

## ПРОЦЕДУРА ЧЕДІ-КОЕНА ДЛЯ НИЗЬКОСИМЕТРИЧНИХ СЕРЕДОВИЩ

М.І. Колінько, А.Г. Невідомський

Львівський національний університет імені Івана Франка

290005 Львів, вул. Кирила і Мефодія 8а

Запропоновано узагальнений метод побудови спеціальних точок для чисельного обчислення інтегралів від періодичних функцій за об'ємом зони Бріллюена у випадку систем низької симетрії. Обговорюється точність методу. Представлено множини точок і відповідних вагових множників, що були отримані даним методом, для усіх орторомбічних ґраток. Показана можливість застосування методу у спектральних розрахунках.

### Вступ

Багато розрахункових задач, пов'язаних з кристалічними об'єктами, як-то визначення самоузгодженого енергетичного спектру, обчислення середнього за станами в межах поверхні Фермі, розрахунки діелектричної проникності та узагальнених сприйнятливостей, часто вимагають інтегрування періодичної функції хвильового вектора за об'ємом зони Бріллюена (ЗБ) чи окремими її частинами. Метод чисельного обчислення таких інтегралів був запропонований [1] Чеді та Коеном (ЧК). Основна ідея цього методу полягає у зведенні шуканого інтеграла до лінійної комбінації значень підінтегральної функції в певних "спеціальних" точках, що лежать у незвідній частині ЗБ. Використання цього методу виявилось найбільш корисним у складних розрахунках, коли обчислення підінтегральної функції навіть для однієї точки ЗБ вимагає значних машинних ресурсів.

Неоднозначність побудови множин спеціальних точок та вагових коефіцієнтів зумовила появу кількох альтернативних методів [2-5]. Монхорст і Пек [2] запропонували формули, що породжують

спеціальні точки для простої кубічної і ГЦК ґраток з одиничними ваговими коефіцієнтами, які на 2<sup>у</sup>-му кроці збігаються з оригінальними точками Чеді та Коена, що отримані ними на  $\nu$ -му кроці наближення. Еварестов і Смірнов [3] запропонували алгоритм у межах методу розширеної елементарної комірки, який зводиться до розбиття ЗБ на менші комірки однорідною сіткою, вузлові точки якої і є шуканими спеціальними точками, а спосіб розбиття визначають з міркувань найвищої точності. Подібний алгоритм був запропонований у [4], де подано метод знаходження оптимального розбиття.

У даній роботі нами зроблено спробу використати переваги різних методів побудови множин спеціальних точок і сформульовано альтернативний підхід, близький до алгоритму ЧК, який дозволяє отримувати ефективні набори спеціальних точок для низькосиметричних кристалів. Необхідність такого методу видається тим більшою, що у всіх роботах, починаючи з оригінальної статті Чеді та Коена, наводились схеми побудови множин точок лише для ґраток кубічної і гексагональної сингоній. Проте для низькосиметричних об'єктів виникає неоднозначність, зумовлена різними

можливими співвідношеннями між параметрами елементарної комірки. Запропонований метод досліджено на прикладі орторомбічної сингонії, а отримані множини точок було перевірене при зонно-енергетичних та спектральних розрахунках [6,7].

### Теорія методу

Розглянемо [1] достатньо гладку періодичну функцію хвильового вектора  $g(\mathbf{k})$  з періодом довільного вектора оберненої ґратки  $\mathbf{G}$ . Розкладемо її у ряд Фур'є:

$$g(\mathbf{k}) = f_0 + \sum_{m=1}^{\infty} g_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} \quad (1)$$

Сконструюємо таку функцію  $f(\mathbf{k})$ , яка володіє повною симетрією ґратки, тобто:

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1}{n_T} \sum_i g(T_i \mathbf{k}), \quad (2)$$

