

布里渊区中的对称平均点*

薛 舫 时

(南京电子器件研究所)

1986 年 8 月 8 日收到

提 要

本文提出了一些布里渊区中的对称平均点,用它可以方便地计算布里渊区中的平均值,其精度可以和特殊点相比而计算量却要小得多。文内给出了立方和六角晶格的对称平均点,并用具体的数值计算例子说明了它的计算精度。

一、引 言

固体物理中许多物理量的计算都涉及到对布里渊区内各波矢值的平均,这种三维空间的积分计算不仅计算量大,而且也不很精确。后来 Baldereschi^[1] 和 Chadi 等人^[2,3] 提出可以用布里渊区中的一些代表点和特殊点上的加权平均值来给出布里渊区中的平均值,不仅减少了计算量而且达到了较高的精度,因而该方法一直被大家沿用至今。但是当计算精度比较高时,这些特殊点的点数增加很快,而且所涉及到的几乎都是 k 空间中的一般点,不但计算十分困难,也不容易从实验中得到有关的信息。例如在能带计算中,大家所关心的是一些高对称点或临界点上的结果。但是为了计算自洽晶体势就必须另外去求这些特殊点下的电荷密度,从而增加了计算量。在杂质和缺陷理论中,常常用布洛赫函数来展开波函数。如果为了加速收敛而使用特殊点,则又不容易看出各个能谷对杂质波函数的贡献。为此有必要寻求用对称点来代替特殊点求平均值的方案。

二、计算方案和结果

Chadi 等人指出^[3], k 空间中的周期函数 $f(\mathbf{k})$ 可以用傅里叶级数展开成

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

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

(2) 式中的求和遍及对称操作所产生的所有等价格矢 $\mathbf{R}$ 。格矢按其长度排列成 $0 \leq C_m \leq C_{m+1} \dots$ 的一个个壳层。如果我们能找到布里渊区中的一些点集 $\{\mathbf{k}_i\}$, 使得

* 中国科学院科学基金资助的课题。

$$\sum_i \alpha_i A_m(\mathbf{k}_i) = 0 \quad (m = 1, 2, \dots), \quad (3)$$

式中 α_i 为各点的权重, 那末在这些点上 f 函数的加权平均值 $\sum_i \alpha_i f(\mathbf{k}_i)$ 就等于 f 函数在布里渊区中的平均值. 因此我们的目标就是寻求在尽量多的 m 值下 (3) 式得以成立的 $\{\mathbf{k}_i\}$ 点集.

Chadi^[3] 给出了寻求满足 (3) 式的特殊点的方法, 而我们则试图找出满足 (3) 式的对称点集. 为了说明两者的差别, 考虑周期为 a 的一维晶格. 它的布里渊区在 $(-\pi/a, \pi/a)$ 之间. 要使第一近邻 $R = \pm a$ 满足 (3) 式, 应取起始点 $\pi/2a$. 对于第二近邻 $R = \pm 2a$, 则要用 $K = \pi/4a$. 按照 Chadi 的合成方法可以得到两个特殊点 $\pi/4a$ 和 $3\pi/4a$, 其权重均为 0.5, 于是 (3) 式中的和为

$$0.5 \times \cos\left(\frac{\pi}{4a} \cdot R\right) + 0.5 \times \cos\left(\frac{3\pi}{4a} \cdot R\right).$$

它在 $R = a$ 和 $R = 2a$ 下均等于零. 容易看出布里渊区中心和边界上的高对称点都被排除在外, 而且起始点 $\pi/2a$ 也不包含在所合成的特殊点中. 在三维情形这种合成过程常常要产生许多复杂的一般点. 在我们的方法中是把布里渊区中心点 0 和边界点 π/a 加入进去来满足 (3) 式, 从而得到三点: $K_1 = \pi/2a$, $\alpha_1 = 0.5$; $K_2 = 0$, $\alpha_2 = 0.25$; $K_3 = \pi/a$, $\alpha_3 = 0.25$. 相应 (3) 式写为

$$0.5 \times \cos\left(\frac{\pi}{2a} \cdot R\right) + 0.25 \times \left(\cos(0 \cdot R) + \cos\left(\frac{\pi}{a} R\right)\right).$$

显然它在 $R = a$ 和 $R = 2a$ 下都为零. 这样我们自然地把布里渊区中的高对称点和边界点包含了进去, 而且没有放弃掉对称性较好的起始点. 我们把这样得到的对称点集称为对称平均点.

