

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

- Тимошенко Ю.К.
КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ДИСЛОКАЦИИ ЛОМЕРА В КРЕМНИИ
- Тимошенко Ю.К.
СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ НАНОКРИСТАЛЛОВ AgCl И AgCl:I С АДсорбированным ИОНОМ СЕРЕБРА
- Чернышев В.В., Чернышев А.В., Гриднев А.Е., Зайцев С.В.
ВЛИЯНИЕ АНИОНА ЭЛЕКТРОЛИТА НА ФОРМИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО АНОДНОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

МАТЕМАТИКА

- Баяев А.Д., Садчиков П.В.
ОБ ОДНОМ КЛАССЕ ВЕСОВЫХ ПСЕВДОДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ ОПЕРАТОРОВ С ПЕРЕМЕННЫМ СИМВОЛОМ
- Бурлуцкая М.Ш., Хромов А.П.
О РАВНОСХОДИМОСТИ НА ВСЕМ ОТРЕЗКЕ РАЗЛОЖЕНИЙ ПО СОБСТВЕННЫМ ФУНКЦИЯМ ИНТЕГРАЛЬНОГО ОПЕРАТОРА С ИНВОЛЮЦИЕЙ
- Вербейко Н.Д., Тришина Е.А.
ПРОСТРАНСТВЕННАЯ ТРАЕКТОРИЯ ДВИЖЕНИЯ МАТЕРИАЛЬНОЙ ТОЧКИ В ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ВРАЩАЮЩЕЙСЯ СИСТЕМЕ ОТСЧЕТА В ОТСУТСТВИИ ПОПЕРЕЧНЫХ УСИЛИЙ
- Воротников Д.А., Звягин В.Г.
ОБЗОР РЕЗУЛЬТАТОВ И ОТКРЫТЫХ ПРОБЛЕМ ПО МАТЕМАТИЧЕСКИМ МОДЕЛЯМ ДВИЖЕНИЯ ВЯЗКОУПРУГИХ СРЕД ТИПА ДЖЕФФРИСА
- Дылевский А.В., Лозгачев Г.И., Малютин В.С.
ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ ПОСТРОЕНИЯ КОНЕЧНОМЕРНЫХ РЕГУЛЯТОРОВ ДЛЯ ОБЪЕКТОВ С ЗАПАЗДЫВАНИЕМ
- Зыков П.С., Киселева П.Е.
КРАЕВАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ ФУНКЦИОНАЛЬНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ ВКЛЮЧЕНИЙ НА МНОГООБРАЗИЯХ С ПОЛУНЕПРЕРЫВНОЙ СНИЗУ ПРАВОЙ ЧАСТЬЮ
- Кривоченко А.В.
РАСТЯЖЕНИЕ ТОНКОЙ ПЛАСТИНЫ ОСЛАБЛЕННОЙ ЭЛЛИПТИЧЕСКОЙ ВЫТОЧКОЙ
- Кудинов А.Ф.
ОБЩЕЕ РЕШЕНИЕ РАЗНОСТНОГО УРАВНЕНИЯ ТРЕТЬЕГО ПОРЯДКА

