екранованою Кулоною взаємодією,

$$W(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; w) = \int d\mathbf{r}'' v(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') e^{-1}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'; w), \quad (2)$$

$v(\mathbf{r} - \mathbf{r}'')$ – потенціал Кулона $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|$, а G – одночастинкова функція Гріна.

Квазічастинкові енергії e_{nk}^{qp} є розв'язком рівняння

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r})\right)\Psi_{nk}^{qp}(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; e_{nk}^{qp})\Psi_{nk}^{qp}(\mathbf{r}') = e_{nk}^{qp}\Psi_{nk}^{qp}(\mathbf{r}), \quad (3)$$

яке розв'язується за теорією збурення з малим параметром $(\Sigma - V_{xc}^{LDA})$.

Енергії e_{nk}^{qp} знаходили за таким алгоритмом: 1) функція Гріна $G^{LDA}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; it)$;

2) поляризація у наближенні RPA $P^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; it) = -iG^{LDA}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; it)G^{LDA}(\mathbf{r}', \mathbf{r}; -it)$;

3) перетворення Фур'є $P^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; it) \rightarrow P^0(\mathbf{k}, \mathbf{G}, \mathbf{G}'; iw)$; 4) діелектрична матриця $\epsilon(\mathbf{k}, \mathbf{G}, \mathbf{G}'; iw)$; 5) обернена діелектрична матриця $\epsilon^{-1}(\mathbf{k}, \mathbf{G}, \mathbf{G}'; iw)$;

6) екранований потенціал Кулона $W(\mathbf{k}, \mathbf{G}, \mathbf{G}'; iw)$; 7) обернене перетворення Фур'є потенціалу Кулона $W(\mathbf{k}, \mathbf{G}, \mathbf{G}'; iw)$; 8) обчислення Σ за формулою (1); 9) розрахування середніх $\langle \Psi_{nk} | \Sigma(it) | \Psi_{nk} \rangle$; 10) перетворення Фур'є знайдених середніх до уявних енергій; 11) інтерполювання середніх значень власної енергії; 12) обчислення квазічастинкових поправок до власних значень енергії у наближенні LDA зі збуренням $(\Sigma - V_{xc}^{LDA})$.

[1] L. Hedin, Phys. Rev. **139**, A796 (1965)

[2] F. Aryasetiawan and O. Gunnarsson, Rep. Progr. Phys. **61**, 237 (1998)