

Министерство образования и науки РФ

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего профессионального образования
«Казанский (Приволжский) Федеральный Университет»**

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ

КАФЕДРА РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ

Специальность: 010801.65 РАДИОФИЗИКА И ЭЛЕКТРОНИКА.

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА
(Дипломная работа)

**Вклад кристаллической решетки в амплитуду
перехода электронов в La_2CuO_4**

Работа завершена:

“ ___ ” _____ 2015 г.

Ганеев Р.Э.

Работа допущена к защите:

Научный руководитель:

доцент к.ф.-м.н.

“ ___ ” _____ 2015г.

Аникеев О. А

Заведующий кафедрой:

д.ф.м.н., профессор

“ ___ ” _____ 2015 г.

Овчинников М. Н.

Казань - 2015

Содержание

Введение.....	2-7стр
Методы расчета	8стр
Теория.....	9-12стр
Структура кристалла La_2CuO_4	13-14стр
Вычисления.....	15-24стр
Заключение	26стр
Список Литературы	27стр

Введение

Сообщение К.А.Мюллера и Й.Г.Беднорца о переходе в сверхпроводящее состояние системы La-Sr-Cu-O при температуре $T \sim 40\text{K}$ явилось мощным стимулом для дальнейшего развития фундаментального научного направления – физики сверхпроводимости, и послужило основой для создания принципиально иного по сравнению с известными ранее типа материалов, обладающих высокотемпературной сверхпроводимостью (ВТСП), – купратов. До настоящего времени было накоплено большое количество экспериментальных данных и создано более 10 теоретических моделей высокотемпературной сверхпроводимости. Однако законченной теории нет до сих пор, поскольку остаются неясными некоторые важные детали возникновения данного явления. Одними из необходимых параметров, которые нужно оценить для выяснения механизма высокотемпературной сверхпроводимости, является амплитуда перехода электронов между ионами. Например в работе [1] оцениваются амплитуды перехода La_2CuO_4 , однако в этой работе и в аналогичных, все вычисления проводятся на функциях Ванье т.е. достаточно локализовано. В нашей работе мы хотим учесть вклад дальнедействующего кулоновского взаимодействия в амплитуды перехода электрона между ионами кислорода.

Исследование высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) — одна из актуальных проблем современной фундаментальной физики и конкретно физики твердого тела. Эта типичная теоретическая проблема, как и многие другие, тесно связана с так называемой прикладной физикой. Интерес к вопросу практического использования сверхпроводников появился в 50-х гг., когда были открыты сверхпроводники второго рода с высокими критическими параметрами как по значению плотности тока, так и по

величине магнитной индукции. В настоящее время использование явления сверхпроводимости приобретает все большее практическое значение.

Согласно закону электромагнитной индукции, любой электрический ток возбуждает вокруг себя магнитное поле. Сверхпроводники проводят ток практически без потерь, если поддерживать их при сверхнизких температурах (низкотемпературная сверхпроводимость – НТСП), поэтому они представляют собой идеальный материал для изготовления электромагнитов. В медицине широко используется такая медико-диагностическая процедура как электронная томография. Она проводится на сканере, использующем принцип ядерно-магнитного резонанса (ЯМР), и пациент, сам того не подозревая, находится в считанных сантиметрах от сверхпроводящих электромагнитов. Именно они создают поле, позволяющее врачам получать высокоточные образы тканей человеческого тела в разрезе без необходимости прибегать к скальпелю.

Эволюция температуры сверхпроводящего перехода привела к возможности использования хладагентов с все более высокой температурой кипения (жидкий гелий, водород, неон, азот).

Наиболее широкое реальное применение сверхпроводимость находит при создании крупных электромагнитных систем. Уже в 80-х гг. прошлого века в СССР был осуществлен запуск первой в мире установки термоядерного синтеза Т-7 со сверхпроводящими катушками тороидального магнитного поля.

Сверхпроводящие катушки используются также для пузырьковых водородных камер, для крупных ускорителей элементарных частиц. Изготовление таких катушек для ускорителей довольно сложно, так как требование исключительно высокой однородности магнитного поля вызывает необходимость точного соблюдения заданных размеров.

В последние годы явление сверхпроводимости все более широко используется при разработке турбогенераторов, электродвигателей, униполярных машин, топологических генераторов, жестких и гибких кабелей, коммутационных и токоограничивающих устройств, магнитных сепараторов, транспортных систем и др. Следует также отметить такое направление в работах по сверхпроводимости как создание устройств для измерения температур, расходов, уровней, давлений и т.д.

В настоящий момент имеются два главных направления в области применения сверхпроводимости: прежде всего – в магнитных системах различного назначения и затем – в электрических машинах (в первую очередь, в турбогенераторах).

В представленной ниже таблице перечислены основные области применения явления сверхпроводимости.

Применение	Примечания
Экранирование	Сверхпроводник не пропускает магнитный поток, следовательно, он экранирует электромагнитное излучение. Используется в микроволновых устройствах, а также при создании установок для защиты от излучения при ядерном взрыве
Магниты - научно-исследовательское оборудование - магнитная левитация	ВТСП магниты используются в ускорителях частиц и установках термоядерного синтеза Поезда на магнитной подушке — наиболее перспективное применение сверхпроводников для скоростных поездов
Передача энергии	Прототипные линии ВТСП уже продемонстрировали свою перспективность
Аккумуляирование	Возможность аккумуляировать электроэнергию в виде циркулирующего тока

Вычислительные устройства	Комбинация полупроводниковых и сверхпроводящих приборов открывает новые возможности в конструировании аппаратуры
----------------------------------	--

Сверхпроводящие магниты. С помощью обычного электромагнита, представляющего собой катушку из медного провода, размещенной на железном сердечнике, можно создавать поля до 2 Тл, причем медные провода выдерживают плотность тока до 400 А/см^2 .

Сверхпроводники позволяют отказаться от железного сердечника за счет увеличения плотности тока до 100000 А/см^2 . Такие плотности тока позволяют получать сплавы из ниобия-3 и олова и ниобия с титаном при температуре жидкого гелия (4 К).

Объемные образцы иттрий - барий - оксид меди выдерживают плотность тока до 4000 А/см^2 при температуре жидкого азота (77 К) в поле 1 Тл. В отсутствие магнитного поля плотность тока может достигать 17000 А/см^2 .

Генераторы и линии электропередач. Сверхпроводящие магниты могут повысить КПД генераторов большой мощности до 99.5%, хотя у обычных генераторов он уже достигает 98.6%. Ежегодная экономия топлива составит 1%. Экономически рентабельными сверхпроводниковые линии электропередач могут стать только при передаче по ним большого количества энергии.

Аккумуляирование электроэнергии. Сверхпроводящие накопители энергии с охлаждением жидким азотом обошлись бы на 3% дешевле, чем обычные, а общие капитальные затраты уменьшаются еще на 5%.

