

**САМОСОГЛАСОВАННЫЙ РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ  
АНТИСТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ  $S_{nS}$  И  $S_{Sn}$  В  $SnS$   
МЕТОДОМ ФУНКЦИИ ГРИНА**

**З.А.ДЖАХАНГИРЛИ\*, Г.С.ОРУДЖЕВ\*, Т.О.БАЙРАМОВА\*\***

*\*Институт Физики АНАН*

*\*\*Бакинский Государственный Университет*

*Sahazakir@yahoo.com*

*Выполнены теоретические исследования электронной структуры антиструктурных дефектов  $S_{nS}$  и  $S_{Sn}$  методом функции Грина в базисе локализованных орбиталей Слетеровского типа. Обсуждены электронные состояния в запрещенной зоне, резонансы и изменение плотности состояний в кристалле с дефектом.*

Хорошо известно, что различные дефекты решетки меняют электронный спектр кристаллов. Наличие примесей весьма радикально меняют также и колебательный спектр кристаллов. Примеси даже в незначительной концентрации могут привести к возникновению локальных и резонансных состояний, которых нет в идеальном кристалле. Локальные и резонансные состояния всегда сказываются на структуре оптических спектров в полупроводниках [1-5]. Поскольку реальные кристаллы практически всегда содержат дефекты, при анализе и интерпретации экспериментальных данных учет влияния дефектов становится совершенно необходимым и существенным.

В настоящей работе методом функции Грина [6-8] с использованием линейных комбинаций атомных орбиталей (ЛКАО) самосогласованным образом исследованы глубокие дефектные уровни  $S_{nS}$  и  $S_{Sn}$  в полупроводниковом соединении  $SnS$  типа  $A^4B^6$ . Особенность этого метода состоит в трактовке дефекта как возмущение бесконечной периодической решетки кристалла.

Обозначим через  $H^0$  гамильтониан идеального кристалла, а через  $H = H^0 + U$  гамильтониан возмущенного кристалла, где  $U$  - потенциал дефекта. Приходим к уравнению Шредингера,

$$(H^0 + U) | \Psi \rangle = E | \Psi \rangle \quad (1)$$

Формальное решение уравнения (15) приводит к уравнению Липпмана-Швингера

$$| \Psi \rangle = | \Psi_0 \rangle + G^0 U | \Psi \rangle, \quad (2)$$

где  $| \Psi_0 \rangle$  – общее решение однородного уравнения  $(E - H^0) | \Psi_0 \rangle = 0$ , а  $G^0 U | \Psi \rangle$  частное решение неоднородного уравнения. Функция Грина  $G^0$  невозмущенной системы определяется следующим образом,

$$G^0(E) = \frac{1}{E + i0 - H^0} \quad (3)$$

В случае, когда собственных функций  $H^0$  с рассматриваемой энергией не существует (в энергетических щелях и в запрещенной зоне) получаем,

$$\begin{aligned} \Psi &= G_0 U \Psi, \\ [1 - G^0(E)U] \Psi &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

Если разложить  $\Psi$  по заданному базису, то получится система линейных однородных уравнений для коэффициентов разложения. Она имеет ненулевое решение, лишь если

$$D(E) = \text{Det}[\delta_{\alpha\beta} - (G^0 U)_{\alpha\beta}] = 0 \quad (5)$$

Это уравнение определяет энергии уровней, связанных с локализованными состояниями.

Так как, потенциал дефекта  $U$  локализован в окрестности дефекта, если в качестве базиса использовать локализованные функции, то порядок детерминанта (5) определится числом ближайших соседей, для которых  $U_{\alpha\alpha'}$  отличен от нуля. Это означает, что в случае локализованных возмущений уравнение для связанного состояния получается с помощью вычисления довольно простого детерминанта.

