

УДК 546.41-31+539.211

©1994

РАСЧЕТ ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ LiCl ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ С УЧЕТОМ ЭНЕРГИИ САМОДЕЙСТВИЯ

М.А.Бунин, И.И.Гегузин

В рамках теории функционала локальной электронной плотности предложен неэмпирический метод учета поправки на самодействие (SIC) к потенциалу кристалла. Получено выражение для самосогласованного muffin-tin-SIC потенциала, учитывающее электронейтральность элементарной ячейки. Разбиение пространства на области выполняется так же, как и для потенциала основного состояния. Выполнен самосогласованный расчет электронного строения LiCl, а также спектра линейного коэффициента поглощения. Энергии переходов под эксперимент не подгонялись. В области выше $\sim 2.5\text{eV}$ от края форма и положение характерных деталей рассчитанного спектра поглощения хорошо согласуются с измеренными. В этой области форма оптического спектра определяется в основном зонными эффектами. В непосредственной близости к краю следует учитывать электрон-дырочное взаимодействие, которое сильно изменяет спектр основного состояния.

Расчеты спектра элементарных возбуждений широкощелевых диэлектриков (щелочно-галогидных кристаллов — ШГК) вблизи фундаментального края поглощения методами теории функционала электронной плотности (ТФП) до настоящего времени не давали удовлетворительных результатов. Считается, что основной источник ошибок — это неправильное описание обменно-корреляционных вкладов в энергию возбужденного оптического состояния, требующих учета нелокальности потенциала. Если эти вклады малы, ТФП дает вполне приемлемые результаты. Так, для кристалла LiH, элементарная ячейка которого содержит всего 4 электрона, расчет оптических спектров методом ППВ со слэтеровским обменом хорошо воспроизводит экспериментальные кривые, значение ϵ_∞ и ширину запрещенной полосы E_g . Оптические спектры этого ШГК в основном определяются зонными эффектами. Электрон-дырочное взаимодействие трансформирует только узкую область вблизи края ($\sim 0.3\text{eV}$) и не сказывается на остальной части спектра [1].

Пример гидроксида лития позволяет предположить, что неэмпирический одноэлектронный подход позволил бы объяснить оптические спектры ШГК. Однако известные из литературы основанные на первых принципах одноэлектронные расчеты не приводили к успеху в объяснении этих спектров (см. ссылки в [2,3]). По нашему мнению, применять такую модель в задаче об оптических спектрах широкощелевых диэлектриков возможно, если использовать потенциал, адекват-

ный рассматриваемому физическому процессу. В потенциале основного состояния кристалла вычисляется энергия электрона в поле всех N электронов ячейки. Однако для оптических спектров ближе к реальности модель, где рассматривается взаимодействие электрона, перешедшего в свободные состояния, с $N-1$ электронами и дыркой в валентных состояниях. Если полагать, что дырку можно учесть, например, методами теории дефектов, то описание основного состояния оптического перехода формально напоминает один из способов учета поправки на самодействие (SIC — self-interaction correction) к энергии основного состояния в локальном приближении ТФП (ЛФП). Упоминание об этом имеется в обзоре [4].

Свойства энергии самодействия и ее роль в теории спектров синхротронного излучения и физических свойств веществ в последние годы исследуются весьма интенсивно [5,6]. Успехи применения этой теории для металлов систематизированы в монографии [6] и не нуждаются в комментариях. Сложность расчетов соответствующих вкладов и поправок в диэлектриках позволила исследовать только основные тенденции изменений в спектре элементарных возбуждений относительно основного состояния [5,7]. С учетом самодействия в базе локализованных орбиталей метода ЛКАО рассчитаны плотности состояний шести ШГК [8]. Ячеечный потенциал с учетом SIC использован в [9] для расчета методом ЛМТО-ПАС электронного строения и плотностей валентных состояний MgO и LiF. В этой работе для построения потенциала использована идея, предложенная Либерманом [10].