Поезда на магнитной подушке — наиболее перспективное применение сверхпроводников для скоростных поездов. Стоимость сооружения пути длиной 500км обойдется в 1.5 – 4.5 млрд долл. Стоимость самих поездов составит не более 10% от общей суммы затрат, а система охлаждения всего 1%.

Сверхнизкие температуры до 10^{-6}К достигнуты в магнитных холодильниках при использовании магнитоэлектрического эффекта. Такие системы важны для космических и оборонных программ.

С помощью СКВИДа (сверхпроводящий квантовый интерференционный детектор) можно измерять падение напряжения до 10^{-18}В , токи 10^{-18}А (несколько электронов в секунду) и магнитные поля меньшие 10^{-14}Тл . Аналогов подобной чувствительности нет. Новые сверхпроводники позволяют регулировать частоты до 10^{12}Гц (близко к квантовому пределу). Чувствительность обычных приборов не превышает 10^{10}Гц . Применение СКВИДов - магнитоэнцефалография, элементы памяти. СКВИДы используются физиками для исследования кварков, магнитных монополей, гравитонов, геологами для поисков нефти, воды, минералов, разрабатываются детекторы для обнаружения подводных лодок.

Таким образом, спустя почти сто лет со времени открытия сверхпроводимости она из разряда явлений уникальных и лабораторно-курьезных превратилась в общепризнанный факт и источник многомиллиардных доходов предприятий электронной индустрии.

Методы расчета

В работах [2-6] развивается метод вторичного квантования с частично не ортогональным одночастичным базисом. Приложение его к ионным кристаллам, когда интегралы перекрывания хартри-фоковских орбиталей, принадлежащие разным ионам, достаточно малы, позволяет строить математически корректные выражения для рядов теории возмущений в рамках виртуальных и реальных процессов переноса заряда. Для вычислений амплитуд перехода из первых принципов, например в работе [1] выделяют некоторую U -область, достаточно локализованную, определяемую функциями Ванье. Удобно представить заряд ядер Z ионов, как $Z = q + n$, где q — заряд иона в регулярном кристалле, n — число электронов на ионах в рассматриваемой конфигурации. Такое разбиение позволяет оценить вклад дальнегодействующего кулоновского взаимодействия.

Таким образом, возникает необходимость в вычислении двухцентровых матричных элементов кулоновского взаимодействия электронов с бесконечной кристаллической решеткой (БКР). До настоящего времени оценивались только одноцентрированные матричные элементы этого взаимодействия методом Эвальда или прямыми методами, т.е. вычислением потенциала в узле решетки (в точке). В настоящей работе в отличие от вышеупомянутых методов вычисляются двухцентровые матричные элементы, причем в отличие от имеющихся в литературе они определены на электронных орбиталях в виде точных аналитических выражений.

2. Теория

Для описания свойств купратов используется так называемый расширенный гамильтониан-Хаббарда, который имеет следующий вид:

$$H = \sum_i \varepsilon_i c_i^+ c_i + \sum_{i,j} t_{ij} c_i^+ c_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j} U_{ij} c_i^+ c_j^+ c_j c_i \quad (1)$$

где ε_i - это энергия орбиталей, t_{ij} - амплитда перехода электрона между ионами, U_{ij} - кулоновское взаимодействие электронов.

В нашей работе мы хотим вычислить вклад дальнедействующего кулоновского взаимодействия в параметры t_{ij} .

Пусть радиальная часть R_{nl} хартри-фоковской орбитали иона имеет вид разложения по Гауссову базису.

$$R_{nl} = \sum a_i r^l \exp(-\alpha_i r^2) \quad (2)$$

Пусть первый ион локализован в узле с радиус вектором $\mathbf{R}_0 + \mathbf{r}_j$, $\mathbf{R}_0 = 0$. Второй ион с радиус вектором \mathbf{r}_b . Заряд q_p - заря иона находящегося в узле $\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_p$. Матричный элемент кулоновского взаимодействия между электроном и зарядом вычисленных на волновых функциях первого и второго рода имеет вид:

$$\begin{aligned}
& \left\langle \psi_{\xi}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \right| H_{LR} \left| \psi_{\xi'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b) \right\rangle = \\
& = \left\langle \psi_{\xi}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \right| - \sum'_{n,p} \frac{q_p}{|\mathbf{r} - (\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_p)|} \left| \psi_{\xi'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b) \right\rangle = \quad (3) \\
& = \left\langle \psi_{\xi}(\mathbf{r}) \right| - \sum'_{n,p} \frac{q_p}{|\mathbf{r} - (\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_p - \mathbf{r}_j)|} \left| \psi_{\xi'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b + \mathbf{r}_j) \right\rangle
\end{aligned}$$

Определим $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}_b - \mathbf{r}_j$.

Матричные элементы (1) могут быть выражены через функции [7]:

$$F_{jb}(n_1 n_2 n_3) = -\frac{2\pi^{3/2}}{v_c} n_1! n_2! n_3! \sum_{i,k} a_i b_k \left(\frac{1}{\alpha_{ik}} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\alpha_i b_k}{\alpha_{ik}} r_o^2 \right) \times$$

$$\sum_g f_{jb}(n_1, g_x) f_{jb}(n_2, g_y) f_{jb}(n_3, g_z) \times \quad (4)$$

$$\exp\left(-\frac{g^2}{4\alpha_{ik}} \right) \frac{G_j(g)}{g^2} \exp[-i(gc)].$$

где $\alpha_{ik} = \alpha_i + \alpha_k$, $\mathbf{g} = (2\pi n_x / a, 2\pi n_y / b, 2\pi n_z / c)$ - вектор обратной

решетки, a, b, c - постоянные решетки, v_c - объем элементарной ячейки.

$$\begin{aligned}
Z_s &= \frac{B_k x_{0s}}{\alpha_{ik}} - i \frac{g_s}{2\alpha_{ik}}, f_{jb}(0, g_s) = 1 \\
f_{jb}(1, g_s) &= Z_s, f_{jb}(2, g_s) = \frac{1}{2!} Z_s^2 + \frac{1}{4\alpha_{ik}} \\
f_{jb}(3, g_s) &= \frac{1}{3!} Z_s^3 + \frac{1}{4\alpha_{ik}} Z_s, \\
f_{jb}(4, g_s) &= \frac{1}{4!} Z_s^4 + \frac{1}{8\alpha_{ik}} Z_s^2 + \frac{1}{32\alpha_{ik}^2}
\end{aligned} \tag{5}$$

X_{os} –разность координат $\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_i$

Согласно [7] величина $G_j(\mathbf{g})$ - определяется как структурный фактор и имеет следующий вид.