де  $T_i$  пробігає усі операції точкової групи симетрії ґратки  $T$ , а  $n_T$  – порядок цієї групи. Функцію  $f(\mathbf{k})$  можна записати у вигляді ряду за симетризованими плоскими хвилями:

$$f(\mathbf{k}) = f_0 + \sum_{m=1}^{\infty} f_m A_m(\mathbf{k}), \quad (3)$$

де

$$A_m(\mathbf{k}) = \sum_{|\mathbf{R}|=\mathbf{C}_m} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}, \quad m=1,2,\dots \quad (4)$$

Сумування відбувається за векторами  $\mathbf{R}$ , пов'язаними з типовим вектором трансляції  $\mathbf{R}_m$  операціями групи  $T$ . Причому вектори  $\mathbf{R}_m$  впорядковані так, що  $0 < C_m \leq C_{m+1}$ . Враховуючи, що інтеграл від  $A_m(\mathbf{k})$  за об'ємом ЗБ рівний нулеві (тут  $\Omega$  – об'єм примітивної комірки):

$$\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{\text{ЗБ}} A_m(\mathbf{k}) d^3k = 0, \quad m=1,2,\dots, \quad (5)$$

а середнє

$$\bar{f} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{\text{ЗБ}} f(\mathbf{k}) d^3k, \quad (6)$$

з (3) знаходимо:  $\bar{f} = f_0$ . Середнє за ЗБ від  $g(\mathbf{k})$  в (1) очевидно дорівнює  $f_0$ . Перепишемо (3) для конкретного  $\mathbf{k}_i$  так:

$$f_0 = f(\mathbf{k}_i) - \sum_{m=1}^{\infty} f_m A_m(\mathbf{k}_i). \quad (7)$$

Початкова ідея [8] полягала у виборі одної такої точки  $\mathbf{k}_i$ , щоб максимальне число доданків у сумі з (7) обертались в нуль. Тоді шукане середнє  $f_0 \approx f(\mathbf{k}_i)$ . Однак такої  $\mathbf{k}_i$ , яка б обертала в нуль усі доданки з (7), не існує. Чеді та Коен [1] запропонували покращити результат шляхом переходу до схеми багатьох точок, а саме  $n'_v$  значень  $\mathbf{k}_i^{(v)}$  (на  $v$ -му кроці наближення) таких, що

$$\sum_{i=1}^{n'_v} A_m(\mathbf{k}_i^{(v)}) = 0, \quad m=1,2,\dots,M, \quad (8)$$

де  $(M+1)$  – це найменше значення  $m$ , для якого (8) не виконується. Внаслідок інваріантності функцій  $A_m(\mathbf{k})$  щодо усіх операцій, які переводять дану точку із ЗБ у її незвідну частину, сумування у (8) можна замінити сумуванням лише за  $\mathbf{k}_i^{(v)}$  у незвідній частині ЗБ. Оскільки, однак, більш ніж одна точка у ЗБ може відповідати кожній  $\mathbf{k}_i^{(v)}$ , необхідно ввести такі вагові множники  $\alpha_i^{(v)}$ , сума яких дорівнює одиниці, і при яких рівність (8) набирає вигляду:

$$\sum_{i=1}^{n'_v} \alpha_i^{(v)} A_m(\mathbf{k}_i^{(v)}) = 0, \quad m=1,2,\dots,M. \quad (9)$$

Узагальнимо рівняння (7) для порядку наближення  $v$  наступним чином:

$$f_0^{(v)} = \sum_{i=1}^{n'_v} \alpha_i^{(v)} f(\mathbf{k}_i^{(v)}) - \sum_{i=1}^{n'_v} \alpha_i^{(v)} \sum_{m>M} f_m A_m(\mathbf{k}_i^{(v)}). \quad (10)$$

Нехтуючи доданками при  $m > M$ , отримаємо основне рівняння методу:

$$f_0^{(v)} \equiv \sum_{i=1}^{n'_v} \alpha_i^{(v)} f(\mathbf{k}_i^{(v)}). \quad (11)$$

Задача тепер полягає в отриманні спеціальних точок  $\mathbf{k}_i^{(v)}$  та їхніх вагових множників  $\alpha_i^{(v)}$ . З цією метою Чеді і Коен сформулювали і довели теорему: Якщо