Нам не известны одноэлектронные расчеты оптических спектров широкощелевых диэлектриков в SIC-приближении. Эта поправка ни разу не использовалась в наиболее мощных основанных на первых принципах методах зонных одноэлектронных расчетов — ККР, ПШВ. Причина — отсутствие в литературе методов вычисления потенциала, столь же удобных, как в [11,12], обеспечивших в 70–80-х годах прогресс в расчетах электронного строения кристаллов.

Цель работы состоит в исследовании возможности одноэлектронного описания оптических спектров широкощелевых диэлектриков с помощью безбазисного расчета с потенциалом, учитывающим энергию самодействия.

Мы получили выражение для самосогласованного MT-SIC потенциала, учитывающее электронейтральность ячейки. При этом для удобства расчетов и сравнения с основным состоянием сохраняется способ разбиения пространства ячейки, принятый для последнего. Требование электронейтральности представляется нам существенным для правильного вычисления энергий в этом методе. Выполнен самосогласованный SIC-расчет электронного строения LiCl, матричных элементов импульса и оптических функций. В расчет не вносились никакие поправки для исправления энергий переходов.

1. MT-SIC потенциал

Перейдем к выводу формул для MT-SIC потенциала. Рассмотрим кристалл, элементарная ячейка которого содержит N электронов и M атомов. Для основного состояния кристалла функционал полной

энергии можно записать в виде

$$E^0[\rho(\mathbf{r})] = T[\rho(\mathbf{r})] + \iint_{\Omega} \frac{\rho(\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r})}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} d\mathbf{r}' d\mathbf{r} + \int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}[\rho(\mathbf{r})] d\mathbf{r} - N \sum'_{n,s,s'} \frac{Z_s Z_{s'}}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{s'} - \mathbf{r}_s|}, \quad (1)$$

где первое слагаемое — кинетическая энергия; второе — кулоновская энергия электронов (сюда включен вклад электрон-ядерного взаимодействия); третье — обменно-корреляционная энергия, которую часто вычисляют в локальном приближении; четвертое — маделунговский вклад от поля точечных зарядов ионов, находящихся в узлах решетки (штрих означает, что в этой сумме уже учтен вклад самодействия, т.е. $s \neq s'$). Варьирование этого функционала при условии электронейтральности ячейки Ω

$$\int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = N \quad (2)$$

дает известные выражения для МТ потенциала основного состояния кристалла [11,12].

Введем поправку на самодействие (SIC), воспользовавшись идеей, предложенной в [10]. Потенциал будем строить в МТ-форме, стараясь сохранить связь с выражениями для потенциала основного состояния [11] и соответствующее разбиение пространства ячейки. Это облегчит сравнение результатов и позволит в наиболее удобной форме использовать имеющиеся алгоритмы расчетов. Для обозначений используем верхний индекс *mt* или *sic*, чтобы различать соответствующие параметры. Кроме того, потребуем сохранения электронейтральности ячейки.

Рассмотрим ионный кристалл, основная часть электронной плотности которого локализована вблизи ядер, а в межсферной области (область Ω_{II}^{mt} ; рис. 1) выполняется условие

$$\int_{\Omega_{II}^{mt}} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} < 1, \quad (3)$$

т.е. вне *mt*-сфер находится менее одного электрона. В каждую *s*-ую *mt*-сферу ячейки впишем сферу меньшего радиуса $R_s^{sic} < R_s^{mt}$ с центром в той же точке. Пространство ячейки разбивается на области: Ω_I^{sic} — внутреннюю часть сфер с радиусами R_s^{sic} (*sic*-область), внешнюю часть Ω_{II}^{sic} , состоящую из всех сферических слоев между сферами R_s^{mt} и R_s^{sic} ($s = 1, \dots, M$) и межсферного пространства Ω_{II}^{mt} (рис. 1). При этом внутри каждой *mt*-области потенциал остается сферически-симметричным.