$$G_j(\mathbf{g}) = G_j^{(1)}(\mathbf{g}) + iG_j^{(2)}(\mathbf{g}),$$

$$G_j^{(1)}(\mathbf{g}) = \cos(\mathbf{g}\mathbf{r}_j) F_1(\mathbf{g}) + \sin(\mathbf{g}\mathbf{r}_j) F_2(\mathbf{g})$$

$$G_j^{(2)}(\mathbf{g}) = \sin(\mathbf{g}\mathbf{r}_j) F_1(\mathbf{g}) - \cos(\mathbf{g}\mathbf{r}_j) F_2(\mathbf{g})$$

$$F_1(\mathbf{g}) = \sum_p q_p \cos(\mathbf{g}\mathbf{r}_p), F_2(\mathbf{g}) = \sum_p q_p \sin(\mathbf{g}\mathbf{r}_p).$$

Волновые функции р-орбиталей согласно (1) в декартовой системе координат могут быть записаны следующим образом.

$$|x\rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sum a_i x \exp(-\alpha_i r^2), \quad (7)$$

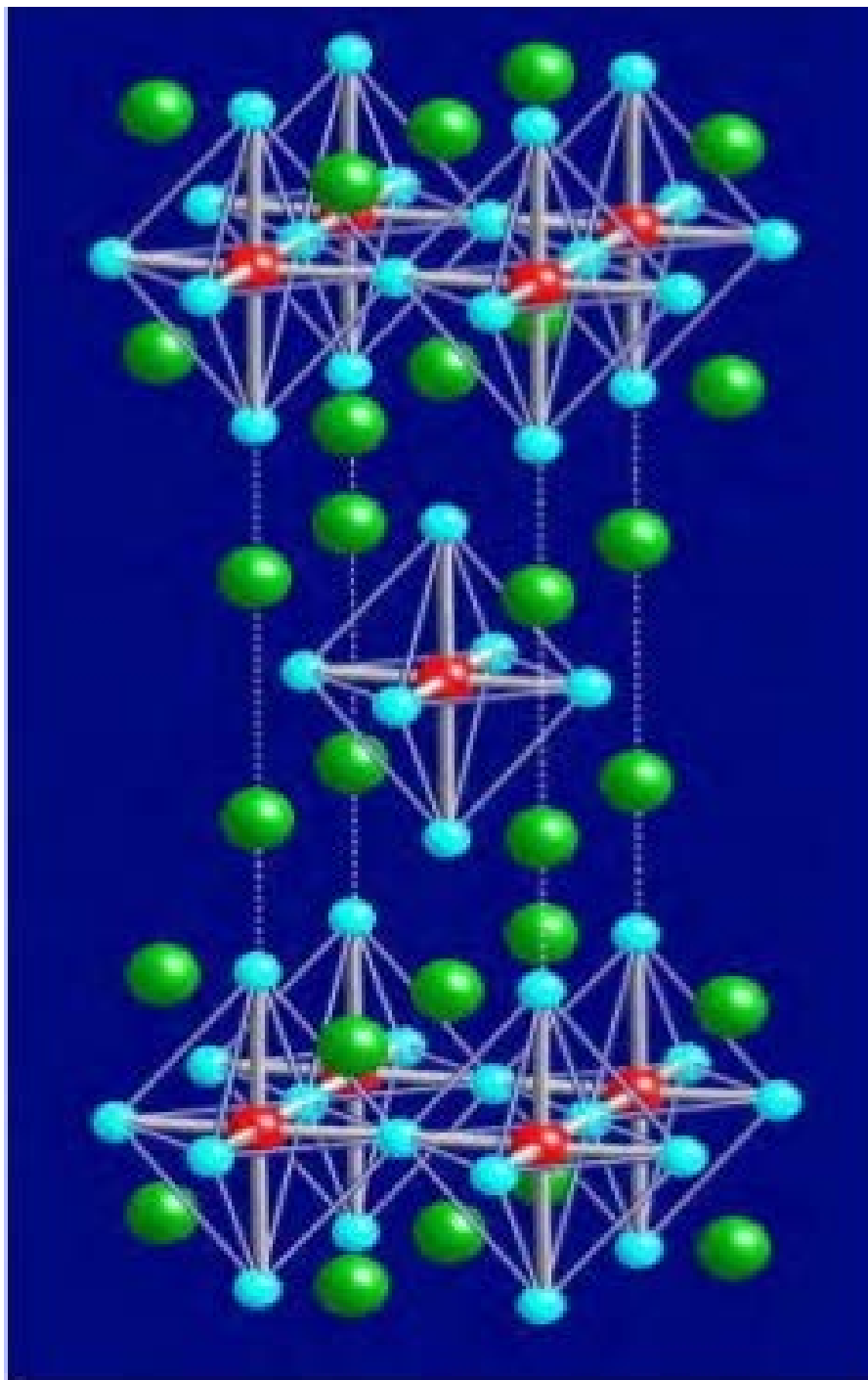
$$|z\rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sum a_i z \exp(-\alpha_i r^2).$$

Матричные элементы оператора H_{LR} на волновых функциях (7) принадлежащих разным ионам можно получить, используя результаты работы [7]. Приведем общий вид

$$\langle p_x(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) | H_{LR} | p_x(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b) \rangle = \frac{3}{2} [F_{jb}(200) - x_0 F_{jb}(100)] \quad (8)$$

$$\langle p_z(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) | H_{LR} | p_z(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b) \rangle = \frac{3}{2} F_{jb}(002)$$

Структура кристалла La_2CuO_4



На этом рисунке изображен фрагмент кристалла характеризующую
общую структуру

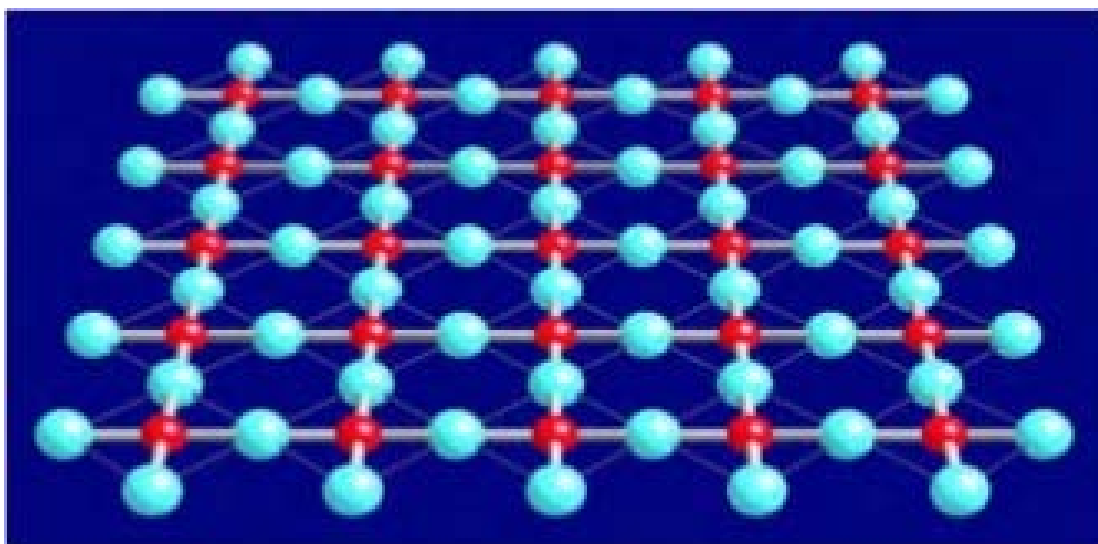
Где ионы красного цвета – Cu,

голубого – O,

зеленого – La.

