

- [7] Sze S. M., Growell C. R., Kahing D. — J. Appl. Phys., 1964, v. 35, N 8, p. 2534—2536.  
 [8] Philip R. — J. Phys. Rad., 1959, v. 20, N 5, p. 535—540.  
 [9] Shichijo H., Hess K. — Phys. Rev., 1981, v. B23, N 8, p. 4197—4207.

Физико-технический институт  
 им. А. Ф. Иоффе АН СССР  
 Ленинград

Получено 27.01.1987  
 Принято к печати 20.07.1987

ФТП, том 22, вып. 1, 1988

## ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ ОДИНОЧНЫХ ВАКАНСИЙ В ZnSe И CdTe

Баженов В. К., Кардашев Д. Л., Нахабин А. В.

Свойства одиночных вакансий в полупроводниках определяются электронными состояниями оборванных связей [1]. Связанные и резонансные электронные состояния одиночных вакансий в полупроводниках  $A^{II}B^V$  уже вычислялись методом функций Грина в модели удаленных орбиталей [2]. Эта модель здесь впервые использована для расчета энергий электронных состояний катионных и анионных вакансий в кубических полупроводниках  $A^{II}B^V$  — ZnSe и CdTe.

Используем полную ортонормированную систему локализованных орбиталей  $|mk\rangle$ , где  $m=s, p, \dots$  указывает тип симметрии орбитали, а  $k$  нумерует все атомы идеального кристалла [3]. Матричные элементы  $G_{mm'}^{kk'}(\epsilon)$  гриновского оператора кристалла с одиночной вакансией удовлетворяют системе уравнений Дайсона

$$G_{mm'}^{kk'}(\epsilon) = g_{mm'}^{kk'}(\epsilon) + \sum_{m'', k'', m'''} g_{mm''}^{kk''}(\epsilon) U_{m''m'''}^{k''k'''} G_{m''m'''}^{k''k'''}(\epsilon), \quad (1)$$

где  $g_{mm'}^{kk'}(\epsilon)$  — матричные элементы гриновского оператора идеального полупроводника,  $U_{mm'}^{kk'}$  — матричные элементы потенциала одиночной вакансии,  $\epsilon = E + 0^+$ , а  $E$  — энергия электрона. Пусть вакансия в кристалле образуется удалением атома  $k=r$ . Тогда матрица потенциала одиночной вакансии может быть составлена из элементов

$$U_{mm'}^{kk'} = \delta_{kr} (\delta_{k'r} - 1) h_{mm'}^{rk'} + (\delta_{kr} - 1) \delta_{k'r} h_{mm'}^{kr} + W_{mm'}^{kk'}, \quad (2)$$

где  $h_{mm'}^{kk'}$  — матричные элементы одноэлектронного гамильтониана идеального полупроводника. Модель удаленных орбиталей для электронных состояний одиночной вакансии получается, если в (2) пренебречь влиянием составляющей  $W_{mm'}^{kk'}$ .