В целом потенциал атома s ячейки можно представить в виде

$$v(\mathbf{r}) = \begin{cases} v_1^s(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_s|), & |\mathbf{r} - \mathbf{R}_s| \leq R_s^{\text{sic}}, \\ v_2^s(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_s|), & R_s^{\text{sic}} < |\mathbf{r} - \mathbf{R}_s| \leq R_s^{\text{mt}}, \\ v_3 = \text{const}, & \mathbf{r} \in \Omega_{\text{II}}^{\text{mt}}, \end{cases} \quad (4)$$

где \mathbf{R}_s — положения атомов в ячейке. Значения R_s^{sic} находятся из условия

$$\int_{\Omega_{\text{II}}^{\text{sic}}} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1, \quad (5)$$

где интегрирование выполнялось по области $\Omega_{\text{II}}^{\text{sic}}$, внешней по отношению к вписанным сферам R_s^{sic} .

Такой способ построения MT-SIC потенциала кристалла возможен и в случае, когда условие (3) заменяется на противоположное. Его подробное рассмотрение выходит за рамки настоящей работы. Важно, чтобы радиусы sic-сфер выбирались в соответствии с условием (5).

Учесть поправку на самодействие в функционале (1) можно, вычитая из $E^0[\rho(\mathbf{r})]$ энергии кулоновского и обменного взаимодействия электрона с самим собой. Для вычисления этих вкладов удобно применить предложенный выше способ разбиения пространства ячейки вместе с идеей Либермана о построении потенциала, учитывающего SIC. Согласно (5), в области $\Omega_{\text{II}}^{\text{sic}}$ находится единичный электронный заряд. Соответствующая ему электронная плотность — это сумма вкладов периферийных частей волновых функций всех атомов ячейки и ее нельзя приписать ни одной конкретной оболочке. Тогда в вычитаемых из

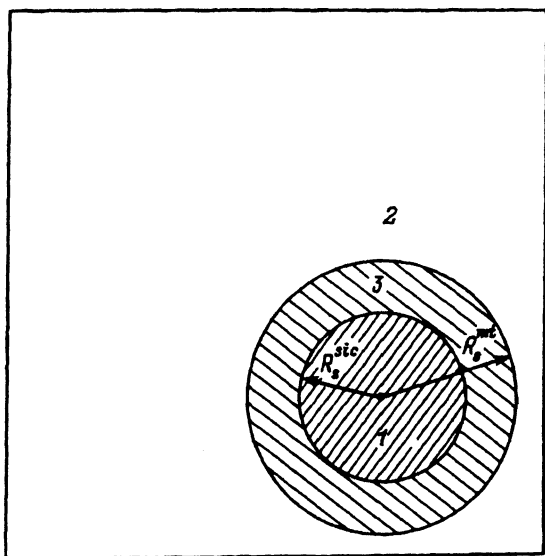


Рис. 1. Разбиение пространства элементарной ячейки Ω .
 (1) = Ω_s^{sic} , (2) = $\Omega_{\text{II}}^{\text{mt}}$, (1)+(2) = Ω_s^{mt} . $\Omega_{\text{I}}^{\text{sic}} = \sum_s \Omega_s^{\text{sic}}$, $\Omega_{\text{I}}^{\text{mt}} = \sum_s \Omega_s^{\text{mt}}$.

