

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЗАРЯДА И ФОРМИРОВАНИЕ ГЛУБОКИХ УРОВНЕЙ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ ПО ДАННЫМ САМОСОГЛАСОВАННОГО МЕТОДА ФУНКЦИЙ ГРИНА: ДЕФЕКТЫ В КРЕМНИИ И ГЕРМАНИИ

Хакимов З. М., Пулатова Д. С., Адилов М. К., Махмудов А. Ш.,
Левин А. А., Юнусов М. С.

Описан самосогласованный вариант метода функций Грина, основанный на сочетании метода Слейтера—Костера и полуэмпирического метода эквивалентных орбиталей. Метод применен к исследованию электронной структуры вакансии, а также примесей In, S, Se, S^+ , Se^+ , S_2 и Se_2 в кремнии и германии. Рассмотрены заряды на атомах (с учетом перераспределения заряда в четырех координационных сферах вокруг дефекта) и их влияние на уровни в запрещенной зоне. Во всех случаях имеется тенденция к переносу отрицательного заряда в область, включающую сам дефект и ближайшие к нему атомы. Для одиночных примесей атом примеси заряжен положительно.

Введение. Одним из двух распространенных методов теоретического изучения электронной структуры кристаллов с глубокими центрами является метод функций Грина (ФГ), преимущество которого состоит в корректном учете «бесконечной» решетки. В настоящее время опубликовано много расчетов электронного строения глубоких центров в полупроводниках методом ФГ (см., например, обзоры [1, 2] и сборник статей [3]). Однако большая часть из них выполнена либо в несамосогласованном варианте метода ФГ и в них не обсуждается распределение заряда в кристалле при наличии дефекта, либо в самосогласованном варианте, но недостаточно корректно с учетом изменения заряда лишь на самом дефектном узле (атоме примеси [4]). Исключение составляют работы [5, 6], но использованные в них неэмпирические схемы сложны в реализации даже для простых точечных дефектных центров и, вероятно, по этой причине не получили достаточного применения к комплексам дефектов.

Эти недостатки устраняются по крайней мере частично в предложенном ранее [7] полуэмпирическом самосогласованном подходе в рамках метода ФГ, который является развитием несамосогласованной версии [8], примененной к большому числу простых и сложных дефектов [8-12]. Позже аналогичный подход был описан и применен в работах [13, 14], но лишь к дефектам в частично-ионных кристаллах и без анализа данных по полному распределению заряда в дефектном кристалле. (В [13, 14] рассмотрены только энергии и заселенности атомных орбиталей для состояний в запрещенной зоне). Кроме того, перераспределение заряда вычислялось в [13, 14] только для дефектного узла решетки и четырех его ближайших соседей, в то время как учет более далеких соседей может быть довольно существенным.

В данной работе основное внимание уделено анализу полного распределения заряда в кристалле вместе с его влиянием на (одноэлектронный) энергетический спектр. При этом вызванное дефектом перераспределение заряда рассмотрено в довольно большой области, включающей до четырех координационных сфер вокруг дефекта.

1. Метод расчета

Использованная процедура [7] близка к употребляемой в квантовой химии «самосогласования по заряду и конфигурации»; а самосогласование проводится по значениям электронных заселенностей валентных s - и p -атомных орбиталей (АО) атома примеси и атомов кристалла-матрицы путем пересчета соответствующих кулоновских интегралов. Для этого следует рассмотреть вместо распределений электронной плотности ρ_0 и ρ соответственно для идеального кристалла и для кристалла с дефектом матрицы заселенностей $P_{j\mathbf{R}, j'\mathbf{R}'}^{0(\mu, \nu)}$ и $P_{j\mathbf{R}, j'\mathbf{R}'}^{(\mu, \nu)}$. Они записываются в базе связывающих (+) и разрыхляющих (-) эквивалентных орбиталей (Θ) $\varphi_{j\mathbf{R}}^{(\mu)} = \varphi_j^{(\mu)}(r - \mathbf{R})$, где индекс $(\mu) = \langle + \rangle$ или $\langle - \rangle$, $j = 1, 2, 3, 4$ отвечает четырем трансляционно-эквивалентным семействам двухцентровых связей $B-A$, а векторный индекс \mathbf{R} указывает положение атома B , с которым ассоциируется данная связь [15]. Тогда для идеального кристалла имеем

$$P_{j\mathbf{R}, j'\mathbf{R}'}^{0(\mu, \nu)} = -\frac{2}{\pi} \int \text{Im } G_{j\mathbf{R}, j'\mathbf{R}'}^{0+(\mu, \nu)}(E) dE. \quad (1)$$