умова  $A_m(\mathbf{k})=0$  виконується для  $\mathbf{k}=\mathbf{k}_1$  при  $m \in \{N_1\}$  і для  $\mathbf{k}=\mathbf{k}_2$  при  $m \in \{N_2\}$ , то множина точок

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_1 + T_i \mathbf{k}_2, \quad i=1, \dots, n_T \quad (12)$$

задовольняє рівність  $\sum_{i=1}^{n_T} A_m(\mathbf{k}_i) = 0$  для

$m \in \{N_1\} \cup \{N_2\}$ . Для порядку  $\nu$  перепишемо (12) у зручнішому вигляді:  
 $\mathbf{k}_{(j)l}^{(\nu)} = \mathbf{k}_j^{(\nu-1)} + T_j \mathbf{k}_{\text{баз}}^{(\nu)}$ . (13)

Хоча  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(\nu)}$  і  $\mathbf{k}_l^{(\nu-1)}$  вибрані у незвідній частині ЗБ,  $\mathbf{k}_{(j)l}^{(\nu)}$  у загальному випадку не належать до точки для порядку  $\nu$ . Вагові множники

$$\alpha_l^{(\nu)} = n_l / \sum_l n_l, \quad (14)$$

де  $n_l$  – число точок у ЗБ, які під дією операцій точкової групи  $T$  переходять у точку  $\mathbf{k}_l^{(\nu)}$ .

#### Схема побудови множин спеціальних точок

Щоб отримати точки  $\mathbf{k}_l^{(\nu)}$  в дусі (13), можна слідувати наступній схемі. Розглядаємо першу симетризовану плоску хвилю  $A_l(\mathbf{k})$  і вибираємо точку  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(1)}$  у незвідній частині ЗБ таку, що  $A_l(\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(1)})=0$ . Точка  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(1)}$  – це єдина спеціальна точка 1-го порядку.

Загальний алгоритм переходу від порядку  $(\nu-1)$  до порядку  $\nu$  такий. Знаходимо першу плоску хвилю  $A_{m_\nu}(\mathbf{k})$ , що не обертається в нуль в усіх точках  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(1)}, \mathbf{k}_{\text{баз}}^{(2)}, \dots, \mathbf{k}_{\text{баз}}^{(\nu-1)}$ . Далі знаходимо у незвідній частині точку  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(\nu)}$  таку, що є нулем  $A_{m_\nu}(\mathbf{k})$ . Тепер комбінуємо  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(\nu)}$ , користуючись (13), з усіма точками  $\mathbf{k}_l^{(\nu-1)}$ , отриманими на  $(\nu-1)$ -му кроці і приводимо знайдені точки, якщо це необхідно, до незвідної частини ЗБ. Отримані точки перепозначаємо як  $\mathbf{k}_l^{(\nu)}$  і отримуємо їхні вагові множники з (14).

Автори [1-3] ставлять вимогу рівності усіх трьох координат точок  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(\nu)}$ . Алгоритм, який пропонується, залишає певну свободу у виборі  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(\nu)}$ , що розв'язує, як це показано на прикладі ромбічних ґраток, проблему різних можливих співвідношень між параметрами ґратки низькосиметричних кристалів. Це дозволяє говорити про можливе застосування методу до плівкових і планарних об'єктів.

#### Оцінка точності методу

Як видно з формул (10) і (11), похибка наближеного обчислення  $f_0$  за методом ЧК становить

$$\varepsilon = \sum_{l=1}^{n_l} \sum_{m>M} \alpha_l^{(\nu)} A_m(\mathbf{k}_l^{(\nu)}) f_m \quad (15)$$

Якщо (9) не виконується, то для спеціальних точок справджується рівність

$$\sum_{l=1}^{n_l} \alpha_l^{(\nu)} A_m(\mathbf{k}_l^{(\nu)}) = S_m N_m, \quad S_m = \pm 1, \quad (16)$$