$E^0[\rho(\mathbf{r})]$ самоэнергетических вкладов достаточно ограничиться областью интегрирования $\Omega_{\text{II}}^{\text{sic}}$, чтобы получить функционал с поправкой на самодействие

$$E^{\text{sic}}[\rho(\mathbf{r})] = E^0[\rho(\mathbf{r})] - \left\{ \iint_{\Omega_{\text{II}}^{\text{sic}}} \frac{\rho(\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r})}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} d\mathbf{r}' d\mathbf{r} + \int_{\Omega_{\text{II}}^{\text{sic}}} \rho(\mathbf{r})\varepsilon_{xc}[\rho(\mathbf{r})] d\mathbf{r} \right\}. \quad (6)$$

Такая форма записи поправки на самодействие (6) аналогична методу ее учета, предложенному в [10], и близка к общим формулам [4,7]. Варьирование (6) при условиях (2) и (5) дает выражения для локальных представлений $v_1^s(r)$, $v_2^s(r)$ и v_3 потенциала кристалла, учитывающих поправку на самодействие

$$v_1^s(r) = -2Z_s/r + v_s^{\text{coul}}(r) + v_s^{\text{xc}}(r) - 2 \sum_{s'} M_{ss'} \Delta Z_{s'} + \lambda (R_s^{\text{sic}}), \quad (7)$$

$$v_2^s(r) = -2\Delta Z_s/r - 2 \sum_{s'} M_{ss'} \Delta Z_{s'}, \quad (8)$$

$$v_3 = (\Omega_{\text{II}}^{\text{mt}})^{-1} \sum_s \left\{ 3(4\pi/3)^{1/3} \left[\Omega^{2/3} - (\Omega_s^{\text{mt}})^{2/3} \right] \Delta Q_s - 2 \sum_{s'} M_{ss'} \Delta Q_{s'} \right\}, \quad (9)$$

где $r \in \Omega_s^{\text{mt}}$; α — параметр обмена; s — номер атома в ячейке; $M_{ss'}$ — матрица постоянных Маделунга; Z_s — заряды ядер; $\Delta Z_s = Z_s - Q_s$ — избыток положительного заряда в соответствующей сфере (sic или mt); ΔQ_s — электронный заряд внутри сферического слоя; численное значение $\lambda (R_s^{\text{sic}})$ определяется из условия шивки потенциалов на радиусе сферы R_s^{sic} ; $v_s^{\text{coul}}(r)$ — кулоновский потенциал; $v_s^{\text{xc}}(r)$ — обменно-корреляционный вклад в потенциал сферы s (чаще всего его вычисляют в приближении статистического обмена, которым будем пользоваться и мы); Ω — объем ячейки; Q_s^{mt} , Q_s^{sic} — электронные заряды внутри mt- или sic-сфер.

2. Влияние самодействия на электронное строение LiCl

Предложенный метод построения MT-SIC потенциала применен для расчета оптических спектров LiCl. Расчет основного состояния LiCl выполнен методом ППВ со слэтеровским обменом (значение $\alpha = 1$). Радиусы mt-сфер выбраны из условия минимума электронной плотности в межсферной области (табл. 1). В sic-расчете, стартовым был потенциал основного состояния. При самосогласовании требовалось 12 итераций для достижения разности электронных плотностей 0.001 на двух последовательных итерациях. Поскольку валентная электронная плотность сосредоточена в основном на хлоре ($\sim 98\%$ заряда), в состав области $\Omega_{\text{II}}^{\text{sic}}$ целесообразно включать только окрестность этого атома и $\Omega_{\text{II}}^{\text{mt}}$, а для Li радиусы mt- и sic-сфер сделать одинаковыми. Получившиеся в результате величины электронных зарядов внутри mt-сфер

Параметры расчета LiCl и электронные заряды сфер

| Потенциал | Радиусы, а.е. ($\frac{m\text{t}}{\text{sic}}$) | | Заряды внутри $m\text{t}$ -сфер (электронов) | |
|--------------------|---|-----------------------|---|-------|
| | Li | Cl | Li | Cl |
| Основное состояние | 1.757 | 3.100 | 2.04 | 17.57 |
| С учетом SIC | $\frac{1.757}{1.757}$ | $\frac{3.100}{2.868}$ | 2.04 | 17.58 |

приведены в табл. 1. Методика расчета оптических спектров в основном аналогична описанной в [1] и основана на вычислении матричных элементов импульса $p_{if,k}$ и $k\text{p}$ -интерполяции по зоне Бриллюэна.