Здесь интегрирование производится по валентной зоне; $G^{0+} = G_{j\mathbf{R}, j'\mathbf{R}'}^{0+(\mu, \nu)}$ — матрица оператора Грина идеального кристалла: $G^{0+} = \lim_{\eta \rightarrow 0} (E - H^0 + i\eta)^{-1}$, где H^0 — матрица одноэлектронного гамильтониана идеального кристалла.

Аналогичное соотношение справедливо для кристалла с дефектом, однако в этом случае часть электронной плотности относится к локализованным состояниям дефекта вне разрешенных зон кристалла-матрицы. Тогда

$$P_{j\mathbf{R}, j'\mathbf{R}'}^{(\mu, \nu)} = -\frac{2}{\pi} \int \text{Im } G_{j\mathbf{R}, j'\mathbf{R}'}^{+(\mu, \nu)}(E) dE + \sum_n \frac{N_n}{K_n} C_{j\mathbf{R}}^{(\mu)}(n) C_{j'\mathbf{R}'}^{*(\nu)}(n), \quad (2)$$

G^+ — матрица оператора Грина кристалла с дефектом: $G^+ = \lim_{\eta \rightarrow 0} (E - H + i\eta)^{-1}$,

где H — матрица одноэлектронного гамильтониана кристалла с дефектом. Через N_n в (2) обозначена заселенность n -го локализованного состояния, которая (как и кратность локального уровня K_n) зависит от дефекта. Например, для локального уровня нейтральных примесей VI группы (серы, селена) в запрещенной зоне кремния $N_n = 2$, а для примесей III группы $N_n = 5$; это согласуется с результатом интегрирования по разрешенным зонам разности $\Delta \rho(E) = \rho(E) - \rho_0(E)$ плотностей состояний дефектного и идеального кристаллов, числа $C_{j\mathbf{R}}^{(\mu)}$ в (2) обозначают коэффициенты разложения волновых функций локализованных состояний по ЭО. При этом для каждого локализованного состояния в (2) следует различать два поднабора коэффициентов $C_{j\mathbf{R}}^{(\mu)}$: $C_{j\mathbf{R}}^{I(\mu)}$ с $\{j\mathbf{R}\} = 1, 2, \dots, N$ и $C_{j\mathbf{R}}^{II(\mu)}$ с $\{j\mathbf{R}\} = N + 1, N + 2, \dots$, где N — число ЭО, затронутых возмущением.

Первый из них представляет собой решение системы уравнений

$$\sum_{j'\mathbf{R}'} \left\{ \delta_{j\mathbf{R}, j'\mathbf{R}'}^{(\mu, \nu)} - \sum_{j''\mathbf{R}''} G_{j\mathbf{R}, j''\mathbf{R}''}^{0(\mu, \nu)}(E_n) V_{j''\mathbf{R}'', j'\mathbf{R}'}^{(\mu, \nu)} \right\} C_{j'\mathbf{R}'}^{I(\mu, \nu)} = 0, \quad (3)$$

где E_n — энергия n -го локализованного уровня, а коэффициенты при ЭО невозмущенной области $C_{j\mathbf{R}}^{II(\mu, \nu)}$ выражаются через коэффициенты при ЭО возмущенной области:

$$C_{j\mathbf{R}}^{II(\mu, \nu)}(n) = \sum_{j'\mathbf{R}'}^N [G_{j\mathbf{R}, j'\mathbf{R}'}^{0(\mu, \nu)}(E_n) V_{j'\mathbf{R}', j\mathbf{R}}^{(\mu, \nu)}] C_{j'\mathbf{R}'}^{I(\mu, \nu)}(n). \quad (4)$$

Результирующее изменение матрицы заселенностей будет

$$\Delta P_{j\mathbf{R}, j'\mathbf{R}'}^{(\mu, \nu)} = \frac{2}{\pi} \int [G_{j\mathbf{R}, j'\mathbf{R}'}^{0+(\mu, \nu)}(E) - G_{j\mathbf{R}, j'\mathbf{R}'}^{+(\mu, \nu)}(E)] dE + \sum_n \frac{N_n}{K_n} C_{j\mathbf{R}}^{(\mu)}(n) C_{j'\mathbf{R}'}^{*(\nu)}(n), \quad (5)$$

где $G^+ = (1 - G^{0+}V)G^{0+}$.

