

## ТЕНЗОРНЫЙ МЕТОД В ТЕОРИИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ

*С.Ю.Захарчук, Е.Ф.Кустов, Д.Е.Кустов, В.А.Лизгачев*

Предлагается вариант полуэмпирического подхода к расчету электронных спектров твердых тел, основанный на представлении о симметрии волновых функций электронной подсистемы вещества в пространстве базисных (атомных) волновых функций. Для полупроводников IV группы в качестве базисных выбрано 8 волновых функций  $s$ - и  $p$ -орбиталей с неповторяющимися значениями орбитального и спинового квантовых чисел. Редукция представлений группы  $U_8$  на представления группы симметрии молекулы используется для классификации состояний и тензорных операторов взаимодействия молекулярной системы. Получены матрицы тензоров для молекулярных образований с различной пространственной симметрией. Электронный спектр молекулярных образований отождествляется со спектром собственных значений соответствующих матриц. Анализируются предварительные результаты электронных спектров молекулярных образований различной сложности и с различной пространственной симметрией на основе кремния, в том числе спектр аморфного кремния. Получено удовлетворительное качественное совпадение с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными по спектрам плотности состояний валентной зоны аморфного и кристаллического кремния.

Будем исходить из адиабатического приближения при описании параметров электронной подсистемы материала. Нумерованное индексом  $i$  стационарное состояние электронной подсистемы твердого тела описывается уравнением Шредингера [1]

$$H\psi_i = E\psi_i, \quad (1)$$

в котором  $H$  — оператор энергии (гамильтониан) подсистемы,  $\psi_i$  — волновая функция рассматриваемого состояния,  $E$  — его энергия. Если  $\psi_j$  — волновая функция  $j$ -го состояния этой же подсистемы, то, умножая обе части (1) на  $\psi_j$  и интегрируя по пространству, получаем

$$\int \psi_i H \psi_j dr = E \int \psi_i \psi_j dr, \quad (2)$$

где  $r$  — радиус-вектор точки в трехмерном пространстве. Используя стандартные обозначения (скобки Дирака и интеграл перекрытия волновых функций  $S_{ij} = \int \psi_i \psi_j dr$ ), соотношение (2) можно представить в

$$\langle \psi_i | H | \psi_j \rangle = ES_{ij}. \quad (3)$$

Спектр электронной подсистемы определяется [1] спектром оператора энергии, который в пространстве ее собственных функций является тензором второго ранга. Если нумеровать элементы тензора индексами соответствующих базисных функций, то (3) можно переписать

$$H_{ij} - ES_{ij} = 0. \quad (4)$$

Конкретный вид тензора определяется размерностью пространства базисных функций и симметрией молекулярной системы.

### 1. Матрица тензора второго ранга для элементарных полупроводников IV группы

Валентные связи в указанных материалах осуществляются электронами внешних *s*- и *p*-оболочек, так что для каждого атома полное число базисных электронных волновых функций (определяемое неповторяющимся набором сочетаний орбитального и спинового квантовых чисел) равно 8. Полное восьмимерное пространство состояний описывается группой унитарных преобразований  $U_8$  [2]. Все одноэлектронные состояния происходят от одного представления этой группы (1) размерности 8. Чтобы оценить применимость такой модели для описания электронных конфигураций в трехмерном пространстве, необходимо осуществить редукцию указанного представления до представлений точечной группы — пространственной группы симметрии молекулярной системы. Путь редукции определяет набор квантовых чисел, характеризующих состояние системы и тензорного оператора взаимодействий. В дальнейшем будем использовать обозначения представлений точечных групп, взятые из [3]. Выберем следующий ряд подгрупп:

$$\begin{aligned} U_8 &\supset U_4 &\supset U_3 &\supset O_3 &\supset O_h, \\ \{1\} &\Rightarrow \{1\} &\Rightarrow \{1\} &\Rightarrow [1]^- &\Rightarrow \Gamma_4^-, \\ & & & \Rightarrow \{0\} &\Rightarrow [0]^+ &\Rightarrow \Gamma_1^+, \\ & & & & & \Rightarrow \{1^3\} &\Rightarrow \{1^2\} &\Rightarrow [1]^{+-} &\Rightarrow \Gamma_5^+, \\ & & & & & \Rightarrow \{1^3\} &\Rightarrow \{1^3\} &\Rightarrow [0]^{-} &\Rightarrow \Gamma_2^-. \end{aligned} \quad (5)$$

Таким образом, получаем следующий набор состояний: полярно-векторное, скалярное, аксиально-векторное и псевдоскалярное соответственно. Количество компонент тензора можно определить с использованием теоремы характеров и редукционного ряда (5).

