**Габрельян, Борис Витальевич.**

## Электронная энергетическая структура некоторых полупроводниковых халькогенидов и их твердых растворов : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. - Ростов-на-Дону, 1999. - 144 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Габрельян, Борис Витальевич

ВВЕДЕНИЕ.

ГЛАВА 1. ОСОБЕННОСТИ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ, ЭЛЕКТРОННО- 8 ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛУПРОВОДНИКОВ А^СУ1, АПВУ1 И ИХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ.

1.1. Халькогениды типа А11В ^

1.1.1. Кристаллическая структура и общая характеристика полупро- 8 водников типа АПВМ

1.1.2. Особенности ЭЭС полупроводников типа А11В41 по результатам 12 зонных расчетов.

1.1.3. Результаты рентгеноэлектронных и рентгеноспектральных ис- 17 следований ЭЭС полупроводников типа А^В^.

1.2. Халькогениды типа А1ВШС2У1.

1.2.1. Кристаллическая структура и общая характеристика полупро- 20 водников типа А'В"1^1.

1.2.2. Особенности ЭЭС полупроводников типа А'В111^1 по результа- 25 там зонных расчетов.

1.2.3. Результаты рентгеноэлектронных и рентгеноспектральных ис- 32 следований ЭЭС полупроводников типа А'В™^1 •

1.3. Твердые растворы на основе халькогенидов типа АПВУТ.

ГЛАВА 2. МЕТОДИКА РАСЧЕТА ЭЛЕКТРОННОЙ ЭНЕРГЕТИЧЕ- 40 СКОЙ СТРУКТУРЫ И РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ ТРОЙНЫХ И ДВОЙНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ИХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ.

2.1. Применение метода многократного рассеяния высокого порядка 40 (программа РЕРГ7) для расчета рентгеновских спектров поглощения.

2.2. Применение метода полного многократного рассеяния в прибли- 52 жении локального когерентного потенциала для расчета электронной энергетической структуры твердых тел.

2.3. Методика расчета электронной энергетической структуры с ис- 62 пользованием метода локального когерентного потенциала и программы РЕРР7.

ГЛАВА 3. ЭЛЕКТРОННАЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И РЕНТ- 64 ГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ БИНАРНЫХ И ТРОЙНЫХ СОЕДИНЕНИЙ СТЕХИОМЕТРИЧЕСКОГО СОСТАВА.

3.1. Электронная энергетическая структура и особенности химической 64 связи бинарных халькогенидов типа АПВУ1.

3.1.1. ХАЫЕ8 К-спектры и плотность незанятых состояний соединений л По VI типа А В

3.1.2. Плотность состояний у вершины валентной полосы и ширины 76 запрещенных полос соединений типа АПВУ1.

3.2. Электронная энергетическая структура и особенности химической 82 связи тройных халькогенидов типа А1ВШС21.

3.2.1. Расчет параметров решетки халькопиритов типа А'ВШС^.

3.2.2. ХАМЕБ К-спектры и плотность незанятых состояний соединений 86 типа А1ВШСУ1.

3.2.3. Плотность состояний у вершины валентной полосы и ширины 96 запрещенных полос соединений типа А'В™^1.

ГЛАВА 4. ЭЛЕКТРОННАЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ПСЕВ- 113 ДОБИНАРНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ г^е^.

4.1. Кристаллическая структура и общая характеристика полупровод- 113 никовых твердых растворов 7п5х5е1.х.

4.2. Приближение виртуального кристалла.

4.3. Учет химического разупорядочения.

4.4. Простая тетрагональная структура.

4.5. Структура халькопирита.