Чтобы найти изменение заселенностей АО, воспользуемся определением величины $\Delta\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) - \rho_0(\mathbf{r})$:

$$\Delta\rho(\mathbf{r}) = \sum_{j\mathbf{R}, j'\mathbf{R}', \mu\nu} \Delta P_{j\mathbf{R}, j'\mathbf{R}'}^{(\mu, \nu)} \varphi_j^{(\mu)}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \varphi_{j'}^{(\nu)}(\mathbf{r} - \mathbf{R}'), \quad (6)$$

где $\varphi_{j\mathbf{R}}^{(\mu)}$ — связывающие ($\varphi_{j\mathbf{R}}^{(+)}$) или разрыхляющие ($\varphi_{j\mathbf{R}}^{(-)}$) орбитали.

Тогда изменение эффективных зарядов на атомах ($\Delta Z = -\Delta P$) (в приближении нулевого дифференциального перекрывания) будет

$$\Delta P_{\mathbf{B}} = \frac{1}{1 + \lambda^2} \sum_{j=1}^4 (\Delta P_{j\mathbf{R}, j\mathbf{R}}^{++} + \lambda^2 \Delta P_{j\mathbf{R}, j\mathbf{R}}^{--} + 2\lambda \Delta P_{j\mathbf{R}, j\mathbf{R}}^{+-}) \quad (7)$$

для атома типа В, находящегося в $R_{\mathbf{B}}$ -м узле, и

$$\Delta P_{\mathbf{A}} = \frac{1}{1 + \lambda^2} \sum_{(j, \mathbf{R})=1}^4 (\lambda^2 \Delta P_{j\mathbf{R}, j\mathbf{R}}^{++} + \Delta P_{j\mathbf{R}, j\mathbf{R}}^{--} - 2\lambda \Delta P_{j\mathbf{R}, j\mathbf{R}}^{+-}) \quad (8)$$

для атома типа А.

Здесь λ — параметр ковалентности для идеальной решетки [15] (в случаях Si и Ge $\lambda = 1$). В обоих случаях суммирование производится по ЭО, отвечающим связям атома в узле решетки с его ближайшими соседями.

Для зависимости кулоновских интегралов α_s и α_p валентных АО от зарядового состояния используется интерполяционная формула

$$\alpha_i(Z) = \alpha_i(0) + [\alpha_i(+1) - \alpha_i(-1)] Z/2 + \{[\alpha_i(+1) + \alpha_i(-1)]/2 - \alpha_i(0)\} Z^2, \quad (9)$$

где $\alpha_i(0)$, $\alpha_i(+1)$ и $\alpha_i(-1)$ — значения атомных валентных s - и p -уровней ($i=s$ или p) в зарядовых состояниях с $Z=0, +1, -1$. В качестве последних использованы данные хартри-фоковских расчетов, приведенные для ряда атомов в [16].

Самосогласованный расчет проводится по очевидной схеме. Для исходного возмущения рассчитывается его матрица V , элементы которой определяются как разности соответствующих кулоновских и резонансных интегралов для кристалла с дефектом и идеального кристалла [8]. Далее, из уравнения $\det ||I - G^0 V|| = 0$ определяются энергии локальных уровней E_n , а затем коэффициенты $C_{j\mathbf{R}}^{(\mu)}$. Из (5) находится изменение матрицы заселенностей, после чего, согласно (7)–(9), рассчитываются заряды атомов и кулоновские интегралы α_s и α_p . Кулоновские интегралы каждого атома корректируются с учетом маделунговского потенциала, создаваемого эффективными зарядами (они предполагаются точечными) других атомов.

