

شبه پتانسیل و برخی روشهای تولید آن

هادی اکبرزاده و عطا... رودگر

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

(دریافت مقاله: ۷۷/۵/۱۲ دریافت نسخه نهایی: ۷۸/۴/۱)

چکیده

در این مقاله نحوه تولید شبه پتانسیلهای بهینه، بخصوص جدیدترین روش آن یعنی تنظیم Q_c توضیح داده شده است. شبه پتانسیلهای حاصل از سه روش BHS (بچلت، هامن و اشلوتر)، کرکر و تنظیم Q_c برای تلوریم با یکدیگر مقایسه شده‌اند. خواص ساختاری و الکترونی بلور تلوریم با استفاده از شبه پتانسیل تنظیم Q_c بیش از دو نوع دیگر با نتایج تجربی انطباق دارند. به علاوه این شبه پتانسیل به انرژی قطع کمتری منجر می‌شود، لذا شبه پتانسیل تنظیم Q_c بهتر از کرکر و BHS است.

۱. مقدمه

خواص بلور ندارند، چراکه بیشتر خواص بلور و آثار مربوط به پیوندهای شیمیایی به ساختار الکترونی خارج از یون بستگی دارند.

به دلیل نقش بارز شبه پتانسیل در بررسی خواص بلورها ارائه روشهای جدید تولید و نیز بهینه سازی آنها همواره مورد توجه بوده‌اند [۱]. ابتدا پتانسیلهای آروینی [۲]، نیمه آروینی [۳] و مدل [۴] پیشنهاد شدند، سپس شبه پتانسیلهای ابتدا به ساکن که بر اصول اولیه کوانتومی استوارند بتدریج جایگزین روشهای قبلی شدند. نظریه تولید اولین نوع از شبه پتانسیلهای ابتدا به ساکن توسط هامن و دیگران ارائه شد [۵]. بچلت و دیگران توانستند با به کارگیری روش BHS برای ۵۲ عنصر از جدول تناوبی شبه پتانسیل تولید کنند [۶].

کرکر نیز به طور همزمان و مستقل از گروه بچلت روش

الکترونیهای درون بلور را معمولا به دو دسته رسانش و مغزه تقسیم می‌کنند. ویژه توابع الکترونیهای رسانش در داخل و خارج یون و الکترونیهای مغزه تنها در داخل یون گسترده‌اند. خواص بلور بیشتر به رفتار الکترونیهای رسانش در ناحیه خارج از یون بستگی دارند. الکترونیهای مغزه و رسانش در داخل یون به دلیل ناهموازی ویژه توابع حجم محاسبات را افزایش می‌دهند و نقش چندانی در خواص بلور ندارند. نظریه شبه پتانسیل این بخش کم اهمیت و در عین حال پرهزینه را از محاسبات بلوری حذف می‌کند. شبه پتانسیل به گونه‌ای انتخاب می‌شود که ویژه توابع الکترونیهای رسانش و نحوه توزیع ابر الکترونی در ناحیه خارج از یون بر مقادیر واقعی آنها منطبق باشند. این مقادیر در درون یون بر مقادیر واقعی منطبق نیستند و اثر چندانی هم در

$$\phi_1^{ps}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^m \alpha_i j_1(q_i \mathbf{r}) \quad \mathbf{r} < R_c \quad (1)$$

$$\phi_1^{ps}(\mathbf{r}) = \phi_1(\mathbf{r}) \quad \mathbf{r} \geq R_c$$

که در آن مقادیر q_i از رابطه زیر محاسبه می‌شوند

$$\frac{j_1'(q_i R_c)}{j_1(q_i R_c)} = \frac{\phi_1'(R_c)}{\phi_1(R_c)} \quad (2)$$

ϕ_1^{ps} شبه ویژه تابع، R_c شعاع یون، ϕ_1 و ϕ_1' به ترتیب ویژه تابع اصلی و مشتق آن، j_1 و j_1' تابع کروی بسل و مشتق آن است.

هدف نهایی دست‌یابی به یک شبه پتانسیل نرم است که لازمه وجود آن شبه ویژه تابع همواری است که اگر آن را برحسب امواج تخت بسط دهیم به انرژی قطع کمتری منجر شود. این خواسته در صورتی تامین می‌شود که امواج تخت با ضرایب فوریه بالا نقش اندکی در انرژی جنبشی الکترون داشته باشند. لذا در این روش کمینه کردن انرژی جنبشی ناشی از مولفه‌های بالای فوریه، به فرض در محدوده $q > Q_c$ ، به عنوان یک قید در محاسبات وارد می‌شود. اگر این بخش از انرژی جنبشی را با ΔE_K نمایش دهیم خواهیم داشت

$$\Delta E_K = \int_{Q_c}^{\infty} d^3 q q^2 \left| \Phi_1^{ps}(q) \right|^2 \quad (3)$$