В случаях, когда  $E$  попадает в разрешенную энергетическую зону идеального кристалла, плотность состояний  $N(E)$  отличается от плотности состояний  $N_0(E)$  идеального кристалла. Изменение плотности состояний выражается через  $G^0$  идеального кристалла следующим образом,

$$\Delta N(E) = \frac{1}{\pi} \frac{d\delta(E)}{dE}, \quad (6)$$

где

$$\delta(E) = -\text{arctg}[\text{Im} D(E) / \text{Re} D(E)]$$

В качестве базиса выберем слетеровские орбитали типа

$$\varphi(\vec{r}) = r^n e^{-\alpha r} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (7)$$

центрированные в шести ближайших соседних атомах дефекта [9]. Для s-, p- типа

$$\varphi_s(\vec{r}) = r e^{-\alpha_1 r}, \quad (8)$$

$$\varphi_x(\vec{r}) = x r e^{-\alpha_2 r}, \quad \varphi_y(\vec{r}) = y r e^{-\alpha_2 r}, \quad \varphi_z(\vec{r}) = z r e^{-\alpha_2 r} \quad (9)$$

и для пяти блоховских функций d- типа

$$\varphi_{xy}(\vec{r}) = x y e^{-\alpha_2 r}, \quad \varphi_{xz}(\vec{r}) = x z e^{-\alpha_2 r}, \quad \varphi_{zy}(\vec{r}) = z y e^{-\alpha_2 r}, \quad (10)$$

$$\varphi_{(x^2-y^2)}(\vec{r}) = (x^2 - y^2) r e^{-\alpha_2 r} \quad \text{и т.д.} \quad (11)$$

$$\alpha = (2\pi / a) \lambda \quad (12)$$

Далее, вычислим фурье-образы слетеровских орбиталей,

$$\int e^{-\vec{k} \cdot \vec{r}} \varphi_s(\vec{r}) d\vec{r} = -8\pi \frac{-3\alpha^2 + \vec{k}^2}{(\alpha^2 + \vec{k}^2)^3} \quad (13)$$

$$\int e^{-\vec{k}^* \vec{r}} \varphi_p(\vec{r}) d\vec{r} = 32i\pi \frac{-5\alpha^2 + \vec{k}^2}{(\alpha^2 + \vec{k}^2)^4} \vec{k} Y_{p,m}(\Theta, \Phi) \quad (14)$$

$$\int e^{-\vec{k}^* \vec{r}} \varphi_d(\vec{r}) d\vec{r} = -192\pi \frac{\alpha \vec{k}^2}{(\alpha^2 + \vec{k}^2)^4} Y_{d,m}(\Theta, \Phi), \quad (15)$$

где  $\Theta, \Phi$  - сферические углы вектора  $\vec{k}$ . В результате матричные элементы гамильтониана и интегралов перекрытия получаются в аналитическом виде. Это приводит к значительному упрощению вычислительного процесса.

Теоретико-групповым анализом найдено, что точечная группа  $C_{1h}$   $Sn_S$ , так и  $S_{Sn}$  антиструктурных дефектов состоит из элементов:  $\{E\}$ -единичный элемент;  $\{\sigma_v\}$ -плоскость отражения, перпендикулярная к оси-  $x$  и проходящая через дефектов (оси выбраны как в [10]). Характеры точечной группы  $C_{1h}$  приведены в таблице 1. Так как, представления одномерные, все дефектные состояния невырождены и они или симметричны, или антисимметричны относительно плоскости отражения.

Таблица 1

Таблица характеров группы  $C_{1h}$

$C_{1h}$	$E$	$\sigma_v$
$H_1$	1	1
$H_2$	1	-1

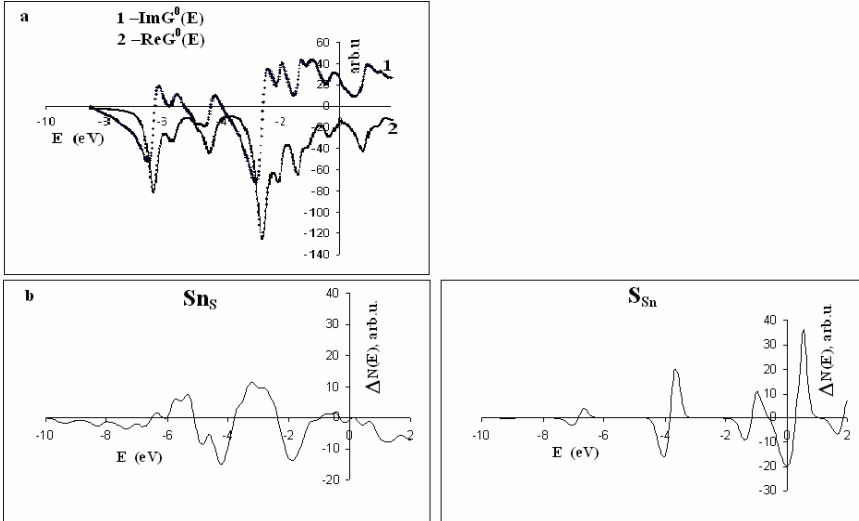


Рис. 1. а -Мнимая и реальная часть функции Грина, б -изменения плотности состояний  $\Delta N(E)$  внесенные антиструктурными дефектами.