Одной из важных характеристик кристалла является ширина запрещенной полосы. Для потенциала основного состояния расчет дает 7.47 eV. При учете SIC получается 8.33 eV, что лучше, но все же меньше экспериментального значения 9.4 eV [13].

Поскольку расчет оптических спектров базируется на матричных элементах импульса $p_{if,k}$, целесообразно сравнить значения этой величины, вычисленные при разных потенциалах: основного состояния и с учетом SIC в разных точках зоны Бриллюэна для разных энергий переходов (сравнение удобно проводить для квадратов $p_{if,k}$; табл. 2). Видно, что поправка на самодействие заметно влияет на $p_{if,k}$. Для всех энергий и точек зоны Бриллюэна (и не только тех, что представлены в табл. 2) $(p_{if,k}^{\text{sic}})^2 > (p_{if,k}^{\text{gs}})^2$, причем более значительные изменения — вблизи дна полосы проводимости (в оптических спектрах ему соответствует край фундаментального поглощения ω_0). При увеличении энергии различия уменьшаются, но зависят от точки k . Таким образом,

Таблица 2

Квадраты матричных элементов оператора импульса

$$(p_{if,k})^2 = \left(-i \int_{\Omega} \psi_{fk}^*(r) \nabla \psi_{ik}(r) dr \right)^2 \quad \text{Ru для}$$

переходов в отдельных точках k зоны Бриллюэна

| Точка $k \in 4(2\pi/a)$ | Зоны $i \rightarrow f$ | $p_{if}^{\text{sic}}/p_{if}^{\text{gs}}$ | $\omega_{if}^{\text{sic}}/\omega_{if}^{\text{gs}}$ |
|-------------------------|------------------------|--|--|
| Г | 1 → 4 | 0.182/0.169 | 0.612/0.549 |
| | 1 → 5 | 0.285/0.281 | 0.962/0.970 |
| | 1 → 9 | 0.236/0.231 | 1.146/1.165 |
| X | 2 → 4 | 0.303/0.295 | 0.780/0.766 |
| | 1 → 5 | 0.153/0.145 | 0.920/0.884 |
| | 2 → 5 | 0.176/0.166 | 0.817/0.779 |
| | 2 → 9 | 0.178/0.174 | 1.352/1.370 |
| (321) | 3 → 4 | 0.298/0.271 | 0.771/0.731 |
| | 3 → 8 | 0.130/0.116 | 1.295/1.257 |
| | 1 → 8 | 0.102/0.098 | 1.370/1.368 |