که در آن $\Phi_1^{ps}(q)$ تبدیل فوریه $\phi_1^{ps}(\mathbf{r})$ ، q بردار موج و Q_c یک ثابت در فضای فوریه است. در شبه پتانسیلهای بهینه اضافه بر قید فوق سه قید دیگر نیز در محاسبات وارد می‌شوند که عبارتند از: پیوستگی مشتق اول و دوم شبه ویژه تابع در R_c به اضافه شرط بهنجار بودن آن. بهنجارش شبه ویژه تابع معادل شرط پایستگی بار در درون یون است چراکه از یک طرف شبه ویژه تابع در محدوده $r > R_c$ بر ویژه تابع اصلی دستگاه منطبق است و از طرف دیگر ویژه تابع اصلی بهنجار است، لذا مقدار کل بار درون یون از ویژه تابع اصلی به شبه ویژه تابع پایسته خواهد بود که این همان شرط پایستگی بار است. به علاوه قید پیوستگی شبه ویژه تابع $\Phi_1^{ps}(q)$ در R_c به طور صریح ذکر

دیگری را برای تولید شبه پتانسیل ابتدا به ساکن پیشنهاد کرد [۷]. در این روش ابتدا با تعدیل ویژه تابع حاصل از معادله شرودینگر شعاعی یک شبه ویژه تابع بدون گره ساخته می‌شود و سپس با قرار دادن آن در معادله شرودینگر شبه پتانسیل تولید می‌شود، حال آنکه در روش پیشنهادی هامن و دیگران ابتدا شبه پتانسیل محاسبه می‌شود و سپس با به کارگیری آن شبه ویژه تابع ساخته می‌شود.

در سالهای بعد نوع دیگری از شبه پتانسیل تحت عنوان شبه پتانسیل بهینه پیشنهاد شد [۸]. لی و دیگران توانستند با اعمال تصحیحاتی بر روی شبه پتانسیلهای بهینه آنها را بهبود بخشند [۹]. ایشان روش خود را "تنظیم Q_c " نامیدند.

هدف ما تولید شبه پتانسیل برای تلوریم به سه روش BHS، کرکر و تنظیم Q_c و سپس مقایسه نتایج حاصله است. در بخش ۲ نحوه تولید شبه پتانسیلهای بهینه توضیح داده می‌شود و در بخش ۳ شبه پتانسیلهای تولید شده برای Te به سه روش BHS، کرکر و تنظیم Q_c ارائه و با نتایج دیگران مقایسه خواهند شد.

۲. نحوه تولید شبه پتانسیل بهینه

با توجه به اینکه روشهای BHS و کرکر در تولید شبه پتانسیل به تفصیل در مراجع مربوطه توضیح داده شده‌اند [۷ و ۶]، در اینجا تنها تولید به روش تنظیم Q_c را توضیح می‌دهیم. از آنجا که تنظیم Q_c خود تعمیم یافته روشهای دیگری است که تحت عنوان شبه پتانسیلهای بهینه نام‌گذاری شده‌اند، لذا مناسب است که ابتدا این روشها به طور مختصر توضیح داده شوند. در اولین نوع از شبه پتانسیلهای بهینه که توسط رپ و دیگران [۸] ارائه شد (روش RRKJ)، مشابه روش کرکر ابتدا شبه ویژه تابع الکترونیهای رسانش به ازای هر ویژه مقدار اندازه حرکت زاویه‌ای کل l برای یک اتم منزوی محاسبه و سپس با قرار دادن آن در معادله شرودینگر شعاعی شبه پتانسیل حاصل می‌شود. تنها تفاوت با روش کرکر در آن است که در اینجا شبه ویژه تابع به صورت یک ترکیب خطی از امواج کروی بسل در داخل یون مطابق روابط زیر بسط داده می‌شود

پیوستگی شبه پتانسیل در R_c خواهد شد، لذا میزان انحراف میان مشتق لگاریتمی ویژه تابع و شبه ویژه تابع افزایش می‌یابد. حال با تنظیم متغیر Q_c این انحراف را به حداقل می‌رسانند. در حقیقت انتخاب بهینه Q_c موجب رعایت تقریبی شرط پیوستگی شبه پتانسیل می‌شود [۱۲].

با کم شدن تعداد قیود، تعداد امواج کروی بسل نیز از ۴ به ۳ تقلیل می‌یابد. در نتیجه برای تعیین شبه ویژه تابع انتخاب مناسب Q_c و یافتن سه ضریب α_1 و α_2 و α_3 توسط سه قید پیوستگی مشتق اول، بهنجارش و کمینه کردن ΔE_K به طوری که بهترین انطباق مشتق لگاریتمی حاصل شود الزامی خواهد بود.

پس از آنکه بهترین نتیجه برای Q_c حاصل شد شبه ویژه تابع $\phi_1^{ps}(r)$ محاسبه می‌شود، و با قرار دادن آن در معادله شرودینگر شعاعی شبه پتانسیل به دست می‌آید. با حذف برهمکنشهای ناشی از دیگر الکترونهاى رسانش پوشش ابر الکترونهاى رسانش را از شبه پتانسیل برداشته و پس از اعمال تبدیلات کلین من - بایلندر [۱۳] جهت کاهش حجم محاسبات نتیجه در بلور به کار گرفته می‌شود.

۳. نتایج

شبه پتانسیل تلوریم را به ۳ روش BHS، کرکر و تنظیم Q_c تولید کردیم. شکل ۱ منحنی تغییرات انرژی کل یک یاخته بسیط بر حسب انرژی قطع را برای این شبه پتانسیلها نشان می‌دهد. ملاحظه می‌شود که تنظیم Q_c به انرژی قطع کمتری منجر می‌شود (حدود ۳۰۰ eV) حال آنکه این انرژی در روشهای کرکر و BHS به ترتیب ۴۰۰ eV و ۵۰۰ eV می‌باشد.