Симметричный и антисимметричный тензор второго ранга определяются представлениями  $\{2\}$  и  $\{1^2\}$

$$\begin{array}{lclclclcl}
 U_8 & \supset & U_4 & \supset & O_4 & \supset & O_3 & \supset & O_h, \\
 \{2\} & \Rightarrow & \{2\} & \Rightarrow & [0] & \Rightarrow & [0]^+ & \Rightarrow & \Gamma_1^+ & 1, \\
 & & & & & \Rightarrow & [2] & \Rightarrow & [0]^+ & \Rightarrow & \Gamma_1^+ & 2, \\
 & & & & & & & \Rightarrow & [1]^- & \Rightarrow & \Gamma_4^-, \\
 & & & & & & & \Rightarrow & [2]^+ & \Rightarrow & \Gamma_3^+, \Gamma_5^+, \\
 & \Rightarrow & \{2^3\} & \Rightarrow & [0] & \Rightarrow & [0]^+ & \Rightarrow & \Gamma_1^+ & 3, \\
 & & & & & \Rightarrow & [2] & \Rightarrow & [0]^+ & \Rightarrow & \Gamma_1^+ & 4, \\
 & & & & & & & \Rightarrow & [1]^- & \Rightarrow & \Gamma_4^-, \\
 & & & & & & & \Rightarrow & [2]^+ & \Rightarrow & \Gamma_3^+, \Gamma_5^+, \\
 & \Rightarrow & \{21^2\} & \Rightarrow & [2]^* & \Rightarrow & & \Rightarrow & \Gamma_2^-, \Gamma_3^- & 5, \\
 & & & & & \Rightarrow & [1^2] & \Rightarrow & \Gamma_5^+, \Gamma_4^- & & & \\
 & \Rightarrow & \{1^4\} & \Rightarrow & [0]^* & \Rightarrow & & \Rightarrow & \Gamma_2^- & 6, \\
 \{1^2\} & \Rightarrow & \{1^2\} & \Rightarrow & [1^2] & \Rightarrow & & \Rightarrow & \Gamma_5^+, \Gamma_4^-, \\
 & \Rightarrow & \{2^2 1^2\} & \Rightarrow & [1^2] & \Rightarrow & & \Rightarrow & \Gamma_5^+, \Gamma_4^-, \\
 & \Rightarrow & \{21^2\} & \Rightarrow & [2]^* & \Rightarrow & & \Rightarrow & \Gamma_2^-, \Gamma_3^-, \\
 & & & & & \Rightarrow & [1^2] & \Rightarrow & \Gamma_5^+, \Gamma_4^-, \\
 & \Rightarrow & \{1^4\} & \Rightarrow & [0]^* & \Rightarrow & & \Rightarrow & \Gamma_2^-. & (6)
 \end{array}$$

Из анализа редукционного ряда (6) видно, что в восьмимерном пространстве можно построить тензор, сферически-симметричный в трехмерном пространстве (составляющие 1, 2, 3, 4 формулы (6)). Такой тензор будет иметь четыре составляющие. Физически это означает, что в молекулярной системе существуют 4 типа сферически-симметричных взаимодействий. Указанные составляющие характеризуются набором символов представлений (квантовых чисел) в соответствии с группами ряда (6). В других группах симметрии молекулярной системы могут появляться дополнительные составляющие. Их количество и тип определяются путем нахождения активных представлений группы  $O_h$  (или  $O_3$  для гексогональных сингоний) [4-6]. В случае, если симметрия в расположении атомов рассматриваемой молекулярной системы определяется группой  $T_d$ , активными представлениями группы  $O_h$  будут  $\Gamma_1^+$  и  $\Gamma_2^-$ , поскольку эти два представления редуцируются на полносимметричное представление  $\Gamma_1$  группы  $T_d$ . В этом случае появляются две дополнительных составляющих тензора (обозначенные как 5 и 6 в формуле (6)) тетраэдрического типа, при этом общее число составляющих становится равным шести.