Имеющихся сведений о строении и составе ВТСП позволил сделать ряд обобщений. Во-первых, практически все они являются сложными слоистыми медьсодержащими оксидами, структура которых включает кислород-дефицитные перовскитные блоки. В настоящее время ответственным за сверхпроводимость в купратах считают именно медь-кислородный слой CuO_2 , в котором атомы меди образуют квадратную сетку и располагаются в ее узлах, в то время как атомы кислорода находятся на линиях, соединяющих эти узлы.

Приведём далее элементарную ячейку. Будем рассматривать переход электрона по кислородной подрешётке.



Основным структурным элементом купратных ВТСП является CuO_2 - плоскость.

4.Вычисления

Вычисления проводились с параметрами решетки, соответствующими комнатной температуре, для однородного упорядочения.

Постоянные решетки при комнатной температуре согласно [10] равны :

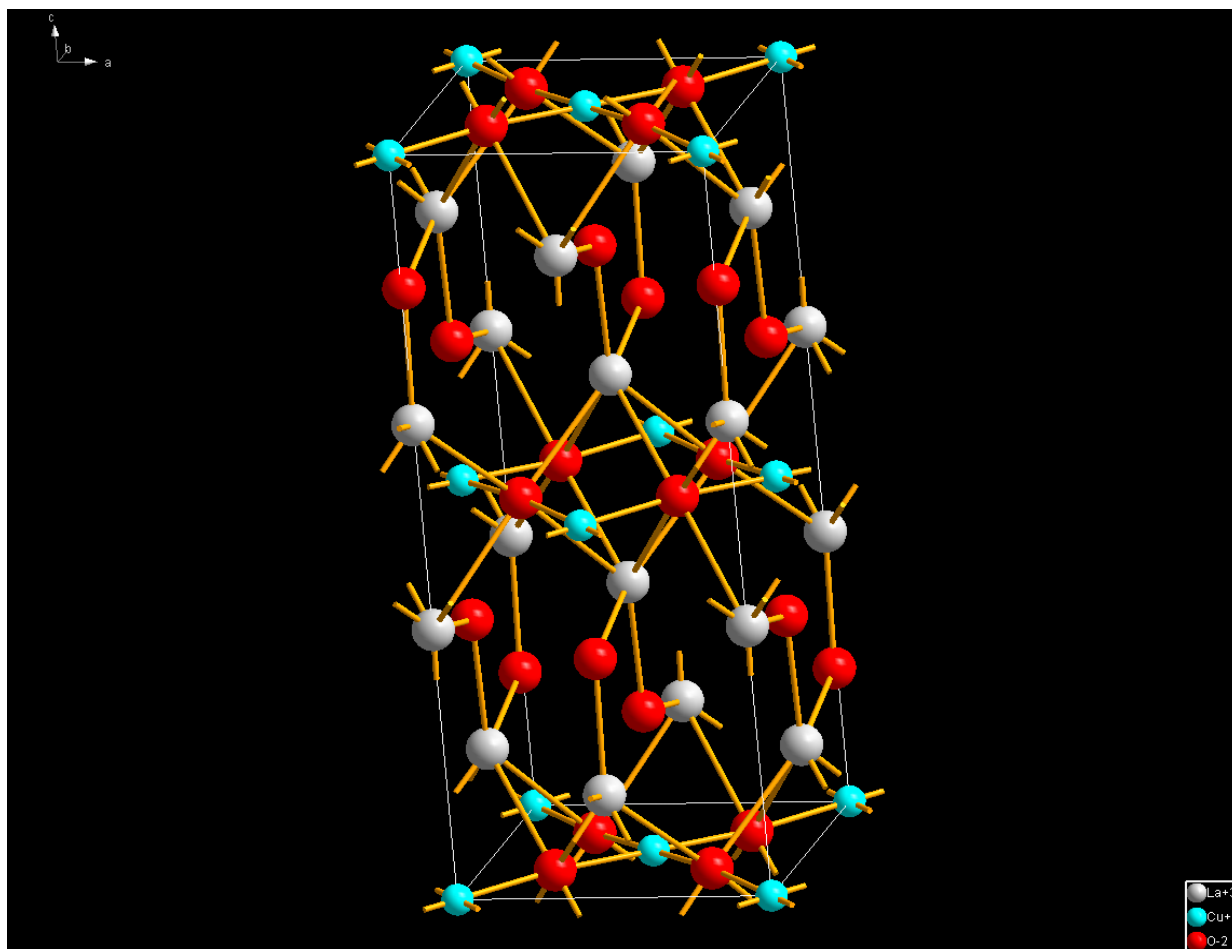
$a = 5.352 \text{ \AA}$, $b = 5.40 \text{ \AA}$, $c = 13.157 \text{ \AA}$ или в атомных единицах :

$a = 10.11381824984835 \text{ a.u.}$,

$b = 10.204525139981518 \text{ a.u.}$,

$c = 24.863136530877192 \text{ a.u.}$

Координаты 28 ионов элементарной ячейки этого кристалла в относительных единицах при комнатной температуре даны в работе [10]:



$$\begin{array}{ll}
Cu_1(0,0,0); Cu_2(0.5,0.5,0); & Cu_3(0.5,0,0.5); Cu_4(0,0.5,0.5) \\
La_1(0.5,-0.00677,0.1385); & La_2(0,0.50677,0.1385); \\
La_3(0,0.0677,0.3615); & La_4(0.5, 0.49323, 0.3615); \\
La_5(0, -0.00677, 0.3615); & La_6(0.5, 0.50677, 0.6315); \\
La_7(0.5, 0.0677, 0.8615); & La_8(0, 0.49323, 0.8615). \\
O_{21}(0.25, 0.25, 0.0066); & O_{22}(0.75, 0.25, 0.0066); \\
O_{23}(0.25, 0.75, -0.0066); & O_{24}(0.75, 0.75, -0.0066); \\
O_{11}(0, 0.96729, 0.1831); & O_{12}(0.5, 0.53271, 0.1831); \\
O_{13}(0, 0.46729, 0.3169); & O_{14}(0.5, 0.03271, 0.3169); \\
O_{25}(0.25, 0.25, 0.5066); & O_{26}(0.75, 0.25, 0.5066); \\
O_{27}(0.25, 0.75, 0.4934); & O_{28}(0.75, 0.75, 0.4934); \\
O_{15}(0, 0.5327, 0.6831); & O_{16}(0.5, 0.46729, 0.6831); \\
O_{17}(0, 0.3271, 0.8169); & O_{18}(0.5, 0.46729, 0.8169).
\end{array}$$