شبه پتانسیل و شبه ویژه تابع حاصل از روش BHS در اشکال ۲ و ۳ رسم شده‌اند. نحوه تغییرات مشتق لگاریتمی ویژه تابع و شبه ویژه تابع در شعاع مغزه (R_m) بر حسب انرژیهای مختلف برای اریپتالهای s، p و d در شکل ۴ رسم شده‌اند. لازم به ذکر است که در روش BHS شعاع مغزه R_m حدود ۲/۵ برابر شعاعی در نظر گرفته می‌شود که ویژه تابع و شبه ویژه تابع

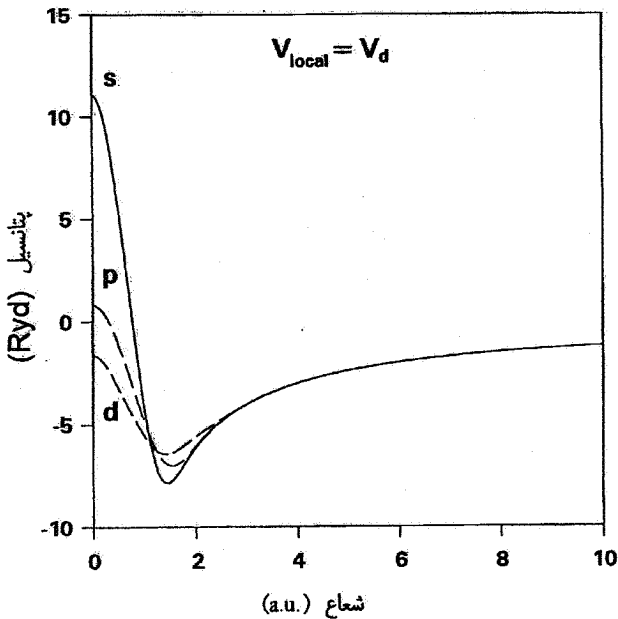
نمی‌شود، چرا که اعمال قید پیوستگی مشتق اول به همراه رابطه ۲ خودبه‌خود منجر به برقراری چنین قیدی خواهد شد. در روش RRKJ با به کار گرفتن حدود ده موج کروی بسل ضرایب ثابت α_i به همراه مقدار Q_c به گونه‌ای تعیین می‌شوند که چهار قید بالا ارضاء شوند. پس از تعیین ضرایب α_i و نیز Q_c شبه ویژه تابع محاسبه می‌شود و با قرار دادن آن در معادله شرودینگر شعاعی معکوس شبه پتانسیل تولید می‌شود. این شبه پتانسیل تنها برای اتم منزوی مناسب است. برای آنکه بتوان آن را در بلورهای با ساختارهای مختلف به کار گرفت و به عبارت دیگر شبه پتانسیل انتقال پذیر باشد در آخرین گام از شبه پتانسیل اتم منزوی پوشش ابر الکترونهاى رسانش طبق رابطه زیر برداشته می‌شود.

$$V_1^{ion}(r) = V_1(r) - [V_{xc}[\rho(r)] + V_H[\rho(r)]]$$

اتم منزوی

که در آن $V_1(r)$ شبه پتانسیل اتم منزوی و $V_1^{ion}(r)$ شبه پتانسیل یون بدون پوشش ابر الکترونی است و V_{xc} و V_H به ترتیب شبه پتانسیل ناشی از برهمکنش تبدالی - همبستگی و پتانسیل هارتری در اتم منزوی است. با حذف جملات فوق شبه پتانسیل مستقل از محیط و لذا قابل به کارگیری در محاسبات بلوری می‌شود.

لی و دیگران [۹] و نیز لین و دیگران [۱۰] با اعمال تصحیحاتی بر روش RRKJ و ارائه روش LQPH توانستند شبه پتانسیل نرمتری تولید کنند. در روش ایشان تنها تعداد چهار ویژه تابع کروی بسل در رابطه ۱ بکار گرفته می‌شود. لذا چهار ضریب ثابت α_i خواهیم داشت که توسط قیودی که قبلاً ذکر شد تعیین می‌شوند. اضافه بر آن در این روش ضریب Q_c برای سادگی محاسبات مساوی با q_f در نظر گرفته می‌شود. با توجه به توضیحات فوق اینک به روش تنظیم Q_c به عنوان تعمیم یافته روش LQPH می‌پردازیم. در این روش قید پیوستگی مشتق دوم ویژه تابع حذف می‌شود و Q_c را به عنوان متغیری که نقش محوری در بهینه کردن شبه پتانسیل دارد در نظر می‌گیرند [۱۱]. از آنجا که حذف این قید موجب مختل شدن