Маделунговский потенциал, действующий на электрон i -го атома дефектного кристалла, имеет вид

$$V_i^{(a)} = \pm \frac{MZ_0}{R_0} + \sum_{j \neq i} \frac{Z_j - Z_j^0}{R_{ij}}. \quad (10)$$

Здесь M — постоянная Маделунга, Z_0 — абсолютное значение эффективных зарядов Z_j^0 атомов идеального кристалла $A^N B^{8-N}$: $Z^0 = |Z_j^0| = \frac{N - (8 - N)\lambda^2}{1 + \lambda^2}$ [15], Z_j — заряды атомов кристалла с дефектом, R_0 — кратчайшее межатомное расстояние. Суммирование производится по области кристалла вблизи дефекта (см. далее). В случае чисто ковалентного кристалла (Si и Ge) все $Z_j^0 = 0$. Новые значения кулоновских интегралов используются для расчета новой матрицы потенциала возмущения. Вся процедура повторяется до достижения самосогласования по зарядам на атомах.

Отметим, что в данной схеме в отличие от существующих учитываются изменения зарядов также на атомах нескольких (по крайней мере двух) координационных сфер вне возмущенной области кристалла. Заряды на этих атомах подбираются так, чтобы энергии их валентных АО с учетом маделунговского

потенциала всех атомов возмущенной области практически не отличались от таковых в идеальном кристалле (что, собственно, и позволяет говорить о локализованном возмущении постоянного радиуса). Такой подход позволяет стабилизировать происходящий в процессе самосогласования осциллирующий обмен зарядом между областями и улучшить сходимость самосогласованных расчетов.

В описанной выше самосогласованной версии используются расчеты зонной структуры и ФГ идеальной решетки методом, подробно описанным в [17, 18] с учетом взаимодействия атомов вплоть до третьих соседей. Это обеспечивает хорошее воспроизведение структуры полос и плотностей состояний, полученных в эксперименте или в строгих (скажем, псевдопотенциальных) расчетах. Вместе с тем параметризация метода с использованием атомных (хартри-фоковских) данных для собственных и примесных атомов позволяет рассчитывать на адекватное воспроизведение «химических» тенденций в электронной структуре.

2. Результаты расчетов

В случае одиночных дефектов область возмущения включала в себя дефектный узел, а также атомы кристалла-матрицы из его первой и второй координационных сфер. Для оставшейся части кристалла учитывалось изменение заряда для атомов еще двух, примыкающих к дефектной области координационных сфер (всего рассматривался 41 атом). В случае двойных примесей указанные области включали в себя 56 атомов. Результаты расчетов локальных уровней и перераспределения заряда по атомам матрицы и примеси вместе с распределением заряда в идеальной решетке представлены в таблице и на рис. 1—4. (Распределение ρ вычислялось с использованием слейтеровских АО, через E_{σ}^* в таблице обозначены энергии сверхглубоких уровней по отношению к дну валентной зоны).

Результаты самосогласованных расчетов некоторых дефектов в кремнии и германии

Тип дефекта	Уровни	Симметрия	Вклад примеси в волновую функцию локального состояния, %	Распределение заряда (в долях электрона) на индивидуальных атомах				
				заряд на примеси	I сфера	II сфера	III сфера	IV сфера
Si : S	$E_{\sigma}^* - 4.792$	A_1	91	0.011	-0.0198	-0.0092	0.0109	0.0006
	$E_{\sigma}^* - 0.461$	A_1	4.8					
Si : S ⁺	$E_{\sigma}^* - 7.45$	A_1	89.4	-0.137	0.149	-0.041	0.0026	-0.0002
	$E_{\sigma}^* - 0.81$	A_1						
Si : Se	$E_{\sigma}^* - 3.553$	A_1	5.8	0.2347	-0.1463	0.0199	0.0090	0.0016
	$E_{\sigma}^* - 0.591$	A_1						
Si : S ₂	$E_{\sigma}^* - 3.56$	A_1	92	-0.2983	0.0804	0.0109	0.0	0.0027
	$E_{\sigma}^* - 0.36$	A_1	72					
Si : Se ₂	$E_{\sigma}^* - 0.33$	A_1	41	-0.2403	0.0546	0.0140	0.0	0.0
	$E_{\sigma}^* - 2.90$	A_1	91					
Si : V	$E_{\sigma}^* - 0.136$	A_1	73	-0.2403	0.0546	0.0140	0.0	0.0
	$E_{\sigma}^* - 0.28$	E						
Si : In	$E_{\sigma}^* + 0.095$	T_2		1.7137	-0.6676	0.0831	-0.0002	0.0
Ge : S	$E_{\sigma}^* - 4.152$	A_1	91.7	0.1177	-0.137	0.0378	-0.0020	0.0003
	$E_{\sigma}^* - 0.25$	A_1	5.7					
Ge : S ⁺	$E_{\sigma}^* - 4.97$	A_1	90	-0.008	0.025	0.021	-0.0303	-0.0014
	$E_{\sigma}^* - 0.52$	A_1						
Ge : Se	$E_{\sigma}^* - 3.332$	A_1		0.2808	-0.1714	0.0225	0.0111	0.0016
	$E_{\sigma}^* - 0.189$	A_1						
Ge : Se ⁺	$E_{\sigma}^* - 4.35$	A_1		0.044	0.079	-0.033	0.0003	0.0027
	$E_{\sigma}^* - 0.59$	A_1						
Ge : V	$E_{\sigma}^* + 0.343$	T_2		1.5899	-0.6214	0.0797	-0.0011	-0.0014
Ge : In	—	—						