Запишем базисные вектора ионов в элементарной ячейке:

Cu^{2+} :

$$r_1=0, r_2=0.5\mathbf{i}+0.5\mathbf{j},$$

$$r_3=0.5\mathbf{i}+0.5\mathbf{k}; r_4=0.5\mathbf{j}+0.5\mathbf{k}.$$

La^{3+} :

$$r_1=0.5\mathbf{i}-0.00677\mathbf{j}+0.1385\mathbf{k}; r_2=0.50677\mathbf{j}+0.1385\mathbf{k};$$

$$r_3=0.00677\mathbf{j}+0.3615\mathbf{k}; r_4=0.5\mathbf{i}+0.49323\mathbf{j}+0.3615\mathbf{k};$$

$$r_5=-0.00677\mathbf{j}+0.6385\mathbf{k}; r_6=0.5\mathbf{i}+0.50677\mathbf{j}+0.6385\mathbf{k};$$

$$r_7=0.5\mathbf{i}+0.0677\mathbf{j}+0.8615\mathbf{k}; r_8=0.49323\mathbf{j}+0.8615\mathbf{k}.$$

O²⁻:

$$\mathbf{r}_{11}=0.96729\mathbf{j}+0.1831\mathbf{k}; \mathbf{r}_{12}=0.5\mathbf{i}+0.5321\mathbf{j}+0.1831\mathbf{k};$$

$$\mathbf{r}_{13}=0.46729\mathbf{j}+0.3169\mathbf{k}; \mathbf{r}_{14}=0.5\mathbf{i}+0.03271\mathbf{j}+0.3169\mathbf{k};$$

$$\mathbf{r}_{15}=0.53271\mathbf{i}+0.6831\mathbf{k}; \mathbf{r}_{16}=0.5\mathbf{i}+0.96729\mathbf{j}+0.6831\mathbf{k};$$

$$\mathbf{r}_{17}=0.03271\mathbf{i}+0.8169\mathbf{k}; \mathbf{r}_{18}=0.5\mathbf{i}+0.46729\mathbf{j}+0.8169\mathbf{k}.$$

$$\mathbf{r}_{21}=0.25\mathbf{i}+0.25\mathbf{j}+0.0066\mathbf{k}, \mathbf{r}_{22}=0.75\mathbf{i}+0.25\mathbf{j}+0.0066\mathbf{k};$$

$$\mathbf{r}_{23}=0.25\mathbf{i}+0.75\mathbf{j}-0.0066\mathbf{k}; \mathbf{r}_{24}=0.75\mathbf{i}+0.75\mathbf{j}-0.0066\mathbf{k};$$

$$\mathbf{r}_{25}=0.25\mathbf{i}+0.25\mathbf{j}+0.5066\mathbf{k}; \mathbf{r}_{26}=0.75\mathbf{i}+0.25\mathbf{j}+0.5066\mathbf{k};$$

$$\mathbf{r}_{27}=0.25\mathbf{i}+0.75\mathbf{j}+0.4934\mathbf{k}; \mathbf{r}_{28}=0.75\mathbf{i}+0.75\mathbf{j}+0.4934\mathbf{k};$$

Для вычисления функции F1 и F2 входящих в структурный фактор мы приведем численные значения входящих в них cos и sin.

Cu²⁺:

$$Cu_1: \cos(\mathbf{gr}_1)=1$$

$$Cu_2: \cos(\mathbf{gr}_2)=\cos[\pi(nx+ny)]=(-1)^{nx+ny}$$

$$Cu_3: \cos(\mathbf{gr}_3)=(-1)^{nx+nz};$$

$$Cu_4: \cos(\mathbf{gr}_4)=(-1)^{ny+nz}.$$

La³⁺:

$$\cos(\mathbf{gr}_1)=(-1)^{nx} \cos[\pi(0,0135ny-0.277nz)];$$

$$La_1: \sin(\mathbf{gr}_1)=-(-1)^{nx+1} \cos[\pi(0,0135ny-0.277nz)];$$

$$\cos(\mathbf{gr}_7)=(-1)^{nx} \cos[\pi(0,01354ny-0.277nz)];$$

$$La_7: \sin(\mathbf{gr}_7)=(-1)^{nx+1} \cos[\pi(0,01354ny-0.277nz)];$$

$$\begin{aligned}
& \cos(\mathbf{gr}_2) = (-1)^{ny} \cos[\pi(0, 01354ny + 0.277nz)]; \\
\text{La}_2: & \sin(\mathbf{gr}_2) = (-1)^{ny} \cos[\pi(0, 01354ny + 0.277nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_8) = (-1)^{ny} \cos[\pi(0, 01354ny + 0.277nz)]; \\
\text{La}_8: & \sin(\mathbf{gr}_8) = -(-1)^{ny} \cos[\pi(0, 01354ny + 0.277nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_3) = (-1)^{nz} \cos[\pi(0, 0135ny - 0.277nz)]; \\
\text{La}_3: & \sin(\mathbf{gr}_3) = (-1)^{nz} \cos[\pi(0, 0135ny - 0.277nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_5) = (-1)^{nz} \cos[\pi(0, 0135ny - 0.277nz)]; \\
\text{La}_5: & \sin(\mathbf{gr}_5) = -(-1)^{nz} \cos[\pi(0, 0135ny - 0.277nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_4) = (-1)^{nx+ny+nz} \cos[\pi(0, 0135ny + 0.277nz)]; \\
\text{La}_4: & \sin(\mathbf{gr}_4) = -(-1)^{nx+ny+nz} \cos[\pi(0, 0135ny + 0.277nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_6) = (-1)^{nx+ny+nz} \cos[\pi(0, 0135ny + 0.277nz)]; \\
\text{La}_6: & \sin(\mathbf{gr}_6) = (-1)^{nx+1} \sin[\pi(0, 0135ny + 0.277nz)]; \\
\mathbf{O}^{2-}: &
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cos(\mathbf{gr}_{11}) = \cos[\pi(0, 06542 - 0, 3662nz)]; \\
\text{O}_{11}: & \sin(\mathbf{gr}_{11}) = -\sin[\pi(0, 06542 - 0, 3662nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_{17}) = \cos[\pi(0, 06542 - 0, 3662nz)]; \\
\text{O}_{17}: & \sin(\mathbf{gr}_{17}) = \sin[\pi(0, 06542 - 0, 3662nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_{12}) = (-1)^{nx+ny} \cos[\pi(0, 06542 + 0, 3662nz)]; \\
\text{O}_{12}: & \sin(\mathbf{gr}_{12}) = (-1)^{nx+ny} \sin[\pi(0, 06542 + 0, 3662nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_{18}) = (-1)^{nx+ny} \cos[\pi(0, 06542 + 0, 3662nz)]; \\
\text{O}_{18}: & \sin(\mathbf{gr}_{18}) = -(-1)^{nx+ny} \sin[\pi(0, 06542 + 0, 3662nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_{13}) = (-1)^{ny+nz} \cos[\pi(0, 06542 + 0, 3662nz)]; \\
\text{O}_{13}: & \sin(\mathbf{gr}_{13}) = -(-1)^{ny+nz} \sin[\pi(0, 06542 + 0, 3662nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_{15}) = (-1)^{ny+nz} \cos[\pi(0, 06542 + 0, 3662nz)]; \\
\text{O}_{15}: & \sin(\mathbf{gr}_{15}) = (-1)^{ny+nz} \sin[\pi(0, 06542 + 0, 3662nz)];
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cos(\mathbf{gr}_{14}) = (-1)^{nx+nz} \cos[\pi(0,06542 - 0,3662nz)]; \\
O_{14}: & \sin(\mathbf{gr}_{14}) = (-1)^{nx+nz} \sin[\pi(0,06542 - 0,3662nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_{16}) = (-1)^{nx+nz} \cos[\pi(0,06542 - 0,3662nz)]; \\
O_{16}: & \sin(\mathbf{gr}_{16}) = -(-1)^{nx+nz} \sin[\pi(0,06542 - 0,3662nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_{21}) = \cos[\pi(0,5nx + 0,5ny + 0,132nz)]; \\
O_{21}: & \sin(\mathbf{gr}_{21}) = \sin[\pi(0,5nx + 0,5ny + 0,132nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_{24}) = \cos[\pi(0,5nx + 0,5ny + 0,132nz)]; \\
O_{24}: & \sin(\mathbf{gr}_{24}) = -\sin[\pi(0,5nx + 0,5ny + 0,132nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_{22}) = \cos[\pi(0,5nx - 0,5ny - 0,132nz)]; \\
O_{22}: & \sin(\mathbf{gr}_{22}) = -\sin[\pi(0,5nx - 0,5ny - 0,132nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_{23}) = \cos[\pi(0,5nx - 0,5ny - 0,132nz)]; \\
O_{23}: & \sin(\mathbf{gr}_{23}) = \sin[\pi(0,5nx - 0,5ny - 0,132nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_{25}) = (-1)^{nz} \cos[\pi(0,5nx + 0,5ny + 0,132nz)]; \\
O_{25}: & \sin(\mathbf{gr}_{25}) = (-1)^{nz} \sin[\pi(0,5nx + 0,5ny + 0,132nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_{28}) = (-1)^{nz} \cos[\pi(0,5nx + 0,5ny + 0,132nz)]; \\
O_{28}: & \sin(\mathbf{gr}_{28}) = -(-1)^{nz} \sin[\pi(0,5nx + 0,5ny + 0,132nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_{27}) = (-1)^{nz} \cos[\pi(0,5nx - 0,5ny - 0,132nz)]; \\
O_{27}: & \sin(\mathbf{gr}_{27}) = (-1)^{nz} \sin[\pi(0,5nx - 0,5ny - 0,132nz)]; \\
& \cos(\mathbf{gr}_{26}) = (-1)^{nz} \cos[\pi(0,5nx - 0,5ny - 0,132nz)]; \\
O_{26}: & \sin(\mathbf{gr}_{26}) = -(-1)^{nz} \sin[\pi(0,5nx - 0,5ny - 0,132nz)];
\end{aligned}$$

В настоящей работе рассматривается однородное упорядочение (UCO).
В случае UCO $F_2(\mathbf{g})=0$, а функция $F_1(\mathbf{g})$ равна

$$\begin{aligned}
F_1(\mathbf{g}) = & 2[1 + (-1)^{nx+ny} + (-1)^{ny+nz}] + 6\{[(-1)^{nx} + \\
& (-1)^{nz}] \cos[\pi(0.01354ny - 0.277nz)] + \\
& [(-1)^{ny} + (-1)^{nx+ny+nz}] \cos[\pi(0.01354ny + 0.277nz)]\} + \\
& (-4)[1 + (-1)^{nx+nz}] \cos[\pi(0.06542ny - 0.3662nz)] + \\
& (-4)[(-1)^{nx+ny} + (-1)^{ny+nz}] \cos[\pi(0.06542ny + 0.3662nz)] + \\
& (-4)[1 + (-1)^{nz}] \cos[\pi(0.5nx + 0.5ny + 0.0132nz)] + \\
& (-4)[1 + (-1)^{nx}] \cos[\pi(0.5nx - 0.5ny - 0.0132nz)]
\end{aligned}$$

Зная структурный факторы вычислим конкретные значения $F(100)$, $F(200)$ и $F(002)$ используя (4):

$$\begin{aligned}
F(100) = & -\frac{1}{2v_c \pi^{1/2}} \sum a_i b_k \left(\frac{1}{\alpha_{ik}} \right)^{5/2} \exp \left(-\frac{\alpha_i \beta_k}{\alpha_{ik}} x_0^2 \right) \times \\
& \sum_{\bar{g}} \left\{ \beta_k x_0 \cos \left[2\pi n_x \left(x_i + \frac{\beta_k x_0}{\alpha_{ik}} \right) + 2\pi n_y y_i + 2\pi n_z z_i \right] - \right. \\
& \left. - \frac{2\pi n_x}{2a} \sin \left[2\pi n_x \left(x_i + \frac{\beta_k x_0}{\alpha_{ik}} \right) + 2\pi n_y y_i + 2\pi n_z z_i \right] \right\} \times \\
& \left[\frac{F_1(\mathbf{g})}{\left[\left(\frac{n_x}{a} \right)^2 + \left(\frac{n_y}{b} \right)^2 + \left(\frac{n_z}{c} \right)^2 \right]} \exp \left[-\frac{\pi^2}{\alpha_{ik}} \left(\left(\frac{n_x}{a} \right)^2 + \left(\frac{n_y}{b} \right)^2 + \left(\frac{n_z}{c} \right)^2 \right) \right] \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F(200) = & -\frac{1}{2v_c \pi^{1/2}} \sum a_i b_k \left(\frac{1}{\alpha_{ik}} \right)^{5/2} \exp \left(-\frac{\alpha_i \beta_k}{\alpha_{ik}} x_0^2 \right) \times \\
& \sum_{\bar{g}} \left\{ \left(\frac{x_0^2 \beta_k^2}{\alpha_{ik}} - \frac{\pi^2}{\alpha_{ik}} \left(\frac{n_x}{a} \right)^2 + \frac{1}{2} \right) \cos \left(\overline{g r_j} + \frac{\overline{g x_0} \beta_k}{\alpha_{ik}} \right) - \right. \\
& \left. - \frac{x_0 \beta_k}{\alpha_{ik}} \frac{2\pi n_x}{a} \sin \left(\overline{g r_j} + \frac{\overline{g x_0} \beta_k}{\alpha_{ik}} \right) \right\} \times \\
& \frac{F_1(\mathbf{g})}{\left[\left(\frac{n_x}{a} \right)^2 + \left(\frac{n_y}{b} \right)^2 + \left(\frac{n_z}{c} \right)^2 \right]} \exp \left[-\frac{\pi^2}{\alpha_{ik}} \left(\left(\frac{n_x}{a} \right)^2 + \left(\frac{n_y}{b} \right)^2 + \left(\frac{n_z}{c} \right)^2 \right) \right] \\
F(002) = & -\frac{1}{2v_c \pi^{1/2}} \sum a_i b_k \left(\frac{1}{\alpha_{ik}} \right)^{5/2} \exp \left(-\frac{\alpha_i \beta_k}{\alpha_{ik}} x_0^2 \right) \times \\
& \sum_{\bar{g}} \left\{ \left(-\frac{\pi^2}{\alpha_{ik}} \left(\frac{n_z}{c} \right)^2 + \frac{1}{2} \right) \cos \left[2\pi n_x \left(x_j + \frac{x_0 \beta_k}{\alpha_{ik}} \right) \right] + \right. \\
& \left. + 2\pi n_y y_j + 2\pi n_z z_j \right\} \times \\
& \frac{F_1(\mathbf{g})}{\left[\left(\frac{n_x}{a} \right)^2 + \left(\frac{n_y}{b} \right)^2 + \left(\frac{n_z}{c} \right)^2 \right]} \exp \left[-\frac{\pi^2}{\alpha_{ik}} \left(\left(\frac{n_x}{a} \right)^2 + \left(\frac{n_y}{b} \right)^2 + \left(\frac{n_z}{c} \right)^2 \right) \right]
\end{aligned}$$

