

Электронные состояния в $P_4 - Se_3$ и их локальная плотность

Л.К. Ермаков

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: ermakov-lk@mail.ru

Соединение $P_4 - Se_3$ может использоваться в различных оптических волоконных системах. Ввиду этого необходимо изучение плотности его электронных состояний. Схема молекулы проста [1]: средний слой – 3 атома селена, соединенные с атомом фосфора на вершине. В нижнем слое 3 атома фосфора в виде правильного треугольника, соединенные как между собой, так и с атомами селена. Симметрия молекулы – точечная группа C_{3v} . Молекула замкнута, вследствие чего в конденсированном состоянии молекулы держатся связями типа Ван-дер-Ваальса. Стандартный способ получения плотности электронных состояний заключается в том, что сперва производится построение зоны Бриллюэна, а затем из неё получают плотность электронных состояний, согласно общеизвестным выражениям [2]. Другой способ – разложение функции Грина в непрерывную дробь (НД) [4], его называют методом НД. Если гамильтониан построен в базисе атомных орбиталей (АО), то получается локальная плотность состояний, более информативная при изучении активных точечных центров. Достаточно простой вариант для этих целей – АО Слейтеровского типа. Здесь использовались их параметры по материалам работы [3]. Матрица симметризованного гамильтониана для изучаемой структуры распадается на 3 независимых блока, в соответствии с неприводимым представлением (НП) точечной группы C_{3v} : (a_1) – матрица 8×8 , (a_2) – матрица 2×2 и (e) – матрица 9×9 в базисе (s) и (p) АО. Метод НД позволяет получать ЛПС, минуя вычисление собственных значений гамильтониана и коэффициентов волновых функций. В ходе цифровых расчетов мы имеем ЛПС по суммам АО (s) и (p) типа отдельно внутри симметризованной орбитали (СО); отдельно по разным НП, а также общую сумму ЛПС по всем НП и СО. Наблюдается удовлетворительное согласие рассчитанных ЛПС с экспериментальными спектрами фото-ионизации [1]. Анализ показывает, что максимумы спектра фотоионизации при 8.92, 10.36 и 12.62 эВ [1] соответствуют полученным пикам ЛПС для НП (e) типа группы C_{3v} . Наибольший вклад дают АО (p)-типа селена « π »-ориентации, то есть поперек связей (P – Se).

1. Cannington P.H., Whitfield H.J. // J. of Electron Spectroscopy. 1977. V. 10, P. 35–44.
2. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1974. 472 с.
3. Clementi E., Raimondi D.L. // J. Chem. Phys., 1963. V. 38, P. 2686–2689.
4. Solid State Physics. N. Y.: Acad. Press, 1980. V. 35, 403 p.