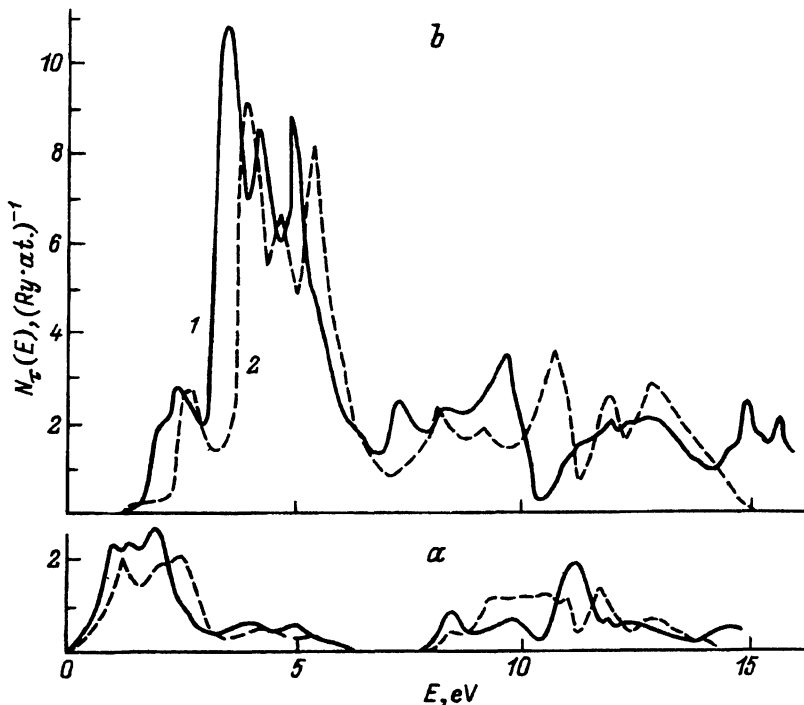


Рис. 2. Локальные плотности состояний для атома хлора в LiCl: a_{1g} (а), e_g (б). 1 — потенциал с учетом SIC, 2 — потенциал основного состояния. Нуль шкалы энергий соответствует дну полосы проводимости.

учет SIC приводит к сложным (во всяком случае — нелинейным) изменениям в величинах $p_{ij,k}$. Поскольку в последних содержится информация и о волновых функциях, и о локальных парциальных плотностях состояний $N_\tau(E)$ (τ — индекс для обозначения локальной симметрии относительно определенного атома ячейки), то для большей наглядности следует разделить эти факторы. Вначале мы рассмотрели волновые функции состояний с угловыми моментами $l = 0, 1, 2$ при энергиях в интервале $\sim 2 \text{ Ry}$ от дна полосы проводимости, а также у вершины валентной полосы. Для обоих потенциалов амплитуды радиальных частей волновых функций отличаются в среднем на 0.1–0.5% и в любом случае не более чем на 1%. Сравнение плотностей состояний (их подробный анализ выходит за рамки данной работы и будет проведен отдельно) показывает, что этот фактор значительнее. Он проявляется в неодинаковом сдвиге отдельных участков $N_\tau(E)$ и перераспределении их вкладов. Характер изменений зависит от симметрии состояний относительно соответствующего центра (Li или Cl в нашем случае).

Для иллюстрации на рис. 2 изображены a_{1g} - и e_g -состояния хлора. Рассматривая эти кривые, можно заключить, что в SIC-расчете изменяется электронное строение, хотя основные черты распределения $N_\tau(E)$ основного состояния могут сохраняться. Такой результат вполне согласуется с известным свойством поправки на самодействие, которая должна в большей степени влиять на энергии состояний и в меньшей — на их волновые функции.

3. Фундаментальный край поглощения LiCl

Из экспериментальных данных по оптическим функциям LiCl в широком интервале энергий нам известен только спектр поглощения $\mu(\omega)$ из монографии [3]. На рис. 3,а полученный из SIC-расчета спектр поглощения сравнивается с экспериментом. На рис. 3,б сопоставлены теоретические $\mu(\omega)$ для двух потенциалов — с учетом SIC и основного состояния. В расчет не вводились никакие поправки для подгонки значений ω под эксперимент и не учитывалось размазывание в интервале времени жизни.

Сравним вначале $\mu(\omega)$ для SIC и основного состояния (рис. 3,б). Спектр основного состояния сдвинут в сторону меньших энергий по отношению к спектру, рассчитанному с учетом SIC. Кроме того, в нем несколько иначе распределены интенсивности основных деталей, хотя сходство с экспериментальной кривой на рис. 3,а сохраняется. Важно отметить, что сдвиг любой из кривых на постоянную величину не приводит к их совпадению. Причина этого обусловлена обсуждавшимся выше различием в матричных элементах $p_{if,k}$ и в конечном счете разным, хотя и отчасти похожим, электронным строением для двух рассматриваемых потенциалов.

Теперь можно сопоставить результаты SIC-расчета с экспериментом, начав с области, более удаленной от фундаментального края ω_0 .