Все вычисления не требуют программирования и могут быть выполнены в режиме пользователя, который присутствует во многих пакетах типа «Математика». В дипломной работе вычисления проводились в программе Wolfram Mathematica 7:

```

F (100) _____

- (1 / Pi) ^ (1 / 2) * (1 / 2) *
  (1 / (10.11381824984835 * 10.204525139981518 * 24.863136530877192)) *
  Sum[ c[[i]] * c[[j]] * (1 / (d[[i]] + d[[j]])) ^ (5 / 2) *
    Exp[- (5.056909124924175) ^ 2 * d[[i]] * d[[j]] *
      (1 / (d[[i]] + d[[j]])))] *
  Sum[
    (5.056909124924175 * d[[j]] *
      Cos[2 * Pi * nx (0.25 + 0.5 * (d[[j]] / (d[[i]] + d[[j]]))) +
        2 * Pi * 0.25 * ny + 2 * Pi * 0.0066 * nz] -
      (Pi / 10.11381824984835) * nx *
      Sin[2 * Pi * nx (0.25 + 0.5 * (d[[j]] / (d[[i]] + d[[j]]))) +
        2 * Pi * 0.25 * ny + 2 * Pi * 0.0066 * nz]) *
    (2 * (1 + (-1)^(nx+ny) + (-1)^(nx+nz) + (-1)^(ny+nz)) +
      6 * ((-1)^(nx) + (-1)^(nz)) * Cos[Pi (0.01354 ny - 0.277 nz)] +
      ((-1)^(ny) + (-1)^(nx+ny+nz)) * Cos[Pi * (0.01354 ny + 0.277 nz)]) +
    (-4) * (1 + (-1)^(nx+nz)) * Cos[Pi * (0.06542 ny - 0.3662 nz)] +
    (-4) * ((-1)^(nx+ny) + (-1)^(ny+nz)) * Cos[Pi * (0.06542 ny + 0.3662 nz)] +
    (-4) * (1 + (-1)^(nz)) * Cos[Pi * (0.5 nx + 0.5 ny + 0.0132 nz)] +
    (-4) * (1 + (-1)^(nz)) * Cos[Pi * (0.5 nx - 0.5 ny - 0.0132 nz)]) *
    Exp[- (1 / (d[[i]] + d[[j]])) *
      ((Pi / 10.11381824984835) ^ 2 * nx^2 +
        (Pi / 10.204525139981518) ^ 2 * ny^2 +
        (Pi / 24.863136530877192) ^ 2 * nz^2)] *
    (1 / ((nx / 10.11381824984835) ^ 2 + (ny / 10.204525139981518) ^ 2 +
      (nz / 24.863136530877192) ^ 2 + 0.0000000000000001)),
    {nx, -100, 100}, {ny, -50, 50}, {nz, -50, 50}], {i, 6, 10},
    {j, 6, 10}]

blok (1, 1, - 5, 5) = 0.021468328694686296,
blok (1, 6 - 5, 10) = 0.11241308097603647`

blok (6, 1 - 10, 5) = 0.00193946666058909`
blok (6, 6 - 10, 10) = 5.7869503183131805`*^-6

sumblok = 0.13582666328163018`

```

F (200) _____

```

- (1 / Pi) ^ (1 / 2) * (1 / 2) *
  (1 / (10.11381824984835 * 10.204525139981518 * 24.863136530877192)) *
  Sum [c[[i]] * c[[j]] * (1 / (d[[i]] + d[[j]])) ^ (5 / 2) *
    Exp[- (5.056909124924175) ^ 2 * d[[i]] * d[[j]] * (1 / (d[[i]] + d[[j]]))] *
    Sum [
      ((5.056909124924175 * d[[j]]) ^ 2 * (1 / (d[[i]] + d[[j]]))) -
        Pi ^ 2 * (1 / (d[[i]] + d[[j]])) * (nx / 10.11381824984835) ^ 2 + (1 / 2)) *
        Cos [Pi * ((0.5 + (d[[j]] / (d[[i]] + d[[j]]))) * nx + 0.5 * ny + 0.0132 * nz)] -
        2 * ((5.056909124924175 * d[[j]]) / (d[[i]] + d[[j]])) * (Pi / 10.11381824984835) *
        nx * Sin [Pi * ((0.5 + (d[[j]] / (d[[i]] + d[[j]]))) * nx + 0.5 * ny + 0.0132 * nz)] *
      (2 * (1 + (-1)^(nx+ny) + (-1)^(nx+nz) + (-1)^(ny+nz)) +
        6 * ((-1)^(nx) + (-1)^(nz)) * Cos [Pi * (0.01354 ny - 0.277 nz)] +
        ((-1)^(ny) + (-1)^(nx+ny+nz)) * Cos [Pi * (0.01354 ny + 0.277 nz)] +
        (-4) * (1 + (-1)^(nx+nz)) * Cos [Pi * (0.06542 ny - 0.3662 nz)] +
        (-4) * ((-1)^(nx+ny) + (-1)^(ny+nz)) * Cos [Pi * (0.06542 ny + 0.3662 nz)] +
        (-4) * (1 + (-1)^(nz)) * Cos [Pi * (0.5 nx + 0.5 ny + 0.0132 nz)] +
        (-4) * (1 + (-1)^(nz)) * Cos [Pi * (0.5 nx - 0.5 ny - 0.0132 nz)] *
      Exp[- (1 / (d[[i]] + d[[j]]))] *
      ((Pi / 10.11381824984835) ^ 2 * nx ^ 2 + (Pi / 10.204525139981518) ^ 2 * ny ^ 2 +
        (Pi / 24.863136530877192) ^ 2 * nz ^ 2) *
      (1 / ((nx / 10.11381824984835) ^ 2 + (ny / 10.204525139981518) ^ 2 +
        (nz / 24.863136530877192) ^ 2 + 0.0000000000000001)), {nx, -100, 100},
      {ny, -50, 50}, {nz, -50, 50}], {i, 6, 10}, {j, 6, 10}]

blok (1, 1 - 5, 5) = 0.1054110766659704`,
blok (1, 6 - 5, 10) = 0.5626299707755741,

blok (6, 1 - 10, 5) = 0.00397494248043431,
blok (6, 6 - 10, 10) = 0.000016525089390684354

sumblok = 0.6720325150113695`