Используя (2), можно (1) переписать в виде

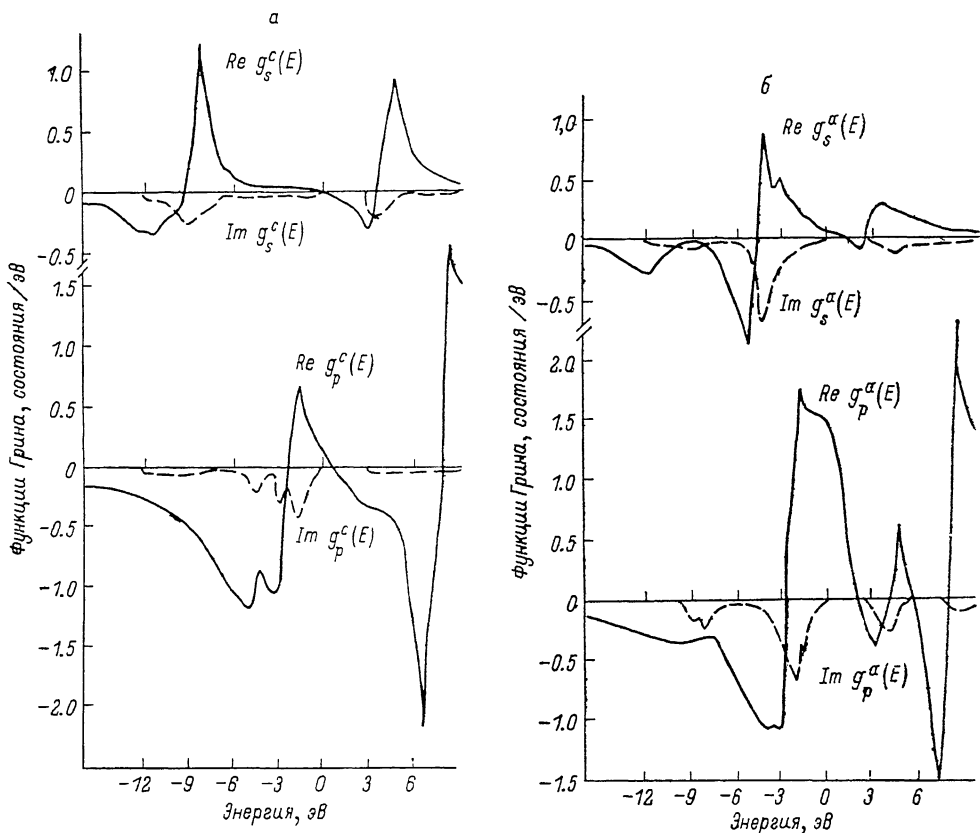
$$G_{mm'}^{kk'}(\epsilon) = \tilde{G}_{mm'}^{kk'}(\epsilon) + \sum_{m'', k'', m'''} \tilde{G}_{mm''}^{kk''}(\epsilon) W_{m''m'''}^{k''k'''} G_{m''m'''}^{k''k'''}(\epsilon), \quad (3)$$

где  $\tilde{G}_{mm'}^{kk'}(\epsilon)$  — матричные элементы гриновского оператора кристалла с одиночной вакансией в модели удаленных орбиталей:

$$\tilde{G}_{mm'}^{kk'}(\epsilon) = g_{mm'}^{kk'}(\epsilon) + \delta_{mm'} \frac{\delta_{kr} \delta_{k'r}}{\epsilon - \epsilon_m^r} - \sum_{m''} \frac{g_{mm''}^{kr}(\epsilon) g_{m''m'}^{k'r}(\epsilon)}{g_{m''}^r(\epsilon)}. \quad (4)$$

Здесь  $g_{mm''}^{kr}(\epsilon) = g_m^r(\epsilon) \delta_{mm''}$ . Мы видим, что в модели удаленных орбиталей спектр связанных и резонансных электронных состояний оборванных связей одиночной вакансии в кристалле определяется нулями функции  $\text{Re } g_{mm'}^r(E)$ , которая легко вычисляется по заданным матричным элементам  $h_{mm'}^{kr}$  [2]. Уровни с энергиями  $h_{mm'}^{kr} = \epsilon_m^r \delta_{mm'}$  принадлежат орбиталям удаленного атома.

Мы использовали восьмизонный эмпирический гамильтониан сильной связи для полупроводников ZnSe и CdTe, в котором учтены все одно-, двух- и трех-центровые взаимодействия между первыми и вторыми соседями [4]. 23 независимых параметра  $h_{nm}^{kr}$  этого гамильтониана определялись с помощью подгонки под зонные диаграммы работы [5]. Функции  $\text{Im } g_m^r(E)$  сперва вычислялись



Локальные функции Грина  $g_m^{c,a}(E)$  для  $s$ - и  $p$ -электронов для катионного (а) и анионного (б) узлов в ZnSe.

Отсчет энергии проводится от уровня  $\Gamma_{15}^v$  валентной зоны.

с помощью случайной выборки точек из неприводимой части зоны Бриллюэна, а затем использовалось преобразование Гильберта для вычисления функций  $\text{Re } g_m^r(E)$  [2]. Эти функции для ZnSe приводятся на рисунке для катионного ( $r=c$ ) и анионного узлов ( $r=a$ ), где отсчет энергии проводится от уровня  $\Gamma_{15}^v$  валентной зоны. Нули функции  $\text{Re } g_m^r(E)$  дают энергии связанных и резонансных электронных состояний одиночной вакансии в полупроводнике. Эти энергии приводятся в таблице для состояний с симметриями  $a_1$  и  $t_2$  вместе с теоре-