Как видно, удаление атома кристалла-матрицы из узельного положения (образование вакансии) приводит к заметной деформации электронной плотности кристалла (ср. рис. 1 и 2), хотя изменение индивидуальных зарядов атомов, соседних с вакантным узлом, сравнительно невелико.

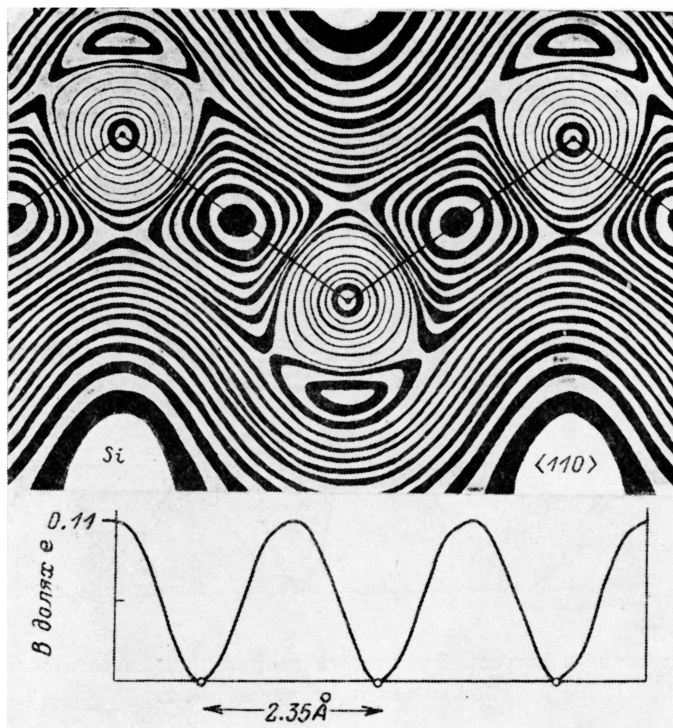


Рис. 1. Распределение электронной плотности (ρ) в идеальном кристалле кремния. Вверху изображены изолинии ρ , внизу — профиль вдоль линии, соединяющей центр с центрами атомов первой и второй координационных сфер.

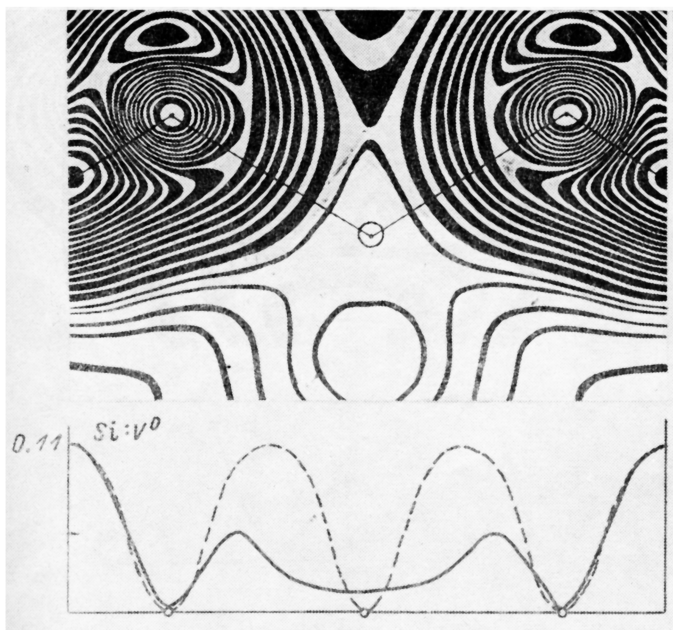


Рис. 2. Распределение электронной плотности вокруг вакансии в кремнии. Внизу штриховыми линиями показано распределение в идеальной решетке.