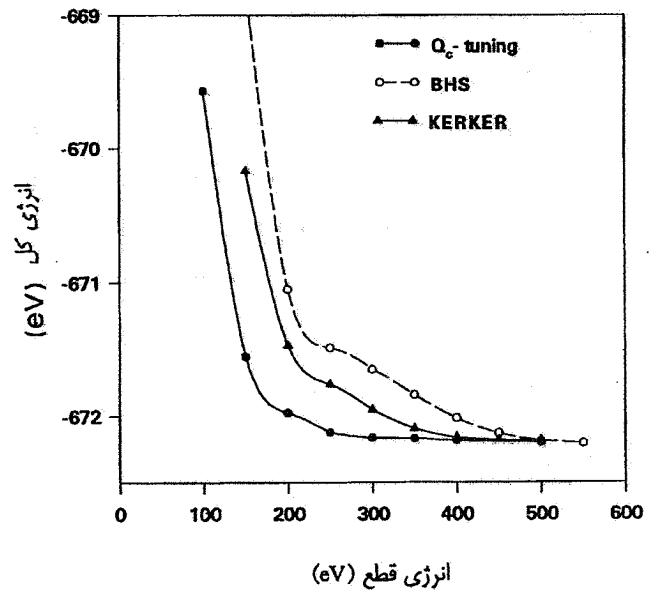


شکل ۲. شبه پتانسیل اربیتالهای مختلف به روش BHS

جدول ۲. مقایسه ویژه مقادیر به دست آمده از روش BHS با پتانسیل واقعی (برحسب ریبرگ).

اربتال	انرژی حاصل از پتانسیل	انرژی حاصل از شبه پتانسیل
s	-۱/۰۴۲۱	-۱/۱۲۲۴
p	-۰/۴۵۳۶	-۰/۴۴۸۸
d	-۰/۸۳۱۷	-۰/۸۱۸۷

مقایسه شده‌اند. همان گونه که مشاهده می‌شود برای تمامی اربیتالها، مقادیر تا حد قابل قبولی به یکدیگر نزدیک می‌باشند. حال به ارائه نتایج حاصل از روش کرکر می‌پردازیم. در این روش نیز لازم است که کلیه مراحل تولید شبه پتانسیل را از محاسبه ویژه مقادیر انرژی و توابع موج الکترونها برای یک اتم منزوی گرفته تا برداشتن پوشش الکترونی از شبه پتانسیل و اعمال تبدیلات کلین-من-بایلندر انجام دهیم. بدیهی است که مقدار R_c و همچنین انتخاب پتانسیل موضعی $V^{loc}(r)$ در این روش نقش مهمی در ایجاد شرط پایستگی بار در درون مغزه و نیز میزان انطباق مشتق لگاریتمی ویژه تابع و شبه ویژه تابع دارد.

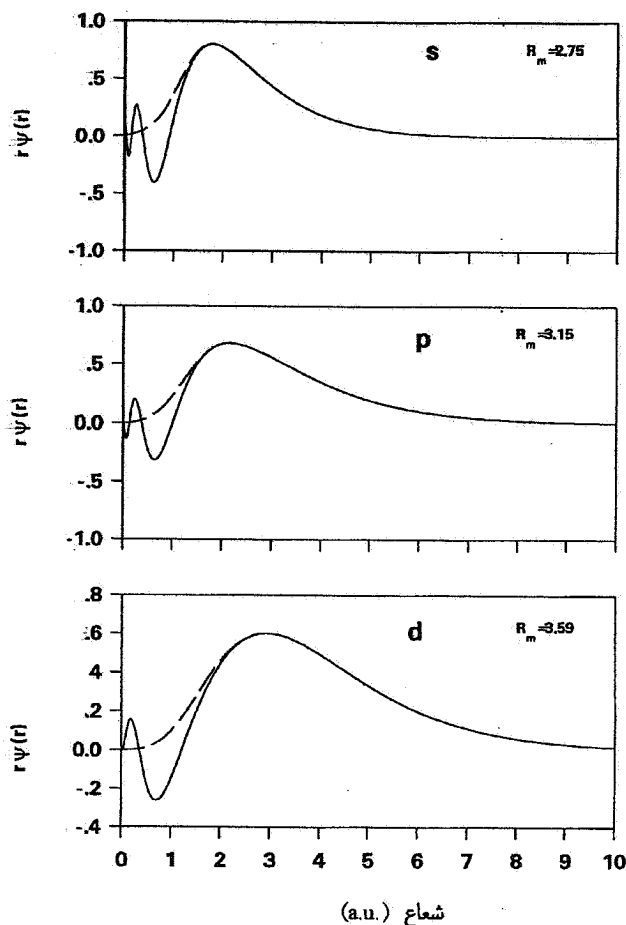
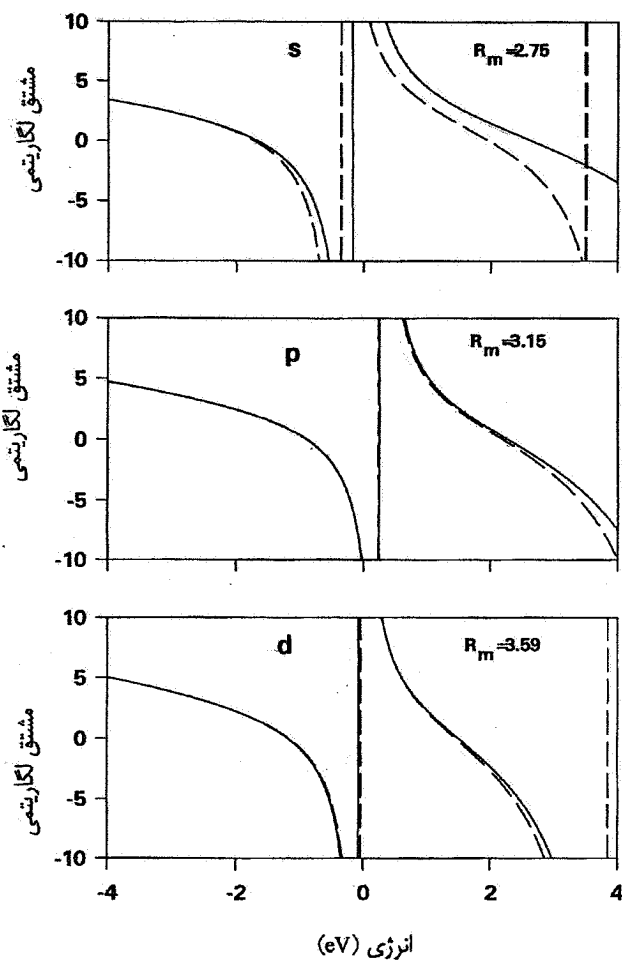