де  $N_m$  – число векторів ґратки у  $m$ -й оболонці. Тоді

$$\varepsilon = \sum_{m>M} S_m N_m f_m. \quad (17)$$

Ця величина залежить від характеру поведінки функції  $f(\mathbf{k})$ , коефіцієнти розкладу якої

$$f_m = \frac{1}{N_m} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{\text{BZ}} A_m(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) d^3 k. \quad (18)$$

Чеді та Коен показали [1], що у випадку достатньо гладкої  $f(\mathbf{k})$  її ряд Тейлора в околі точки  $\mathbf{k}=0$  збігається достатньо добре і, використавши (18) і (17), для кубічних ґраток можна отримати:

$$\varepsilon = \sum_{m>M} \frac{S_m}{|\mathbf{R}_m|^3} \approx \frac{1}{|\mathbf{R}_M|^3} \quad (19)$$

Проте основний внесок у значення інтегралу за об'ємом ЗБ надходить від  $f(\mathbf{k})$  поблизу границі ЗБ, де розклад у ряд Тейлора незастосовний. Подібність виразу (18) до інтегралів перекриття (overlap integrals) від атомних орбітальних

функцій у наближенні сильної взаємодії дозволяє постулювати [2] збіжність  $f_m$  як  $f_m \propto C_m^p e^{-\alpha C_m}$ ,  $C_m = |\mathbf{R}_m| \rightarrow \infty$  (20)

Звідси висновок про можливість збіжності  $\varepsilon$  швидше ніж за законом  $C_m^{-3}$ . Проте, на нашу думку, це не є так очевидно для малих значень  $C_m$ , що не дозволяє розв'язати проблему у загальному випадку, оскільки показник степеня  $p$  і коефіцієнт  $\alpha$  залежать від вигляду  $f(\mathbf{k})$ . На практиці для заданої функції  $f(\mathbf{k})$  похибку  $\varepsilon$  можна оцінити, узявши множини СТ для порядку точності  $(\nu-1)$  і  $\nu$  та порівнявши значення  $f_0$ , отримувані за формулою (11), у цих двох випадках.

#### Сукупності спеціальних точок для ромбічних ґраток

Нехай  $a, b, c$  – параметри елементарної комірки. Будемо записувати координати векторів  $\mathbf{R}$  в одиницях  $(\frac{a}{2}, \frac{b}{2}, \frac{c}{2})$ , а координати векторів  $\mathbf{k}$  – в одиницях  $(\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{b}, \frac{2\pi}{c})$ . Формула (4) дає наступний вираз для  $m$ -ї симетризованої плоскої хвилі (група  $T \equiv D_{2h}$ ):

$$A_m(\mathbf{k}) = 8 \cos(\pi k_x R_x^{(m)}) \cos(\pi k_y R_y^{(m)}) \cos(\pi k_z R_z^{(m)}) \quad (21)$$

де  $(R_x^{(m)}, R_y^{(m)}, R_z^{(m)}) = \mathbf{R}_m$  – довільний вектор із зірки, за якими відбувається сумування в (4). Точкова група симетрії ромбічних ґраток (група  $D_{2h}$ ) складається з 8 операцій, що дозволяє розглядати вектори  $\mathbf{R}_m$  лише з першого октанту. Незвідна частина складає 1/8 частину всієї ЗБ. Отримувані спеціальні точки є однакові для усіх кристалів даної сингонії, оскільки їх симетрія визначається симетрією голоедричного кристалу, група кристалічного класу якого максимальна в межах сингонії (для ромбічної це група  $D_{2h}$ ).