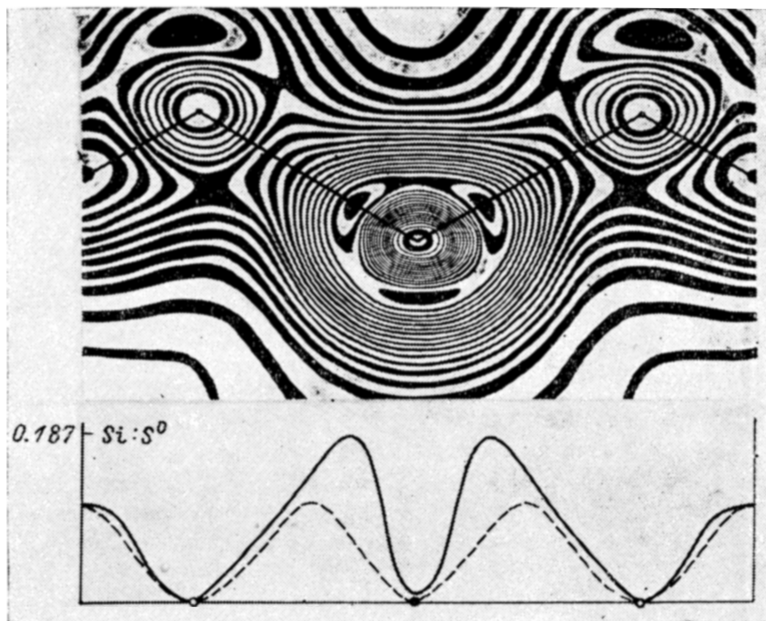


Рис. 3. Распределение электронной плотности вокруг примесного атома серы в кремнии.
 Обозначения те же, что на рис. 2.

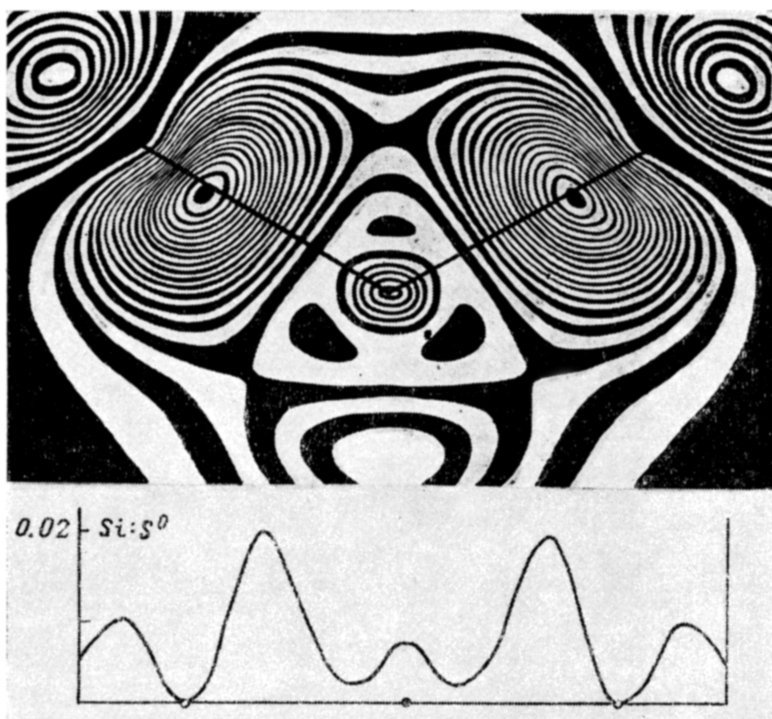


Рис. 4. Распределение электронной плотности, отвечающее локализованному A_1 -состоянию в запрещенной зоне для примеси серы в кремнии.