شکل ۱. انرژی یک یاخته بسیط برحسب انرژی قطع

جدول ۱. مقادیر R_c برای اربیتالهای s, p, d (برحسب a.u.) شعاعی است که در آن تابع موج و شبه تابع موج شروع به همگرایی می‌کنند.

s	p	d
۱/۱۰۲۲	۱/۲۶۰۹	۱/۴۳۶۳

شروع به همگرا شدن می‌کنند (R_c). در این محاسبه مقادیر R_c پیشنهادی در مرجع [۱۴] به کار گرفته شده‌اند که این مقادیر برای اربیتالهای s و p و d در جدول ۱ آورده شده‌اند. میزان انطباق دو منحنی در شکل ۴ در محدوده ویژه مقادیر انرژی الکترونها هر اربیتال معیاری از همسانی اختلاف فاز امواج پراکنده شده از پتانسیل و شبه پتانسیل و در نتیجه مشخص کننده میزان مرغوبیت شبه پتانسیل است. همان گونه که مشاهده می‌شود انطباق دو منحنی در محدوده انرژیهای منفی به ویژه در گستره ویژه مقادیر انرژی هر یک از اربیتالها خوب است. علاوه بر مشتق لگاریتمی، میزان انطباق ویژه مقادیر انرژی الکترونها رسانش ناشی از پتانسیل اصلی و شبه پتانسیل نیز آزمون دیگری از درجه مرغوبیت شبه پتانسیل است. لذا در جدول ۲ ویژه مقادیر انرژی حاصل از پتانسیل اصلی و شبه پتانسیل

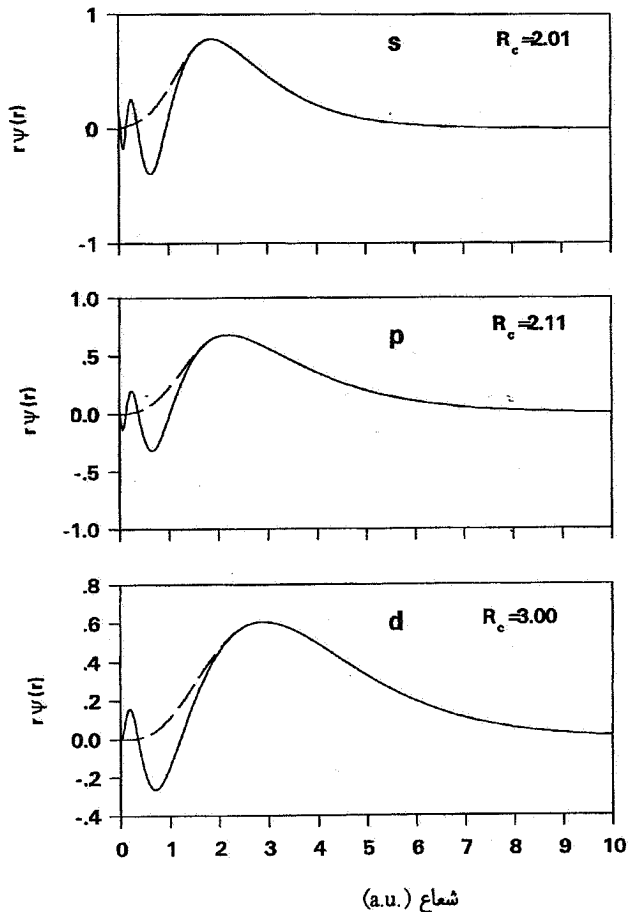


شکل ۳. مقایسه تابع موج واقعی (—) باشبه تابع موج (---) به روش BHS

شکل ۴. مقایسه مشتق لگاریتمی تابع موج (—) باشبه تابع موج (---) به روش BHS

شبه ویژه تابع روی یکدیگر قرار می گیرند بیشتر شده و تقریب شبه پتانسیل در ناحیه وسیعتری به کار گرفته می شود. برای تلوریم شعاعی که به ازاء آن کمترین انحراف در مشتق لگاریتمی حاصل می شود برای اربیتالهای s و p و d به ترتیب عبارتند از: ۲/۰۱ a.u.، ۲/۱۱ a.u. و ۳/۰۰ a.u. به علاوه به منظور اعمال تبدیلات کلین من- بایلتدر میانگین شبه پتانسیل اربیتالهای s و p و d به عنوان پتانسیل موضعی مورد استفاده قرار می گیرد. در جدول ۳ ویژه مقادیر انرژی مربوط به شبه پتانسیل و پتانسیل اصلی مقایسه می شوند. همان گونه که مشاهده می شود میزان انحراف در مقایسه با شبه پتانسیل قبلی BHS کمتر است.