#### А. Проста ромбічна ґратка.

Вектор  $\mathbf{R}_1$  набуває вигляду  $(2,0,0)$ ,  $(0,2,0)$  або  $(0,0,2)$  в залежності від співвідношення між  $a$ ,  $b$  і  $c$ . Згідно (21),  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(1)} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$  є нулем хвилі  $A_1(\mathbf{k})$  в усіх випадках. Перше  $m$ , для якого не виконується рівність  $A_1(\mathbf{k}) = 0$ , відповідає  $\mathbf{R}_m = (4,0,0)$ ,  $(0,4,0)$  або  $(0,0,4)$ , відповідно. Звідси випливає  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(2)} = (\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8})$ . Комбінуючи  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(1)}$  з  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(2)}$  згідно з (13), отримуємо сукупність з восьми спеціальних точок для  $\nu=2$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1^{(2)} = (\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}), k_2^{(2)} = (\frac{3}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}), \\ k_3^{(2)} = (\frac{1}{8}, \frac{3}{8}, \frac{1}{8}), k_4^{(2)} = (\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{3}{8}), \\ k_5^{(2)} = (\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{5}{8}), k_6^{(2)} = (\frac{1}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}), \\ k_7^{(2)} = (\frac{3}{8}, \frac{1}{8}, \frac{3}{8}), k_8^{(2)} = (\frac{3}{8}, \frac{3}{8}, \frac{1}{8}) \end{array} \right. \quad \alpha_l = 1/8.$$

Умова належності  $\mathbf{k}$  до незвідної частини ЗБ наступна:  $0 \leq k_x, k_y, k_z \leq 1/2$ , а отже усі отримані точки лежать у її межах.

За необхідності можна досягнути й вищої точності, вибравши  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(3)} = (\frac{1}{16}, \frac{1}{16}, \frac{1}{16})$  і використавши (13) при  $\nu=3$ . Всі 64 точки, які при цьому будуть отримані, лежатимуть теж у незвідній частині.

Для заданого  $\nu$  отримуємо сукупність  $\mathbf{k}_l^{(\nu)} = \frac{1}{2^{\nu-1}}(s, p, q)$ , де  $s, p, q$  – непарні числа відрізка  $[1, 2^{\nu-1}]$ . Усі вагові множники однакові:  $\alpha_l^{(\nu)} = \frac{1}{8^{\nu-1}}$ .

Зауважимо, що рівність координат точок  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(\nu)}$  продиктована не лише намаганням позбутися залежності від співвідношення  $a, b$  і  $c$ . Аналіз різних випадків показав, що саме такий вибір задовольняє (9) для максимального  $M$ .

#### Б. Базоцентрована ромбічна ґратка

Зона Брілюєна приймає різний вигляд при  $a < b$  і при  $a > b$ . Достатньо розглянути тільки перший випадок, оскільки другий зводиться до нього звичайним перепозначенням параметрів, тобто  $\mathbf{R}_1 = (2,0,0)$  або  $\mathbf{R}_1 = (0,0,2)$ . Вектор  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(1)} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$ . Аналіз показує, що тоді (9)



виконується для більших  $M$ , ніж при  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(1)} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ . Вибираємо  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(2)} = (\frac{1}{8}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8})$ . Множина точок (13) при  $\nu=2$  у випадку  $b < \sqrt{2}a$  потребує приведення до незвідної частини ЗБ, тому маємо два випадки:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{k}_1^{(2)} = (\frac{1}{8}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}), \mathbf{k}_2^{(2)} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}), \mathbf{k}_3^{(2)} = (\frac{1}{8}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}), \\ \mathbf{k}_4^{(2)} = (\frac{1}{8}, \frac{3}{4}, \frac{1}{8}), \alpha_i^{(2)} = 1/8 \\ \mathbf{k}_5^{(2)} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}), \mathbf{k}_6^{(2)} = (\frac{3}{8}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}), \\ \left[ \begin{array}{l} \mathbf{k}_7^{(2)} = (\frac{3}{8}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}), \mathbf{k}_8^{(2)} = (\frac{3}{8}, \frac{3}{4}, \frac{1}{8}) \text{ при } b > \sqrt{2}a \\ \mathbf{k}_7^{(2)} = (\frac{3}{8}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}), \mathbf{k}_8^{(2)} = (\frac{1}{8}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}) \text{ при } a < b < \sqrt{2}a \end{array} \right. \end{array} \right.$$

Для порядку наближення  $\nu$  базова точка  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(\nu)} = \frac{1}{2^\nu} (1/2, 1, 1/2)$ . Точки, отримувані згідно (13), потребують, загалом, приведення до незвідної частини.