На рис. 1 представлены изменения плотности состояний, вызванные антиструктурным дефектом  $Sn_S$  и  $S_{Sn}$ , а также мнимые и реальные части функций Грина. В случае антиструктурного дефекта  $S_{Sn}$ , при потенциале отталкивания  $U > 0$ ,

связанное состояние поднимается выше потолка валентной зоны и находится при  $E_V + 0.11$  эВ, в то время как при потенциале притяжения дефекта  $S_{Sn}$   $U < 0$ , связанное состояние опускается ниже края зоны проводимости и создает в запрещенной зоне глубокий уровень при  $E_c - 0,1$  эВ. Локальное состояние в фундаментальной запрещенной зоне для  $S_{Sn}$  занято двумя электронами и является донором, а для  $S_{Sn}$  связанное состояние не занято и действует как акцептор. Волновые функции обоих уровней экспоненциально спадают при удалении от дефектов.

Анализ волновых функций локализованных состояний в фундаментальной запрещенной зоне для обоих дефектов показывает, что эти состояния в основном состоят из p-тип орбиталей, локализованных на ближайших соседях. Это согласуется с фактом, что потолок валентной зоны и нижняя часть зоны проводимости SnS в основном состоит из p-тип состояний Sn и S.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Farberovich O.V., Yaresko A., Kikoin K., Fleurov V. Phys. Rev. 2008, b.78, p.085206.
2. Esteves M.C., Rocha A.B., Vugman N.V., Bielschowsky C.E. Chemical Physics Letters, 2008, b. 453 (4), p.188.
3. Nakagawa S.T., Okamoto A., Betz G. Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, B, 2008, b. 266 (12), p.2711.
4. Hu W.G., Wang Z., Su B.F., Dai Y.Q., Wang S.J., Zhao Y.W. Physics Letters A, 2004, b.332 (3), p.286.
5. Chadi D. Phys. Rev. 2003, b. 68, p.19
6. Ланно М., Бургуэн Ж. Точечные дефекты в полупроводниках. Теория. М.: Мир, 1984, 264 с.
7. Kruger P., Pollmann J. Phys. Rev. 1988, b.15, p.10578.
8. Bernholc J., Nunzio O. Lipari, Pantelides S.T. Phys. Rev. 1980, b.8, p.3545.
9. Chadi D.J. Phys. Rev. 1977, b.8, p.3572.
10. Гашидзе Ф.М., Харциев В.Е. ФТТ, 1962, №4, с.434.

#### **SnS BİRLƏŞMƏSİNDƏ $S_{Sn}$ VƏ $S_{Sn}$ ANTİSTRUKTUR DEFEKTLƏRİNİN ELEKTRON QURULUŞUNUN QRİN FUNKSİYASI METODU VASİTƏSİLƏ ÖZ-ÖZÜNÜ TƏNZİMLƏNMƏ HESABLANMASI**

**Z.A.SAHANGIRLI, H.S.ORUCOV, T.O.BAYRAMOVA**

#### **XÜLASƏ**

Qrın funksiyası metodu ilə SnS kristalında  $S_{Sn}$  və  $S_{Sn}$  antistruktur defektlərinin dərin elektron səviyyələri hesablanmışdır. s-, p-və d- tip Sleter orbitallarından istifadə etməklə АОХК metodu ilə SnS yarımkeçirici birləşməsinin elektron quruluşu hesablanmışdır.

#### **SELFCONSISTENT CALCULATION OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF $S_{Sn}$ AND $S_{Sn}$ ANTISTRUCTURE DEFECTS IN SnS BY THE GREEN FUNCTION METHOD**

**Z.A.JAHANGIRLI, H.S.ORUJOV, T.O.BAYRAMOVA**

#### **SUMMARY**

The electronic structure of  $S_{Sn}$  and  $S_{Sn}$  antisite defects in SnS has been considered in terms of Green's function theory. Using s-, p- and d-type Slater's orbital by LCAO method, electronic states of SnS semiconductor have been calculated.