在三维情形中, 计算比较复杂. 例如面心立方晶格的布里渊区是截角八面体, 波矢记为 $\frac{2\pi}{a}(k_x, k_y, k_z)$, 为简便起见, 下面省去单位 $2\pi/a$. 首先考虑 (3) 式容易满足的 $\Delta(0.5, 0.0, 0.0)$, $A(0.25, 0.25, 0.25)$ 和 $\Sigma(0.5, 0.5, 0.0)$ 点, 然后加入 Γ, X, L, W 点来平均. 由于截角八面体的形状比较特殊, 不能完全用布里渊区边界点来满足 (3) 式的要求, 所以还另外使用了布里渊区内的 $(0.75, 0.25, 0.25)$ 点. 和 Chadi 等人一样, 权重 α_i 的大小由布里渊区中的等价点数来计算. 表 1 中列出了这 8 点对称平均点的 $\mathbf{k}$ 值、权重以及 (3) 式不能满足的 $\mathbf{R}$ 格矢壳层. 表 1 中还列出了高对称点以及特殊点的结果. 容易看出对称平均点比二阶特殊点少两点, 而失效的壳层只比二阶特殊点多了 $(2, 2, 0)$ 一层.

表 2 至表 4 分别列出了体心立方晶格、简立方晶格和六角结构的对称平均点. 为了便于比较, 六角结构的格矢选取得同文献 [3] 的一样. 从这些表中容易看出, 对称平均点的点数和高阶特殊点相近, 失效的原子壳层略多于高阶特殊点, 而比低阶特殊点好.

为了具体地比较它们的精度, 我们用这些点计算了硅晶体各能带的平均能量. 用 Vogl 等人^[4] 所给的半经验紧束缚参量进行紧束缚能带计算, 所得的十个能带的平均能量列在表 5 中.

由表 5 中容易看出, 用高对称点 Γ, X 和 L 算得的结果是很差的, 例如最低的两个导

表 1 面心立方晶格的特殊点及对称平均点

		k_x	k_y	k_z	α	失效壳层
对称点	Γ	0.0	0.0	0.0	1/8	(1,1,0), (2,0,0), (1,1,2), (2,2,0), (3,1,0), (2,2,2), (3,2,1), (4,0,0)
	X	1.0	0.0	0.0	3/8	
	L	0.5	0.5	0.5	1/2	
特殊点	一 阶	0.75	0.25	0.25	3/4	(2,0,0), (2,2,0), (2,2,2) (4,0,0)
		0.25	0.25	0.25	1/4	
	二 阶	0.875	0.375	0.125	3/16	(4,0,0)
		0.875	0.125	0.125	3/32	
		0.625	0.625	0.125	3/32	
		0.625	0.375	0.375	3/32	
		0.625	0.375	0.125	3/16	
		0.625	0.125	0.125	3/32	
		0.375	0.375	0.375	1/32	
		0.375	0.375	0.125	3/32	
		0.375	0.125	0.125	3/32	
		0.125	0.125	0.125	1/32	
对称平均点	Γ	0.0	0.0	0.0	1/64	(2,2,0), (4,0,0)
	X	1.0	0.0	0.0	3/64	
	L	0.5	0.5	0.5	1/16	
	Δ	0.5	0.0	0.0	3/32	
	W	1.0	0.5	0.0	3/32	
	Σ	0.5	0.5	0.0	3/16	
	A	0.25	0.25	0.25	1/8	
		0.75	0.25	0.25	3/8	

表 2 体心立方晶体的对称平均点

		k_x	k_y	k_z	α	失效壳层
对称平均点	Γ	0.0	0.0	0.0	1/32	(2,2,0), (4,0,0)
	H	1.0	0.0	0.0	1/32	
	P	0.5	0.5	0.5	1/16	
	Δ	0.5	0.0	0.0	3/16	
	N	0.5	0.5	0.0	3/16	
	F	0.75	0.25	0.25	1/4	
	A	0.25	0.25	0.25	1/4	
	一阶特殊点(二点)					(2,0,0), (2,2,0), (2,2,2), (4,0,0)
	二阶特殊点(八点)					(4,0,0)