Энергии связанных и резонансных состояний одиночных катионных и анионных вакансий в ZnSe и CdTe (в эВ)

Соединение	$E_g$	$V$	$a_1$	$t_2$	
ZnSe	2.83	{	VZn	-9.05, -0.30, 3.90	-2.20, 0.90, 8.30
			VSe	-4.60, 1.20, 2.85	-2.60, 2.10, 8.30
CdTe	1.60	{	VCd	-9.05, -0.20, 3.35	-1.35, 1.05, 6.40
			VTc	-5.10, 1.35, 3.00	-1.50, 1.50, 6.40

тическими значениями ширины запрещенных зон  $E_g$  полупроводников ZnSe и CdTe. Связанные электронные состояния с симметрией  $a_1$  в ZnSe и CdTe дают только анионные вакансии, но с симметрией  $t_2$  — как анионные, так и катионные вакансии.

Приведенное в таблице значение энергии резонансного  $a_1$ -состояния катионной вакансии в CdTe согласуется с данными работы [6] для неискаженной нейтральной вакансии. Такая идеальная вакансия описывается моделью удаления на электронные уровни вакансий в полупроводнике удобно изучать с помощью (3), используя в качестве эффективной среды полупроводник с идеальной вакансией.

### Л и т е р а т у р а

- [1] Тележкин В. А., Толпыго К. Б. Теория электронной структуры радиационных дефектов в полупроводниках. — ФТП, 1982, т. 16, в. 6, с. 1337—1364.
- [2] Баженов В. К., Гардашев Д. Л., Нахабин А. В. Электронные уровни нейтральных вакансий в  $A_3B_5V$  полупроводниках. — ФТП, 1986, т. 20, в. 1, с. 113—117.
- [3] Смирнов В. П., Эварестов Р. А. Локализованные орбитали в кристаллах и зонные представления пространственных групп. — ФТТ, 1983, т. 25, в. 11, с. 3261—3267.
- [4] Нахабин А. В. Локализованные орбитали в кристаллах с ковалентными связями. — Автореф. канд. дис. Одесса, 1984.
- [5] Chelikowsky J. R., Cohen M. L. — Phys. Rev. B, 1976, v. 14, N 2, p. 556—582.
- [6] Chen A. B., Sher A. — Phys. Rev. B, 1985, v. 31, N 10, p. 6490—6497.

Одесский институт инженеров  
морского флота

Получено 25.11.1986  
Принято к печати 21.07.1987

### ПЕРВОЕ ИНФОРМАЦИОННОЕ СООБЩЕНИЕ

#### XI ВСЕСОЮЗНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ФИЗИКЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Кишинев, октябрь, 1988 г.

Научный совет по проблеме «Физика и химия полупроводников» АН СССР, Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе АН СССР, Институт прикладной физики АН МССР и Министерство высшего и среднего специального образования МССР проводят в октябре 1988 г. в г. Кишиневе XI Всесоюзную конференцию по физике полупроводников.

Эта конференция является основной в нашей стране конференцией по физике полупроводников, регулярно проводимой один раз в три года. Организатором и основоположником первых конференций этого рода был академик А. Ф. Иоффе.

В программу XI конференции предполагается включение 25—30 приглашенных докладов по наиболее актуальным проблемам физики полупроводников, 80—100 оригинальных сообщений для зачитания и 150—180 стендовых докладов. Особое внимание будет обращено на следующие направления:

- 1) физические явления в гетероструктурах и сверхрешетках;
- 2) физические процессы в структурах с пониженной размерностью;
- 3) электронные и атомные процессы на границах раздела;
- 4) влияние разупорядоченности на электронные процессы в полупроводниках;
- 5) электронные явления в сильных электрических и магнитных полях;
- 6) физические явления в магнитных и полумагнитных полупроводниках;
- 7) фемто- и пикосекундная спектроскопия полупроводников;
- 8) современная диагностика полупроводниковых структур.

Направления, по которым проводятся в 1988 г. специализированные конференции, будут представлены только докладами по приглашению.

В программу данной конференции будут включаться оригинальные сообщения, которые содержат не опубликованные и не докладывавшиеся ранее результаты.

Срок представления тезисов докладов до 15 мая 1988 г.

Правила оформления и другие подробности будут указаны во втором информационном сообщении.

Оргкомитет  
Программный комитет