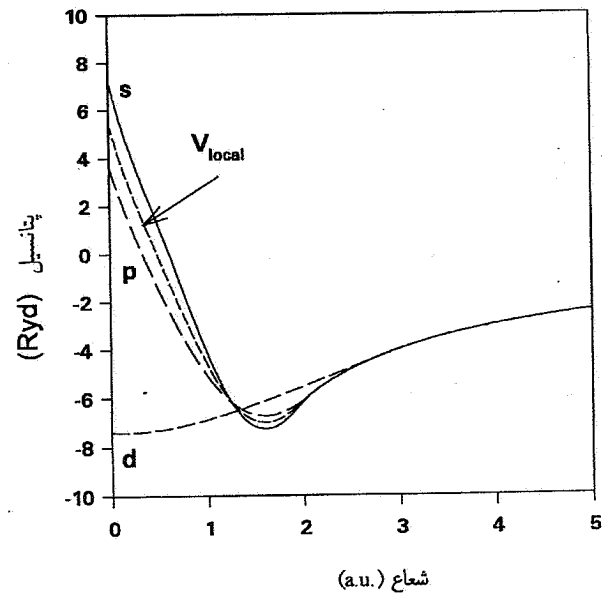
به علاوه توجه به این نکته ضروری است که شعاع مغزه (R_c) در این روش با شعاع R_c در روش BHS متفاوت است، چرا که در اینجا R_c شعاعی است که شبه ویژه تابع و ویژه تابع به طور دقیق بر یکدیگر منطبق می شوند، حال آنکه در روش BHS این شعاع را با R_m نمایش دادیم و R_c شعاعی در نظر گرفته شد که شبه ویژه تابع و ویژه تابع اصلی شروع به همگرا شدن می کنند. در اینجا در حوالی شعاع اولین بیشینه ویژه تابع برای هر یک از الکترونهای رسانش انتخاب می شود. هر چه شعاع مغزه از این مقدار کوچکتر باشد امکان برقراری شرط پایستگی بار به جهت کم شدن سطح زیر منحنی چگالی بار کمتر خواهد شد. و هر چه R_c بزرگتر انتخاب شود محدوده ای که در آن ویژه تابع و



شکل ۶- مقایسه تابع موج واقعی (—) با شبه تابع موج (---) به روش کرکر.

گستره با انرژی منفی نشان می‌دهد که این امر مبین انتقال پذیری قابل توجه شبه پتانسیل از اتم منزوی به بلور است. انطباق قابل قبول مشتق لگاریتمی در گستره‌ای که ویژه مقادیر انرژی اربیتال مربوطه را در بر دارد پیوسته بودن شبه ویژه تابع و مشتق اول آن را در R_c و نیز انطباق آنها را با ویژه تابع اصلی نشان می‌دهد. یکسان بودن شیب خط مماس بر هر یک از دو منحنی مشتق لگاریتمی در نقطه‌ای که مربوط به ویژه مقادیر انرژی اربیتال است برقراری خاصیت پایستگی را نشان می‌دهد.

در اشکال ۸، ۹ و ۱۰ نتایج حاصل از روش تنظیم Q_c نشان داده شده است. R_c در اینجا مشابه روش کرکر تعریف شده است و میانگین پتانسیلهای اربیتالهای s و p به عنوان پتانسیل



شکل ۵. شبه پتانسیل اربیتالهای مختلف به روش کرکر.

جدول ۳. مقایسه ویژه مقادیر به دست آمده از روش کرکر با پتانسیل واقعی (برحسب ریدبرگ).

اربیتال	انرژی حاصل از پتانسیل	انرژی حاصل از شبه پتانسیل
s	-۱/۰۴۲۱	-۱/۰۴۱۹
p	-۰/۴۵۳۶	-۰/۴۵۳۴
d	-۰/۸۳۱۷	-۰/۸۳۵۱

جدول ۴. مقایسه ویژه مقادیر به دست آمده از روش Q_c با پتانسیل واقعی (برحسب ریدبرگ).

اربیتال	انرژی حاصل از پتانسیل	انرژی حاصل از شبه پتانسیل
s	-۱/۰۴۲۱	-۱/۰۵۵۸
p	-۰/۴۵۳۶	-۰/۴۵۹۶
d	-۰/۸۳۱۷	-۰/۸۲۹۰

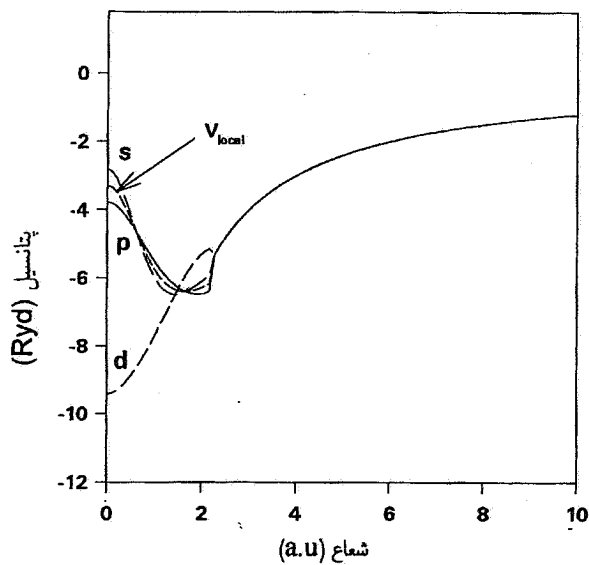
در اشکال ۵، ۶ و ۷ نتایج حاصل از روش کرکر رسم شده‌اند.