带 5, 6 和最高的两个价带 7, 8 都简并了。在这里用二阶特殊点 (10 点) 算得的结果被认为是最好的, 而用对称平均点算得的结果和它是十分相近的。说明这种对称平均点是实用的。

表 3 简立方晶体的对称平均点

		k_x	k_y	k_z	α	失效壳层
对称平均点	Γ	0.0	0.0	0.0	1/16	$(2,2,0), (4,0,0)$
	X	0.5	0.0	0.0	3/16	
	M	0.5	0.5	0.0	3/16	
	R	0.5	0.5	0.5	1/16	
	A	0.25	0.25	0.25	1/2	
一阶特殊点(一点)						$(2,0,0), (2,2,0), (2,2,2), (4,0,0)$
二阶特殊点(四点)						$(4,0,0)$

表 4 六角结构的对称平均点

		k_x	k_y	k_z	α	失效壳层
对称平均点	Γ	0	0	0	1/48	$(2,4,0), (0,0,4), (2,4,2), (0,6,0)$
	K	2/3	0	0	1/24	
	M	1/2	1/2	0	1/16	
	T	1/3	0	0	1/8	
	A	0	0	1/2	1/48	
	H	2/3	0	1/2	1/24	
	L	1/2	1/2	1/2	1/16	
	S	1/3	0	1/2	1/8	
	Δ	0	0	1/4	1/24	
	P	2/3	0	1/4	1/12	
	U	1/2	1/2	1/4	1/8	
一阶特殊点(三点)						$(0,0,2), (0,3,0), (0,3,2), (0,0,4), (0,3,4), (3,6,0), (3,6,2), (0,0,6), (3,6,3), (0,6,2)$
二阶特殊点(六点)						$(0,0,2), (0,0,4), (3,6,0), (3,6,2), (0,0,6)$
三阶特殊点(十二点)						$(0,0,4), (3,6,0)$

表 5 用四种平均点算得的硅的平均能量

能带	高对称点 Γ, X, L	一阶 特殊点	二阶 特殊点	对称 平均点
1	10.5714	10.5680	10.4875	10.4738
2	9.5099	9.6064	9.6785	9.6901
3	5.3013	5.5853	5.6856	5.6316
4	5.2175	5.2925	5.2669	5.2840
5	2.2949	2.7951	2.6818	2.6954
6	2.2879	1.7126	1.7751	1.7891
7	-1.7875	-1.8625	-1.8202	-1.8540
8	-1.7875	-2.1272	-2.2455	-2.2073
9	-6.6421	-6.1388	-6.1220	-6.1706
10	-9.7057	-10.1714	-10.1276	-10.0721

当然, Chadi 的特殊点还有一个优点, 它可以用高阶特殊点来不断改善计算的精度. 但是这样做时所用的点数就要急剧地增大. 例如面心立方晶格的三阶特殊点就有 60 个, 从而使计算量大大增加. 从表 5 所列数据来看, 一般情形下是不会用到这种高阶特殊点的.

参 考 文 献

- [1] A. Baldereschi *Phys. Rev.*, **B7**(1973), 5212.
- [2] D. J. Chadi and M. L. Cohen, *Phys. Rev.*, **B7**(1973), 692.
- [3] D. J. Chadi and M. L. Cohen, *Phys. Rev.*, **B8**(1973), 5747.
- [4] P. Vogl, H. P. Hjalmarson and J. D. Dow, *J. Phys. Chem.*, **44**(1983), 365.

SYMMETRY AVERAGE POINTS IN THE BRILLOUIN ZONE

XUE FANG-SHI

(Nanjing Institute of Electronic Devices)

ABSTRACT

We present sets of symmetry average points in the Brillouin zone from which the average over the Brillouin zone of a periodic function of wave vector can be determined easily. The calculation accuracy is comparable to that of special points, but the calculation labour is reduced considerably. The symmetry average points for crystals with cubic and hexagonal Bravais lattices are given and the calculation accuracy is illustrated numerically through an real example.