- Лобода А.В.
АФФИННО-ОДНОРОДНЫЕ ВЕЩЕСТВЕННЫЕ ГИПЕРПОВЕРХНОСТИ 3-МЕРНОГО КОМПЛЕКСНОГО ПРОСТРАНСТВА
- Нгуен Тхи Хиен
ГЛАДКИЕ МОДЕЛИ УПОРА И ЛЮФТА
- Новиков И.Я., Северов П.Г.
О МУЛЬТИВСПЛЕСКОВЫХ ПРЕОБРАЗОВАНИЯХ
- Свиридова Е.Н.
АСИМПТОТИКА ПРИ $t \rightarrow \infty$ КОМПОНЕНТ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О МАЛЫХ КОЛЕБАНИЯХ ВРАЩАЮЩЕЙСЯ СТРАТИФИЦИРОВАННОЙ ЖИДКОСТИ В ПОЛУПРОСТРАНСТВЕ. ЧАСТЬ 2
- Синтяев Ю.Н.
ОБ ОДНОМ УСЛОВИИ РАЗРЕШИМОСТИ СЛАБО НЕЛИНЕЙНЫХ ПАРАБОЛИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ В ПРОСТРАНСТВЕ ОГРАНИЧЕННЫХ ФУНКЦИЙ
- Синтяева К.А.
ГАРМОНИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПОЧТИ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ВЕКТОРОВ
- Смагин В.В.
О СКОРОСТИ СХОДИМОСТИ МЕТОДА ГАЛЕРКИНА ДЛЯ НЕЛИНЕЙНОГО ПАРАБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ
- Сотников Д.С.
СХОДИМОСТЬ В СИЛЬНЫХ НОРМАХ ПРОЕКЦИОННО-РАЗНОСТНОГО МЕТОДА ДЛЯ КВАЗИЛИНЕЙНОГО ПАРАБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ
- ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ДИСЛОКАЦИИ ЛОМЕРА В КРЕМНИИ

Ю. К. Тимошенко

Воронежский государственный университет

Поступила в редакцию 12.11.2009 г.

Аннотация. Выполнены квантовохимические расчеты электронной структуры дислокации Ломера в кластерном приближении. Обсуждается локализация электронных состояний в области ядра дислокации

Ключевые слова: дислокация Ломера, электронная структура, кластерное приближение

Annotation. Quantum chemical calculations of electronic structure of Lomer dislocation are executed in cluster approach. Localization of electronic states in the region of a dislocation core is discussed.

Keywords: Lomer dislocation, electronic structure, cluster approach.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время стал заметен интерес к исследованию кремния, содержащего примесные атомы металлов в области ядра краевой дислокации [1]. Хотя экспериментальных работ в этой области выполнено довольно много, теоретически данная проблематика изучена явно недостаточно. В частности, это относится к теории электронной структуры таких систем. Более того, это можно сказать и о краевых дислокациях в кремнии без каких-либо примесных атомов. В настоящем кратком сообщении приводятся результаты расчетов одноэлектронных состояний дислокации Ломера в кремнии [2] в кластерном приближении. Решение этой задачи является необходимым этапом для перехода к теоретическому изучению электронной структуры примесных атомов в области ядра дислокации.

2. ТЕОРИЯ

Использовалась модель молекулярного кластера [3]. Для определения координат атомов в нулевом приближении использовалась демо-версия известной программы ADESH. Оборванные связи на поверхности кластера пассивировались атомами водорода. Кластер содержал 540 атомов кремния и 270 атомов водорода. Атомы кремния, имеющие связи с водородом, и сами водородные атомы «замо-

раживались», а координаты внутренних атомов кремния находились методом молекулярной динамики в режиме квазидинамического демпфирования, который применялся нами ранее при рассмотрении краевых дислокаций в полярных соединениях [4]. Взаимодействия атомов типа Si-Si и Si-H рассматривались в рамках полуэмпирических моделей [5, 6]. После определения координат кластера проводился квантовохимический расчет электронных состояний $\text{Si}_{540}\text{H}_{270}$ в приближении Хартри—Фока—Слейтера [7] с использованием псевдопотенциала [8]. Вычисления проводились по программе [9].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ОБСУЖДЕНИЕ

Рассчитанная равновесная пространственная конфигурация кластера представлена на рис. 1. Для атомов в области ядра дислокации рассчитывались локальные парциальные плотности состояний (ЛППС) по формулам

$$\rho_{\alpha}(\epsilon) = \sum_i W_{\alpha,i} \delta(\epsilon - E_i), \quad (1)$$

$$W_{\alpha,i} = \sum_{l',\beta} C_{\alpha,i} S(l\alpha, l'\beta) C_{l'\beta,i}, \quad (2)$$

где $C_{\alpha,i}$ — орбитальный коэффициент в разложении молекулярной орбитали по атомным орбиталям (АО) $\phi_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, соответствующий одночастичной энергии E_i ; l — номер атома, α — тип АО, i — номер состояния, S — матрица интегралов перекрывания АО.