Следующим шагом является построение матрицы тензора. Построение матрицы ведется путем применения к элементам матрицы  $8 \times 8$  элементов симметрии группы  $O_h$  через подгруппу группы перестановок  $P_8$  и приводит к следующему результату:

$$\left. \begin{array}{l} \{1\} \\ \{1^3\} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \begin{cases} s_1 & E & a & a & a & b & b & b & c, \\ p_{x1} & a & E & a & a & b & b & c & b, \\ p_{y1} & a & a & E & a & b & c & b & b, \\ p_{z1} & a & a & a & E & c & b & b & b, \end{cases} \\ \begin{cases} s_2 & b & b & b & c & E & a & a & a, \\ p_{xz} & b & b & c & b & a & E & a & a, \\ p_{yz} & b & c & b & b & a & a & E & a, \\ p_{zz} & c & b & b & b & a & a & a & E, \end{cases} \end{array} \quad (7)$$

где  $E$ ,  $a$ ,  $b$  и  $c$  — четыре различные компоненты матрицы, соответствующие четырем составляющим тензора. Компонента  $a$  определяет взаимодействие между собственными орбиталями центрального атома и между орбиталями четырех «соседних» атомов, образующих химическую связь с «центральными». Соображения симметрии требуют, чтобы интенсивность всех этих взаимодействий описывалась одинаковыми элементами, в противном случае группа симметрии взаимодействий будет отличаться от  $O_h$ . Аналогичными соображениями определяется равенство друг другу всех диагональных элементов матрицы.  $b$ ,  $c$  — два элемента взаимодействия между «своими» и «чужими» орбиталями. Собственные значения и собственные векторы этой матрицы следующие:

$$\begin{aligned} (\Gamma_1^+) &: E + 3a + 3b + c; & 8^{-1/2}(+s_1 + p_{x1} + p_{y1} + p_{z1} + s_2 + p_{x2} + p_{y2} + p_{z2}), \\ (\Gamma_5^+) &: E - a + b - c; & 8^{-1/2}(-s_1 - p_{x1} + p_{y1} + p_{z1} - s_2 + p_{x2} + p_{yz} + p_{z2}), \\ & & 8^{-1/2}(-s_1 + p_{x1} - p_{y1} + p_{z1} - s_2 + p_{x2} - p_{y2} + p_{z2}), \\ & & 8^{-1/2}(+s_1 - p_{x1} - p_{y1} + p_{z1} + s_2 - p_{x2} - p_{y2} + p_{z2}), \\ (\Gamma_4^-) &: E - a - b + c; & 8^{-1/2}(-s_1 - p_{x1} + p_{y1} + p_{z1} + s_2 + p_{x2} - p_{y2} + p_{z2}), \\ & & 8^{-1/2}(-s_1 + p_{x1} - p_{y1} + p_{z1} + s_2 - p_{x2} + p_{y2} - p_{z2}), \\ & & 8^{-1/2}(+s_1 - p_{x1} - p_{y1} + p_{z1} - s_2 + p_{x2} + p_{y2} - p_{z2}), \\ (\Gamma_2^-) &: E + 3a - 3b - c; & 8^{-1/2}(+s_1 + p_{x1} + p_{y1} + p_{z1} - s_2 - p_{x2} - p_{y2} - p_{z2}), \end{aligned} \quad (8)$$

Отсюда видно, что главные направления тензора — это пространственные диагонали ортогональной системы координат восьмимерного пространства. Такую же ориентацию будут иметь и гибридизированные орбитали химической связи центрального атома с четырьмя соседями. Если (как, например, в молекуле моносилана) ближайшие соседи тождественны между собой, но отличаются по своим свойствам от центрального атома, то редукционный ряд, аналогичный (6), должен

заканчиваться группой симметрии  $T_d$ . Матрица гамильтониана в этом случае будет иметь шесть независимых параметров, скомпонованных следующим образом:

$$\begin{array}{cccccccc}
 s_1 & E & a & a & a & p & p & p & n, \\
 p_{x1} & a & E & a & a & p & p & n & p, \\
 p_{y1} & a & a & E & a & p & n & p & p, \\
 p_{z1} & a & a & a & E & n & p & p & p, \\
 s_2 & p & p & p & n & E_H & h & h & h, \\
 p_{x2} & p & p & n & p & h & E_H & h & h, \\
 p_{y2} & p & n & p & p & h & h & E_H & h, \\
 p_{z2} & n & p & p & p & h & h & h & E_H.
 \end{array} \tag{9}$$

Физический смысл параметров таков: диагональные элементы, соответствующие центральному атому  $E$ , и параметры взаимодействия между его валентными орбиталями  $a$ , диагональные элементы четырех соседних атомов (например, атомов водорода  $E_H$ ), параметры взаимодействия между орбиталями водорода  $h$  и два параметра взаимодействия между орбиталями центрального атома и атомами водорода (параметры  $p$  и  $n$ ). Используя принятую систему обозначений уровней для группы  $T_d$ , можно записать собственные значения матрицы (9)

$$(\Gamma_5) : (E_H + E - h - a)/2 \pm \left( (E_H - E + h - a)^2 / 4 + (p - n)^2 \right)^{1/2},$$

$$(\Gamma_1) : (E_H + E + 3h + 3a)/2 \pm \left( (E_H - E + 3h - 3a)^2 / 4 + (3p + n)^2 \right)^{1/2}. \tag{10}$$