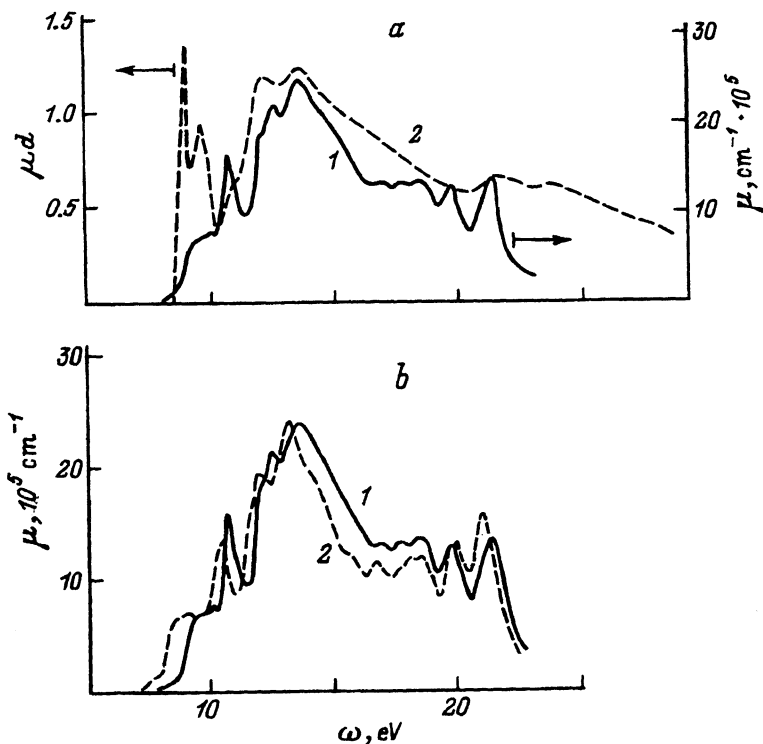


Рис. 3. а) Спектр поглощения $\mu(\omega)$ для LiCl: 1 — расчет с SIC-МТ потенциалом, 2 — эксперимент по данным из [3]. б) Расчеты для потенциалов: 1 — SIC-МТ, 2 — основного состояния.

В области $\omega > \omega_0 + 2.5 \text{ eV}$ расчетная кривая хорошо согласуется с экспериментальной не только по относительной интенсивности деталей спектра, но и (что весьма важно для оценки качества результатов) по их положению. Максимуму в районе 11–12 eV соответствует наплыв на экспериментальной кривой. В области 12–15 eV главные максимумы обоих спектров практически совпадают. При энергиях $\omega > 23 \text{ eV}$ спад на расчетной кривой обусловлен чисто техническим ограничением верхней границы спектра. В целом для этой области частот согласие с экспериментом хорошее. Тогда оптическое поглощение LiCl для $\omega > \omega_0 + 2.5 \text{ eV}$ объясняется межзонными переходами. При этом важно отметить, что сдвиг спектра $\mu(\omega)$ основного состояния на постоянную величину (чем часто заменяют поправку на самодействие) позволяет улучшить согласие с экспериментом только в одном узком интервале частот. Для получения в широком диапазоне частот вдали от края близких к эксперименту энергий переходов и формы оптических спектров необходим потенциал, учитывающий самодействие.

Рассмотрим область вблизи порога. В интервале $\omega_0 < \omega < \omega_0 + 2.5 \text{ eV}$ электрон-дырочное взаимодействие сильно трансформирует спектр: вместо ступеньки в расчете на экспериментальной кривой — два ярких максимума, первый из которых имеет, по всей вероятности, экситонную природу. Положение второго соответствует ступеньке в зонном спектре $\mu(\omega)$. Его происхождение, возможно, удастся объяснить, рассчитав трансформацию соответствующей части плотности состояний в поле дырки. Исследования в этом направлении ведутся.