```

F (002)

```

(1 / Pi) ^ (1 / 2) * (1 / 2) *
(1 / (10.11381824984835 * 10.204525139981518 * 24.863136530877192)) *
Sum[c[[i]] * c[[j]] * (1 / (d[[i]] + d[[j]])) ^ (5 / 2) *
Exp[- (5.056909124924175) ^ 2 * d[[i]] * d[[j]] * (1 / (d[[i]] + d[[j]])))] *
Sum[(Pi ^ 2 * (1 / (d[[i]] + d[[j]])) * (nz / 24.863136530877192) ^ 2 - (1 / 2)) *
Cos[Pi * ((0.5 + (d[[j]] / (d[[i]] + d[[j]]))) * nx + 0.5 * ny + 0.0132 * nz)] *
(2 * (1 + (-1)^(nx+ny) + (-1)^(nx+ns) + (-1)^(ny+ns)) +
6 * ((-1)^(nx) + (-1)^(ns)) * Cos[Pi * (0.01354 ny - 0.277 nz)] +
((-1)^(ny) + (-1)^(nx+ny+ns)) * Cos[Pi * (0.01354 ny + 0.277 nz)] +
(-4) * (1 + (-1)^(nx+ns)) * Cos[Pi * (0.06542 ny - 0.3662 nz)] +
(-4) * ((-1)^(nx+ny) + (-1)^(ny+ns)) * Cos[Pi * (0.06542 ny + 0.3662 nz)] +
(-4) * (1 + (-1)^(ns)) * Cos[Pi * (0.5 nx + 0.5 ny + 0.0132 nz)] +
(-4) * (1 + (-1)^(ns)) * Cos[Pi * (0.5 nx - 0.5 ny - 0.0132 nz)] *
Exp[- (1 / (d[[i]] + d[[j]])))] *
((Pi / 10.11381824984835) ^ 2 * nx ^ 2 + (Pi / 10.204525139981518) ^ 2 * ny ^ 2 +
(Pi / 24.863136530877192) ^ 2 * nz ^ 2) *
(1 / ((nx / 10.11381824984835) ^ 2 + (ny / 10.204525139981518) ^ 2 +
(nz / 24.863136530877192) ^ 2 + 0.0000000000000001)), {nx, -100, 100},
{ny, -50, 50}, {nz, -50, 50}], {i, 1, 5}, {j, 6, 10}]

blok (1, 1 - 5, 5) = -0.002432916930531318`,
blok (1, 6 - 5, 10) = 0.003469664533022123`

blok (6, 1 - 10, 5) = 0.003469664533022123,
blok (6, 6 - 10, 10) = 5.169126081880714`*^-7

sumblok = 0.004506929048121116`

```


В заключение подсчитаем двухцентровые матричные элементы на орбиталях p_x и p_z , ионов O_{31} и O_{32} для УСО при условии $\mathbf{r}_0 = (x_0, 0, 0)$:

$$\langle p_x(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) | H_{LR} | p_x(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b) \rangle = \frac{3}{2} [F_{jb}(200) - x_0 F_{jb}(100)] =$$

$$-0.22245866918264356 = \mathbf{-0.603125eV}$$

$$\langle p_z(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) | H_{LR} | p_z(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b) \rangle = \frac{3}{2} F_{jb}(002) =$$

$$0.006760393572181674 = \mathbf{0.183286eV}$$

Заключение

Двухцентровые матричные элементы между катионом и анионом для ионных кристаллов или примесных центров в ионных кристаллах, при совпадении области перекрывания орбиталей аниона и катиона с областью изменения знака электростатического потенциала будут малы. Двухцентровые матричные элементы взаимодействия электрона с БКР необходимо оценивать, на наш взгляд, при вычислении амплитуд перехода заряда по анионной или катионной подрешетке, так как область перекрывания приходится на область постоянного знака электростатического потенциала. Например, в работе [1] вычисляются амплитуды перехода по кислородной подрешетке La_2CuO_4 . Величина этих амплитуд лежит в пределах $0.35 - 1.5\text{eV}$, но учитывается только близкодействующее взаимодействие, также считали амплитуду перехода электронов с орбитали p_x на орбиталь p_y , мы же считаем переход на орбиталях p_x и p_z , но электроны те же самые. Видим, что полученные нами значения имеют тот же порядок и поэтому этот вклад должен учитываться, так как может привести к заметной корректировке.

Список литературы

- [1] A. K. McMahan, J. F Annet, R. M. Martin, Phys. Rev. B. **42**, 6268 (1990).
- [2] О. А.Аникеенок, ФТТ, **45**, 812 (2003).
- [3] О. А.Аникеенок, ФТТ, **47**, 1065 (2005).
- [4] О. А.Аникеенок, ФТТ, **48**, 1771 (2006).
- [5] M. I. Falin, O. A. Anikeenok, V. A. Latypov, N. M. Khaidukov, F. Callens, H. Vrielinck, A. Hoefstaetter, Phys. Rev. B **80**, 174110 (2009).
- [6] О.А. Аникеенок, ФТТ, **53**, 2209 (2011).
- [7] O. A. Anikeenok, MRSej, **13**, 27 (2011).
- [8] J.Riera, D. Poilblanc, Phys. Rev. B **59**, 2667 (1999).
- [9] H.-J. Koo, M.-H. Whangbo, Solid State Commun. **111**, 353 (1999).
- [10] Tuilier, M H, Chevalier, B, Tressaud, A, Brisson, C, Soubeyroux, J L, Etourneau, J
PHYCE6,200,113-121
- [11] H. Smolinski, C. Gros, W. Weber, U. Peuchert, G. Roth, M. Weiden, C. Geibel, Phys. Rev. Lett. **80**, 5164 (1998).