**Хакимов, Зокирхон Муйдинхонович.**
Локализованные состояния и их генеалогия в ковалентных кристаллах : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. - Ташкент, 1985. - 162 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Хакимов, Зокирхон Муйдинхонович

ВВЕДЕНИЕ

ГЛАВА I. СОСТОЯНИЕ ТЕОРИИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ

ГЛУБОКИХ ЦЕНТРОВ.

1.1. Метод функций Грина.

I.X.I. Подход Слейтера-Костера.

1.1.2. Полуэмпирический метод функций Грина.

1.1.3. Неэмпирический метод функций Грина.

1.2. Молекулярно-кластерные методы и методы циклических кластеров

1.3. Некоторые новые подходы в рамках метода функций Грина.

ГЛАВА 2. МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА В БАЗИСЕ ИЗ ЭКВИВАЛЕНТНЫХ ОРБИТАЛЕЙ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ И РЕЗОНАНСНЫХ СОСТОЯНИЙ В КОВАЛЕНТНЫХ КРИСТАЛЛАХ.

2.1. Закон дисперсии для ковалентных кристаллов в рамках метода сильной связи в базисе из эквивалентных орбиталей.

2.2. Параметризация полной зонной структуры кремния с учетом взаимодействия атомов - третьих соседей.

2.3. Метод функций Грина в базисе эквивалентных орбиталей.

2.3.1. Расчет матричных элементов функций Грина вне разрешенных энергетических зон

2.3.2. Расчет матричных элементов функций Грина в разрешенных энергетических зонах

2.3.3. Расчет матрицы плотности состояний.

2.3.4. Плотность электронных состояний в кремнии . 67 2.4. Матричные элементы потенциала возмущения.

ГЛАВА 3. НОВЫЙ ПОДХОД К ИССЛЕДОВАНИЮ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ

СОСТОЯНИЙ.

3.1. Генеалогия локализованных состояний точечных дефектов в ковалентных кристаллах

3.1.1. Преобразование уравнения метода функций Грина.

3.1.2. Точечные дефекты. Определение вакансии

3.1.3. Локализованные состояния примесей

3.1.4. Уравнение для локализованных состояний точечных дефектов.

3.1.5. Локализованные уровни идеальной вакансии при использовании других базисных функций

3.1.6. Роль зонных состояний и искажений решетки в формировании локализованных уровней

3.2. Обобщение на произвольный (сложный) дефект

3.2.1. Расширенный метод дефектной молекулы.

3.2.2. К определению матричных элементов потенциала возмущения в методе функций Грина при использовании неполного базисного набора

3.2.3. Формулировка граничных условий в молекулярно-кластерных расчетах.

ГЛАВА 4. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ И РЕЗОНАНСНЫХ СОСТОЯНИЙ ТОЧЕЧНЫХ И СЛОЖНЫХ

ДЕФЕКТОВ В КРЕМНИИ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ. III

4.1. О критерии выбора специальных точек зоны Бриллюэна для расчета матричных элементов функций Грина.

4.2. Локализованные и резонансные состояния точечных дефектов

4.3. Локализованные и резонансные состояния сложных дефектов

4.4. Е-центр в рамках расширенного метода дефектной молекулы

4.5. Сопоставление с другими расчетными данными

4.5.1. Точечные дефекты в кремнии

4.5.2. Сложные дефекты в кремнии