Таким образом, в спектре можно выделить две области. Первая — вблизи края, где значительно влияние электрон-дырочного взаимодействия, создающего экситонные линии и изменяющего форму зонных оптических спектров. В LiCl такой интервал занимает 2–2.5 eV по сравнению с 0.2–0.3 eV в оптическом спектре LiH [1]. Это позволяет предположить, что диапазон значений ω , где необходимо учитывать дырку, зависит от числа электронов в ячейке. Возможно, в ШГК с большим атомным весом ширина этой области будет еще больше. Учет дырки возможен методами теории дефектов. Во второй области, более далекой от края, форма оптического спектра определяется межзонными переходами. Для достижения согласия с экспериментом здесь следует учесть самодействие при построении потенциала кристалла.

Итак, предложен способ учета поправки на энергию самодействия в методе функционала локальной электронной плотности. Минимизация такого функционала с учетом требования электронейтральности ячейки дает выражение для потенциала, сходное с известными формулами потенциала основного состояния [11,12], удобное для расчетов электронного строения из первых принципов *mt*-методами типа ККР или ППВ.

Расчет LiCl показал, что влияние поправки на самодействие в основном проявляется в изменении деталей электронного строения. В то же время могут сохраняться характерные черты распределения парциальных плотностей состояний, рассчитанные для потенциала основного состояния кристалла.

На примере оптического поглощения LiCl показана пригодность предложенной схемы для расчета оптических спектров широкощелевых диэлектриков. Учет энергии самодействия в потенциале, вычисля-

емом при условии электронейтральности ячейки, позволяет интерпретировать эксперимент, не привлекая поправки к теории вроде сдвига шкалы энергий. Такой подход к задаче об оптических спектрах ШГК лучше согласуется с экспериментом, чем модель, основанная на потенциале основного состояния.

В спектре фундаментального поглощения LiCl можно выделить две области: в ближайшей к краю электрон-дырочное взаимодействие сильно изменяет спектр межзонных переходов, тогда как в более далекой от края области спектр определяется межзональными переходами.

Авторы благодарны В.А.Лобачу за любезно предоставленные отписки работ.

Список литературы

- [1] Гегузин И.И., Бунин М.А., Дацюк В.Н. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 12. С. 15–21.
- [2] Кацнельсон А.А., Степанюк В.С., Фарберович О.В., Сас А. Электронная теория конденсированных сред. М.: Изд-во МГУ, 1990. 240 с.
- [3] Соболев В.В. Экситоны и зоны щелочно-галлоидных кристаллов. Кишинев: Штиинца, 1984. 302 с.
- [4] Лобач В.А. Метод функционала плотности и элементарные возбуждения в диэлектриках. Свердловск, 1989. 88 с.
- [5] Hedin L. // Nucl. Instr. Meth. in Phys. Res. 1991. V. A308. P. 169–177.
- [6] Теория неоднородного электронного газа / Под ред. С.Лундквиста и Н.Марча. М.: Мир, 1987. 400 с.
- [7] Hybertsen M.S., Louie S.G. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. P. 5390–5413.
- [8] Erwin S.C., Lin C.C. // J. Phys. C. 1988. V. 21. N 23. P. 4285–4309.
- [9] Кулябин Б.Е., Лобач В.А. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 4. С. 1246–1248.
- [10] Liberman D.A. // Phys. Rev. B. 1970. V. 2. N 2. P. 244–248.
- [11] Asano S., Yamashita J. // J. Phys. Soc. Japan. 1976. V. 23. P. 714–727.
- [12] Вольф Г.Ф., Дякин В.В., Широковский В.П. // ФММ. 1974. Т. 38. № 5. С. 949–956.
- [13] Baldini G. // Phys. Status Solidi. 1970. V. 38. P. 325–329.

Ростовский-на-Дону государственный университет
НИИФ

Поступило в Редакцию
6 октября 1993 г.