Самосогласованные расчеты примесей In, S, Se, S₂ и Se₂ показывают, что одноатомные примеси заряжены положительно; при этом величина заряда в ряду In—Se—S коррелирует с электроотрицательностью элемента. Двойные комплексы заряжены отрицательно. В целом, однако, наблюдается общая для всех рассмотренных дефектов тенденция к переносу отрицательного заряда в область, включающую в себя дефектный центр и окружающие его атомы — первые ближайшие соседи в решетке. Отметим, что суммарный заряд на атомах более далеких координационных сфер при этом может быть довольно велик. Так, в случае Ge : S заряд на второй координационной сфере дефекта равен ~0.5 и (по абсолютной величине) несущественно отличается от заряда на первой координационной сфере. Еще заметнее это проявляется в случае частично ионных кристаллов, для которых результаты будут опубликованы отдельно.

Расчеты Si : S, Si : Se, Ge : S и Ge : Se указывают на наличие для обеих примесей глубокого уровня A₁ в запрещенной зоне кристалла-матрицы. Эти уровни расположены на ~0.2 эВ ближе к дну зоны проводимости, чем в несамосогласованном расчете [8, 9], хотя, на первый взгляд, приобретенный примесью положительный заряд должен привести к углублению «самосогласованного» уровня в запрещенной зоне по сравнению с «несамосогласованным» уровнем. Полученный результат можно объяснить, по-видимому, незначительным вкладом атомов примеси в волновую функцию локализованного состояния. Согласно расчету, вклад примеси составляет около 5 %, а вклады первых ближайших соседей ~90 %. Поэтому неудивительно, что поведение уровней в запрещенной зоне определяется ближайшими соседями примеси и приобретенный ими отрицательный заряд приводит к сдвигу уровня в сторону зоны проводимости (см. также рис. 4, где приведено рассчитанное распределение электронной плотности для уровня A₁-симметрии S в Si). В то же время положение сверхглубоких (A₁) уровней, основной вклад в волновую функцию которых вносят примеси, определяется зарядом на примеси.

Однократно (положительно) заряженные примеси S⁺ и Se⁺ также порождают глубокие и сверхглубокие уровни вне разрешенных зон кристалла-матрицы, расположенные глубже уровней тех же примесей в нейтральном состоянии.

В случае двойных комплексов указанных примесей расчет дает для каждого из них по два сверхглубоких уровня и по одному уровню в запрещенной зоне Si. При этом переход от одиночных примесей к их двойным комплексам приводит к сближению локальных уровней с краем зоны проводимости для уровней в запрещенной зоне и с дном валентной зоны для сверхглубоких уровней, что хорошо согласуется с результатами недавних экспериментов [19]. В отличие от одиночных примесей в этом случае вклады атомов примеси и матрицы в волновую функцию локализованного состояния в запрещенной зоне почти одинаковы.

Полученные в расчете энергии уровней примеси S, S⁺, Se, Se⁺ в Ge хорошо согласуются с экспериментальными данными [20, 21]: E_c—0.28, E_v—0.58 эВ для Ge : S и E_c—0.268, E_v—0.512 эВ для Ge : Se. Это позволяет интерпретировать первый из каждой пары уровней как отвечающий нейтральной, а второй — однократно положительно заряженной примеси. То же самое справедливо для Si : S и Si : Se, хотя в этом случае согласие с экспериментом несколько хуже [20, 21]. Однако для Ge : A и Si : A (A=S, Se) одинаково хорошо передается экспериментальная разность первых и вторых потенциалов ионизации центров. Заметим, что последнее свойство хорошо воспроизводится также в полумпирическом расчете [9], однако по сравнению с экспериментом он дает для Si : S и Si : Se мелкие уровни.

В наших расчетах для Si : In и Ge : In не получены локальные уровни в запрещенной зоне, а результат для Si : V заметно отличается от опыта [22, 23]. Это прежде всего обусловлено тем, что в расчетах не были учтены искажения решетки (ИР), которые играют не последнюю роль в указанных случаях. В связи с этим отметим, что развитый метод, равно как и все другие, основанные на подходе Слейтера—Костера [1-3], применим для узелных дефектов без или с малыми ИР, в остальных случаях они должны быть модифицированы. Одной из таких модификаций является предложенный нами расширенный метод де-

фектной молекулы [²⁴, ²⁵], результаты применения которого с учетом ИР для указанных и других точечных дефектов будут приведены позже.

