

โครงสร้างแถบอิเล็กทรอนิกส์ของโคโตะทรานซิสต์แบบประมาณ



นางสาวสงวนสิริ รุ่งเกียรติสกุล

005101

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

แผนกวิชาฟิสิกส์

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พ.ศ. ๒๕๑๘

9

THE APPROXIMATE ELECTRONIC BAND STRUCTURE
OF TRANSITION METALS



Miss Sa-nguansiri Roongkeadsakoon

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Science
Department of Physics
Graduate School
Chulalongkorn University

1976

Accepted by the Graduate School, Chulalongkorn
University in partial fulfillment of the requirements
for the Degree of Master of Science.

Kiril Prochnatmol.
.....

Dean of the Graduate School

Thesis Committee.....*Kong Kitayalin*.....Chairman

.....*A. Sath*.....

.....*Seon Pakuntwapibal*.....

.....*Virulh Saryanit*.....

Thesis Supervisor Assistant Professor Dr. Virulh Sa-yakanit

Thesis Title **The Approximate Electronic Band Structure of Transition Metals**

Name Miss Sa-nguansiri Roongkeadsakoon

Department Physics

Academic Year 1975

ABSTRACT



The KKR and KKR-Z theories for electronic band structure calculations are reviewed. Heine's justification of the model Hamiltonian methods for transition metals devised by Hodges et al. and by Mueller independently is described. Hubbard's hybrid theory without an arbitrary parameter is adopted as the starting point for the study of s-d hybridization and pseudopotential effects in transition metals. An attempt is made to obtain the total band structure energy per atom for transition metals.

In comparison with Deegan's work based on another version of Hubbard's theory with a parameter, the present result is more general and physically more interesting as no arbitrary parameters were needed in the theory.

หัวข้อวิทยานิพนธ์ โครงสร้างแถบคลื่นเลกตรอนของโตะหะทรานซิชันแบบประชาชน
ชื่อ นางสาว สงวนสิริ รุ่งเกียรติสกุล แผนกวิชา ฟิสิกส์
ปีการศึกษา ๒๕๑๘

บทคัดย่อ

ในการวิจัยได้ศึกษาทฤษฎีการคำนวณโครงสร้างแถบพลังงานอิเล็กทรอนิกส์แบบ
เคเคอาร์ และ เคเคอาร์-เซค นอกจากนี้ยังได้ศึกษาทฤษฎีของไฮเน่ ในการให้เหตุผล
สนับสนุนวิธีฮามิลโทเนียนจำลองสำหรับการคำนวณแถบพลังงานของโตะหะทรานซิชัน ซึ่งคิด
ขึ้นโดยฮอคจิสและคณะ และโดยมูดเลอร์ การศึกษาเอส-ดีไฮบริดเซชันและศักย์จำแลง
อาศัยผลจากทฤษฎีที่ไม่มีพารามิเตอร์ของฮัมบาร์ด งานวิจัยนี้ได้พยายามคำนวณพลังงานต่อ
อะตอมที่ได้จากโครงสร้างแถบพลังงานในโตะหะทรานซิชัน

ทฤษฎีที่ได้ทำการศึกษานี้มีความน่าสนใจ และใช้งานได้กว้างขวางกว่าผลงาน
ของดีแกน เนื่องจากไม่มีความจำเป็นต้องอาศัยพารามิเตอร์ในทฤษฎี



ACKNOWLEDGEMENTS

I wish to express my sincere appreciation to Dr. Virulh Sa-yakanit who supervises this thesis for his valuable guidance throughout the work.

I am greatly indebted to Dr. Kopr Kritayakirana for his kind assistance in improving my English manuscript and for many useful discussions, and to Dr. Sa-on Patumtevapibal for her helpful conversations.

Also, I would like to acknowledge the kind support of the University Development Commission, National Education Council, in providing a graduate scholarship.

TABLE OF CONTENTS

	Page
ABSTRACT.....	iii
ACKNOWLEDGEMENTS.....	iv
TABLE OF CONTENTS.....	v
LIST OF ILLUSTRATIONS.....	vii
 CHAPTER I	
INTRODUCTION.....	1
1. What is a band structure?.....	1
2. The classification of band structure cal- culations.....	4
3. Basic concept of pseudopotential methods..	5
4. Description of the interpolation scheme for transition metal.....	8
4.a) The model Hamiltonian.....	9
4.b) LCAO-LCAO block.....	13
4.c) OPW-OPW block.....	15
4.d) OPW-LCAO block.....	18
5. General schedule.....	22
 CHAPTER II	
KORRINGA-KOHN-ROSTOKER EQUATIONS AND THEIR PLANE WAVE REPRESENTATIONS.....	24
1. Nonvariational derivation of the KKR secu- lar equation.....	24
2. KKR-equations in a plane wave representa- tion.....	43



	Page
CHAPTER III	
FIRST-PRINCIPLES DERIVATIONS OF THE INTERPOLATION	
SCHEMES FOR THE BAND STRUCTURES OF TRANSITION	
METALS.....	59
1. A general description of the band structures	
of pure transition metals.....	61
1.a) The transition from bound to free	
bands.....	61
1.b) d-bands and resonances.....	64
2. Heine's formulation.....	68
3. Hubbard's scheme without cut off parameter..	80
CHAPTER IV	
TOTAL BAND STRUCTURE ENERGY OF TRANSITION METALS.	95
1. Hybridization and pseudopotential contribu-	
tions to conduction bands.....	101
2. The total energy of d-bands.....	103
3. The total band structure energy for transi-	
tion metals.....	106
4. Results.....	107
5. Summary and discussions.....	112
6. Conclusions.....	117
APPENDIX A	
THE GREENIAN OF THE SYSTEM.....	119
REFERENCES	123
VITA	127

LIST OF ILLUSTRATIONS

Figure		Page
1	The Brillouin zone of the fcc lattice showing the $1/48$ primitive wedge used in the calculations, with lines and points of high symmetry.....	11
2	Showing the construction of the crystal potential by superposing the atomic potentials located at various sites.....	13
3	Showing the conjugate boundary points: r and r^c ; and the fundamental translation vector τ_r joining them.....	27
4	Showing the cross section of the inscribed sphere in the atomic polyhedron.....	27
5	Conventional LCAO description of the formation of metallic conduction bands.....	62
6(a)	The bottom of free electron bands lie a little below the assumed muffin-tin zero.....	63
(b)	Conventional LCAO description of the formation of metallic conduction bands in terms of the muffin-tin potentials.....	63
7	Radial extension of a $4s$ - and a $3d$ -states for a transitional atom (schematic).....	64
8(a)	The addition of the centrifugal energy $l(l+1)/r^2$ to the atomic potential $U(r)$ gives rise to an effective potential V_{eff} with bound state at E_d ($l=2$ case).....	66

Figure	Page
(b) The overlapping of atomic potentials to produce a muffin-tin potential U_{MT} turns the d-bound state, E_d , into a resonance at E_r , above the muffin-tin zero.....	66
9(a) Showing the existence of the d centrifugal barrier and the crystal potential in the muffin-tin approximation as well as the position of the atomic d-level in the iron-series transition metals relative to the flat portion of the muffin-tin.....	67
(b) Showing the relative position of the conduction band and the d-band.....	67
10 Energy bands of an fcc transition metal along [100] direction, before and after hybridization.....	79