### В. Гранецентрована ромбічна ґратка.

Можливі дві суттєво різні конфігурації зони Бріллюена:

$$\forall(i, j, k): \frac{1}{a_i^2} < \frac{1}{a_j^2} + \frac{1}{a_k^2};$$

$$\exists i: \frac{1}{a_i^2} > \frac{1}{a_j^2} + \frac{1}{a_k^2}; \quad (a_{1,2,3} = a, b, c)$$

Для першого випадку  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(1)} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ;  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(2)} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ . Після застосування (13) і трансформування отриманих точок у незвідну частину ЗБ дістанемо:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{k}_1^{(2)} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}), \mathbf{k}_2^{(2)} = (\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}), \\ \mathbf{k}_3^{(2)} = (\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}), \mathbf{k}_4^{(2)} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}), \alpha_i^{(2)} = 1/4 \end{array} \right.$$

Якщо необхідна вища точність, можна вдатись до наступного кроку наближення. Загалом, на  $\nu$ -му кроці  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(\nu)} = (1, 1, 1)/2^\nu$ .

У другому випадку вибираємо аналогічно:  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(1)} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  та  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(2)} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ . Проте умови належності точки  $\mathbf{k}$  до незвідної частини у цих двох випадках відрізняються, тому отримаємо іншу сукупність:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{k}_1^{(2)} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}), \mathbf{k}_2^{(2)} = (\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}), \\ \mathbf{k}_3^{(2)} = (\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}), \mathbf{k}_4^{(2)} = (\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}); \alpha_i^{(2)} = 1/4 \end{array} \right.$$

### Г. Об'ємоцентрована ромбічна ґратка

Існує три модифікації ЗБ:

$$\begin{array}{l} a > b > c \text{ або } a > c > b; \\ b > a > c \text{ або } b > c > a; \\ c > a > b \text{ або } c > b > a. \end{array}$$

Циклічною перестановкою змінних усі три випадки можна звести до одного. Розглянемо третій з них. Вектор  $\mathbf{R}_1 = (2, 0, 0)$  або  $(0, 2, 0)$ . Продемонструємо два варіанти побудови множин спеціальних точок, які відрізняються вибором базових векторів:

Вектор  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(1)} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ . Перше  $m$ , для якого рівність  $A_m(\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(1)}) = 0$  не справджується, відповідає  $\mathbf{R}_m = (1, 1, 1)$ . Другий крок:  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(2)} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ . Застосовуючи (13), після приведення до незвідної частини отримаємо множину з двох точок:  $\mathbf{k}_1^{(2)} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}), \alpha_1^{(2)} = \frac{1}{2}; \quad \mathbf{k}_2^{(2)} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}), \alpha_2^{(2)} = \frac{1}{2}$

При необхідності вибирають  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(3)} = (\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8})$ . Взагалі,  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(\nu)} = \frac{1}{2^\nu} (1, 1, 1), \nu \geq 3$ .

Вектор  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(1)} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$ . Похибка одноточкового наближення принаймні у  $8/3\sqrt{3}$  разів менша, ніж у першому випадку. Перше  $m$ , для якого рівність  $A_m(\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(1)}) = 0$  не справджується, відповідає  $\mathbf{R}_m = (0, 0, 2)$ . Наступний крок:  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(2)} = (\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{4})$ . У результаті будуть отримані 8 точок (13), що в загальному випадку не лежать у незвідній частині. Аналіз показує, що порівняно з двоточковим набором точність вища принаймні у 8 разів. На  $\nu$ -му кроці  $\mathbf{k}_{\text{баз}}^{(\nu)} = \frac{1}{2^\nu} (1/2, 1/2, 1)$ .