شکل ۷ انطباق خوب مشتق لگاریتمی را تقریباً در تمامی

جدول ۵. مقایسه کلی از نتایج ساختاری و الکترونی هر یک از شبه پتانسیلهای تولید شده با مقادیر تجربی.

مقادیر تجربی	تنظیم Q_c	کرکر	BHS	
—	۳۰۰	۴۰۰	۵۰۰	انرژی قطع (eV)
$a_{4/45}$	۴/۳۷	۴/۳۸	۴/۳۶	پارامتر شبکه a (Å)
$b_{5/93}$	۵/۸۰	۵/۸۳	۵/۸۰	پارامتر شبکه c (Å)
$a_{0/263}$	۰/۲۷۷	۰/۲۷۷	۰/۲۷۸	پارامتر ساختار داخلی u
$a_{19/40}$	۳۵/۸۷	۴۱/۱۷	۳۷/۳۲	مدول کپهای B (Gpa)
$a_{5/1}$	۸/۶	۴/۱۰	۶/۷۲	مشتق مدول کپهای B
$a_{33/89}$	۳۱/۹۶	۳۲/۴۴	۳۲/۲۵	حجم تعادلی V_0 (Å ³)
$b_{0/33}$	۰/۱۶	۰/۰۲	۰/۰۱	گاف انرژی E_g (eV)

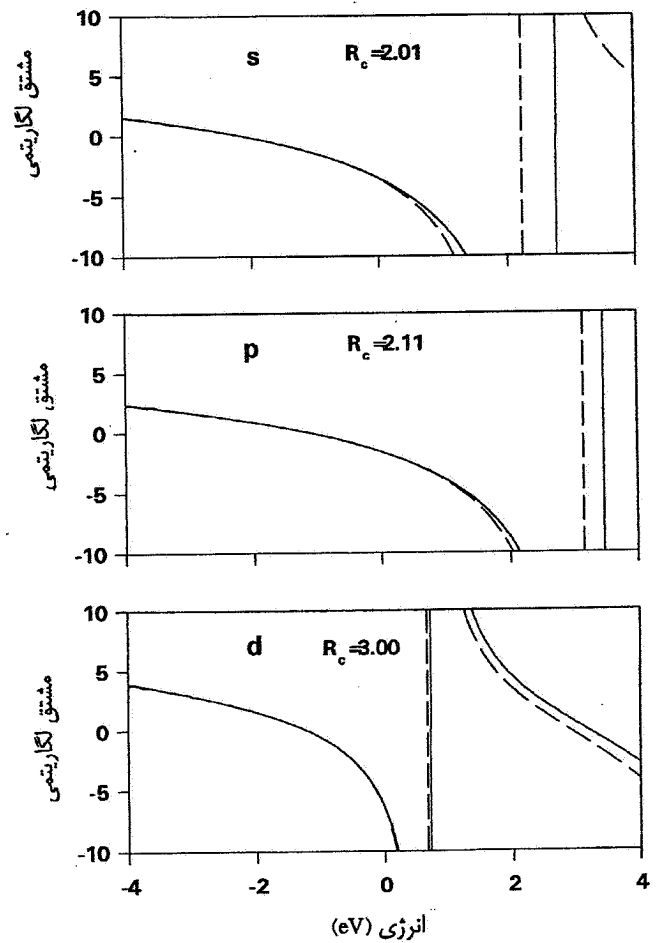
a مرجع [۱۵] b مرجع [۱۶]



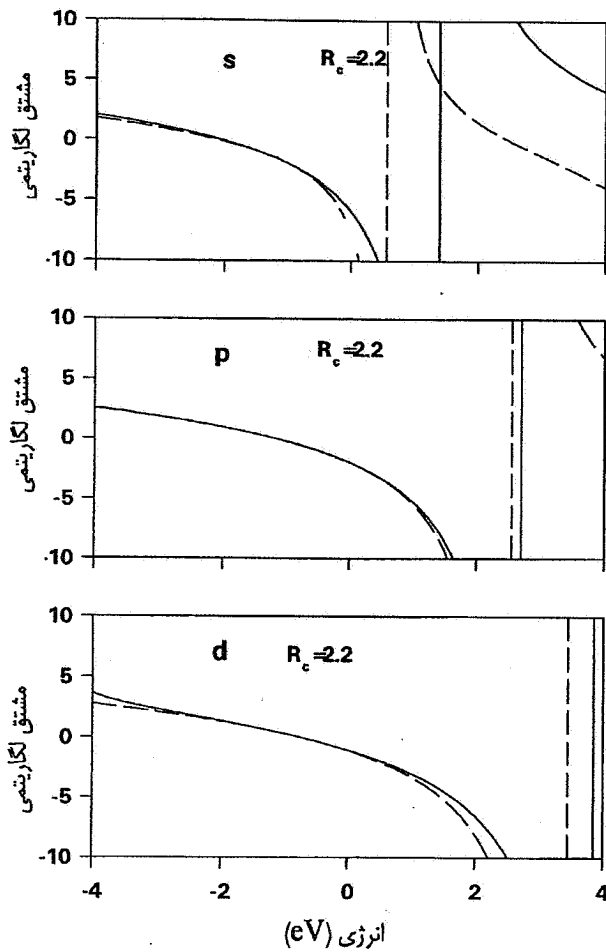
شکل ۸. شبه پتانسیل اربیتالهای مختلف به روش تنظیم Q_c .