Список литературы

- [1] Pantelides S. T. // *Rev. Mod. Phys.* 1978. V. 50. N 4. P. 797—858.
- [2] Тележкин В. А., Толпыго К. Б. // *ФТП.* 1982. Т. 16. В. 8. С. 1337—1364.
- [3] Элементарные атомные процессы и электронная структура дефектов в полупроводниках / Под ред. П. К. Хабибуллаева. Ташкент, 1986. 172 с.
- [4] Lee S., Dow J. D., Sankey O. F. // *Phys. Rev. B.* 1984. V. 31. N 6. P. 3910—3914.
- [5] Bernholc J., Lipari N. O., Pantelides S. T. // *Phys. Rev. Lett.* 1978. V. 41. N 13. P. 895—899.
- [6] Baraff G. A., Schlüter M. // *Phys. Rev. Lett.* 1978. V. 41. N 13. P. 892—895.
- [7] Хакимов З. М., Пулатова Д. С., Адилев М. К., Махмудов А. Ш., Левин А. А. // *Тез. докл. Всес. конф. по радиационной физике полупроводников и родственных материалов.* Ташкент, 1984. С. 205.
- [8] Махмудов А. Ш., Хакимов З. М., Левин А. А., Юнусов М. С. // *ФТТ.* 1984. Т. 26. В. 7. С. 2159—2164.
- [9] Makhmudov A. Sh., Khakimov Z. M., Levin A. A., Yunusov M. S. // *Phys. St. Sol. (b).* 1984. V. 126. P. 311—321.
- [10] Pulatova D. S., Khakimov Z. M., Makhmudov A. Sh., Levin A. A. // *Cryst. Latt. Def. Amorph. Mazh.* 1987. V. 13. N 3-4. P. 279—287.
- [11] Махмудов А. Ш., Адилев М. К., Хакимов З. М., Левин А. А. // *ФТП.* 1985. Т. 19. В. 11. С. 2077—2080.
- [12] Махмудов А. Ш. и др. // *ФТП.* 1985. Т. 19. В. 11. С. 1949—1953.
- [13] Strehlow R., Kühn W., Hanke M. // *Phys. St. Sol. (b).* 1986. V. 134. N 1. P. 257—265.
- [14] Kühn W., Strehlow R., Hanke M. // *Phys. St. Sol. (b).* 1987. V. 141. N 2. P. 541—557.
- [15] Левин А. А. Введение в квантовую химию твердого тела. М., 1974. 240 с.
- [16] Lowther J. E. // *Phys. Rev. B.* 1977. V. 15. N 8. P. 3928—3934.
- [17] Пулатова Д. С., Хакимов З. М., Махмудов А. Ш., Юнусов М. С. // *ЖСХ.* 1984. Т. 25. В. 2. С. 14—18.
- [18] Хакимов З. М. // Автореф. канд. дис. Ташкент, 1985.
- [19] Grimmeis H. G., Janzen E., Larsson K. // *Phys. Rev. B.* 1982. V. 25. N 4. P. 2627—2632.
- [20] Janzen E., Stedman R., Grossman G., Grimmeis H. G. // *Phys. Rev. B.* 1984. V. 29. N 4. P. 1907—1918.
- [21] Grimmeis H. G., Montelies L., Larsson K. // *Phys. Rev. B.* 1987. V. 37. N 12. P. 6916—6928.
- [22] Емцев В. В., Маргарян М. А., Машовец Т. В. // *ФТП.* 1984. Т. 18. В. 8. С. 1505—1508.
- [23] G. Watkins // *Physica.* 1983. V. 117B-118B. P. 9—15.
- [24] Хакимов З. М., Пулатова Д. С., Адилев М. К., Махмудов А. Ш. // *Моделирование и ЭВМ структурночувствительных свойств кристаллических материалов.* Л., 1986. С. 65—66.
- [25] Хакимов З. М., Махмудов А. Ш., Левин А. А. // *ДАН СССР.* 1986. Т. 290. В. 1. С. 157—161.

Институт ядерной физики АН УзССР
Ташкент

Получена 20.02.1989
Принята к печати 10.07.1989