Застосування методу у спектральних розрахунках

Розрахунок спектральних характеристик твердих тіл звичайно вимагає обчислення інтегралів виду  $I(\omega) = \int_{\text{BZ}} d\mathbf{k} F(\mathbf{k}) \delta(\omega - \omega(\mathbf{k}))$ . (22)

У частковому випадку, коли  $F(\mathbf{k}) = 1$ ,  $I(\omega)$  являє собою густину станів.

Якщо розрахунки  $F(\mathbf{k})$  і  $\omega(\mathbf{k})$  нетривіальні, стає корисним обчислити їхні значення спочатку у вузлах  $\{\mathbf{k}_j\}$  грубої сітки, і базуючись на них, якимось чином обчислити значення цих функцій у вузлах  $\{\mathbf{k}_i\}$  дрібно-коміркової сітки. До кожної міні комірки останньої можна тоді застосувати метод лінійної інтерполяції Гілата–Раубенхеймера [9]. Якщо розглядувані функції доволі гладкі, можемо записати їх наступним чином:

$$F(\mathbf{k}_i) = \sum_m F_m A_m(\mathbf{k}_i),$$

$$\omega(\mathbf{k}_i) = \sum_m \omega_m A_m(\mathbf{k}_i), \quad (23)$$

де  $F_m$  і  $\omega_m$  обчислюють згідно з викладеним методом:

$$F_m = \frac{1}{N_m} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{\Omega} A_m^*(\mathbf{k}) F(\mathbf{k}) d^3k \equiv, \quad (24)$$

$$\equiv \frac{1}{N_m} \sum_j \alpha_j F(\mathbf{k}_j) A_m(\mathbf{k}_j)$$

$$\omega_m = \frac{1}{N_m} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{\Omega} A_m^*(\mathbf{k}) \omega(\mathbf{k}) d^3k \equiv \frac{1}{N_m} \sum_j \alpha_j \omega(\mathbf{k}_j) A_m(\mathbf{k}_j) \quad (25)$$

Тут використано те, що симетризовані плоскі хвилі  $A_m(\mathbf{k})$  є дійсними функціями. Число векторів ґратки у  $m$ -й

оболонці дорівнює  $N_m$ . Зрозуміло, що роль вузлів грубої сітки відіграють спеціальні точки обраного порядку наближення  $\nu$ .

1. Chadi D.J., Cohen M.L. // Phys. Rev. B. – 1973. – **8**, N12. – P. 5747 – 5753.
2. Monkhorst H.J., Pack J.D. // Phys. Rev. B. – 1976. – **13**, N12. – P. 5188 – 5192.
3. Evarestov R.A., Smirnov V.P. // Phys. status solidi B. – 1980. – **99**, N7. – P. 463 – 505.
4. Moreno J, Soler J.M. // Phys. Rev. B. – 1992. – **45**, N24. – P. 13891 – 13898.
5. Macot L., Frank B. // Phys. Rev. B. – 1990. – **41**, N7. – P. 4469 – 4474.
6. Kolinko M.I. // J. Phys.: Condens. Matter. – 1994. – **6**, N1. – P. 183 – 202.
7. Kolinko M.I. // Phys. Rev. B. – 1997. – **55**, N7. – P. 4007 – 4010.
8. Baldareschi A. // Phys. Rev. B. – 1973. – **7**, N12. – P. 5212 – 5215.
9. Gilat G., Raubenheimer L.J. // Phys. Rev. – 1966. – **144**, N2. – P. 390 – 412.

## THE CHADI-COHEN PROCESS FOR LOW SYMMETRY SYSTEMS

**M.I. Kolinko, A.Hr. Nevidomskyy**

The Ivan Franko National University of Lviv

290005 Lviv, 8a Kyryla and Mephodiya str.

The generalized method for generating special points which are used in the evaluation of the integral of periodic functions over the Brillouin zone is suggested for low-symmetry systems. The accuracy of this approximation is discussed. The sets of points together with corresponding weighting factors had been obtained for all orthorhombic lattices. The application of the method to spectral calculations is shown.