موضعی در نظر گرفته شده است.

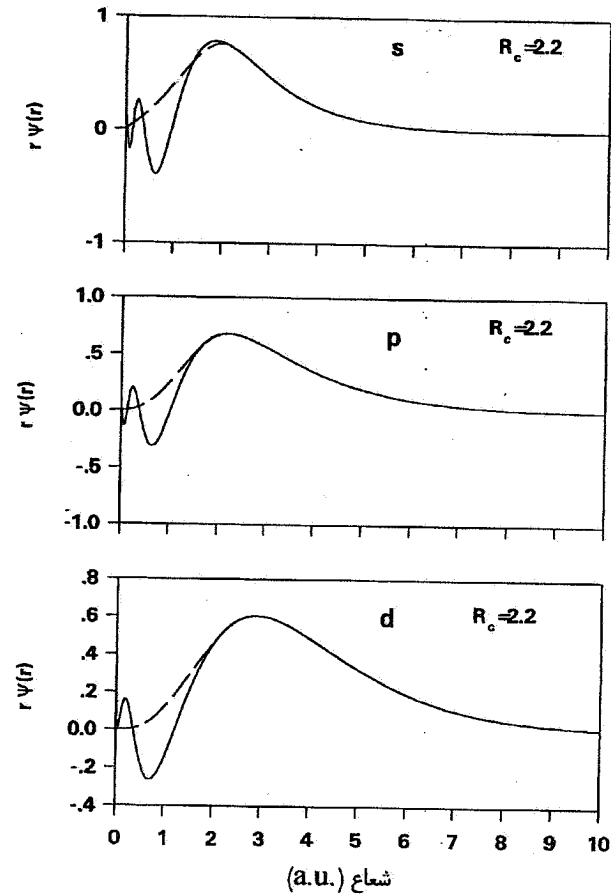
در پایان خواص ساختاری و الکترونی بلور تلوریم با سه شبه پتانسیل فوق الذکر محاسبه و در جدول ۵ با نتایج تجربی مقایسه شده‌اند. ملاحظه می‌شود که تقریباً تمامی کمیت‌هایی که با به کارگیری شبه پتانسیلهای تنظیم Q_c و نیز کرکر محاسبه شده‌اند بیش از نتایج حاصل از BHS با مقادیر تجربی توافق دارند. با توجه به اینکه انرژی قطع در تنظیم Q_c از بقیه شبه



شکل ۷. مقایسه مشتق لگاریتمی تابع موج (—) باشبه تابع موج (---) به روش کرکر.



شکل ۱۰. مقایسه مشتق لگاریتمی تابع موج (—) باشبه تابع موج (---) به روش تنظیم Q_c .



شکل ۹. مقایسه تابع موج واقعی (—) باشبه تابع موج (---) به روش تنظیم Q_c .

۴. قدردانی

اعتبارات این پژوهش از محل اعتبارات پژوهشی دانشگاه صنعتی اصفهان تامین شده است. ضمناً از خانم زهرا نوربخش به دلیل همکاری در انجام محاسبات تشکر می‌شود.

پتانسیلها کمتر است (شکل ۱)، بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که مرغوبیت شبه پتانسیل تنظیم Q_c در مجموع بیش از کرکر و آن نیز بیش از BHS است.

مراجع

1. J C Phillips, L Kleinman, *Phys. Rev.*, **116**, (1959) 287.
2. M L Cohen, Haine., *Solid State Physics*, Academic New York, **24** (1970).
3. M L Cohen, T K Bergstresser, *Phys. Rev.*, **141** (1966).
4. J A Appelbaum, D R Hamann, *Phys. Rev. B*, **8** (1973).
5. D R Hamann, M Schluter, C Chiang, *Phys. Rev. Lett.*, **20**, (1979) 1494.
6. G B Bachlet, D R Hamann, M Schluter, *Phys. Rev., B*, **26**, (1982) 4199.

13. L Klainman, D M Bylander, *Phys. Rev. Lett.*, **48**, (1982) 1425.
14. R Stumpf, X Gonze, M Schluter, Private Communication.
15. R Keller, W B Holzapfer, H Schulz, *Phys. Rev. B*, **16**, (1977) 4404.
16. V B Anzin, et. al., *Phys., Status Solidi (a)* **42**, (1977) 385.
7. G P Kerker, *J. Phys.*, C13, L189 (1980).
8. M A Rappe, K M Rabe, E Kaxiras, J D Joannopoulos, *Phys. Rev. B*41, (1990) 1227.
9. M H Lee, "A Thesis of the University of Cambridge" (1994).
10. J S Lin, A Qteish, M C Payne, V Heine, *Phys. Rev. B*, **47**, (1993) 4174.
11. V Milman, M H Lee, M C Pane, *Phys. Rev. B*, **49**, (1994) 16300.
12. V Milman, D E Jesson, et. al., *Phys. Rev., B*, **50**, (1994) 2663.