## 2. Матрица тензора для молекулярных образований с симметрией $C_{3v}(AN_3, AN)$ , $C_{2v}(AN_2)$ , $C_{4v}$

Для молекулярных образований более низкой симметрии, описываемых подгруппами группы симметрии  $O_h$ , необходимо определить количество параметров тензора или количество независимых компонент соответствующей матрицы. Для этого воспользуемся методом тензорного анализа, развитым в [4-7] и схемой редукции (6). Количество и тип параметров тензора определяются представлением скаляра группы симметрии молекулярного образования. Как мы уже видели, для группы  $O_h$  имеются четыре параметра симметричного типа (представление  $\Gamma_1^+$  в разложении по группе  $O_h$ ). Для группы  $C_{4v}$  активными представлениями группы  $O_h$  будут  $\Gamma_1^+$ ,  $\Gamma_3^+$ ,  $\Gamma_4^-$ ; все эти представления дают единичное представление группы  $C_{4v}$  при редукции  $O_h \supset C_{4v}$ . Активные представления  $\Gamma_3^+$  и  $\Gamma_4^-$  дадут в дополнение к четырем параметрам кубического типа еще пять параметров тетрагонального типа для симметричного тензора и три параметра для антисимметричного.

Типы параметров для молекул различной симметрии

Группа симметрии	$O_h$	$T_d$	$C_{4v}$	$C_{3v}$	$C_{2v}$
Активные представления группы*	$\Gamma_1^+$	$[\overbrace{O_h} + \Gamma_2^-]$	$[\overbrace{O_h} + \Gamma_3^+ + \Gamma_4^-]$	$[\overbrace{T_d} + \Gamma_5^+ + \Gamma_4^-]$	$[\overbrace{C_{4v}} + \Gamma_3^+ + \Gamma_5^-]$
Кол-во параметров симметричного типа	4	6	9	11	14
Кол-во параметров антисимметричного типа	0	2	3	9	10
Кол-во используемых параметров	4	6	9	9	9

\* Активные представления групп обозначаются следующим образом. Например, для групп  $C_{2v}$  имеются все активные представления группы  $C_{4v}$  и собственные активные представления этой группы:  $\Gamma_3^+$  и  $\Gamma_5^+$ .

В таблице приведены типы параметров для молекул различной симметрии.

Таким образом, использование принципов симметрии позволило построить полуэмпирическую модель молекулярного образования, в известном смысле аналогичную моделям Хюккеля, используемым в органической химии [8]. Однако по сравнению с методом молекулярных орбиталей Хюккеля в предлагаемой модели используется меньше исходных упрощающих предположений, что в принципе позволяет отказаться от некоторых ограничений, присущих моделям Хюккеля. Энергетический спектр молекулы определяется в подобных моделях собственными значениями матрицы оператора взаимодействия.

На рис. 1 приведена диаграмма расщеплений состояний в молекулах типа  $AH_m$  ( $m = 0, 1, 2, 3, 4$ ). Диаграмма соответствует собственным значениям матриц (7) (для  $m = 0$ ) и (9) ( $m = 4$ ) при следующих значениях параметров (eV):  $E_a = -0.7125$ ,  $E_H = -6.0700$ ,  $a = -0.5625$ ,  $b = -1.6125$ ,  $c = +0.2375$ ,  $p = -2.1900$ ,  $n = h = 0$ . На этом же рисунке даны формулы для аналитического определения положения уровней при заданных значениях параметров указанных матриц. При переходе от молекулы с  $m = 0$  (группа симметрии  $O_h$ ) к молекулам типа  $AH$  (симметрия  $C_{3v}$ ) трехкратно вырожденный уровень расщепляется на однократный уровень и двукратно вырожденный уровень, причем энергия последнего не изменяется по отношению к исходному состоянию в молекуле с  $m = 0$ . Для молекулярных образований типа  $AH_3$  ситуация аналогична по отношению к трехкратно вырожденному уровню молекулы  $AH_4$ .

Для более сложных молекулярных образований оказалось более удобным обозначать тип молекулы следующим образом:  $A(4 - m)H_m$ . Здесь число в скобках определяет количество насыщенных связей, т.е. связей, которые дополняют до 4 ковалентные связи центрально-

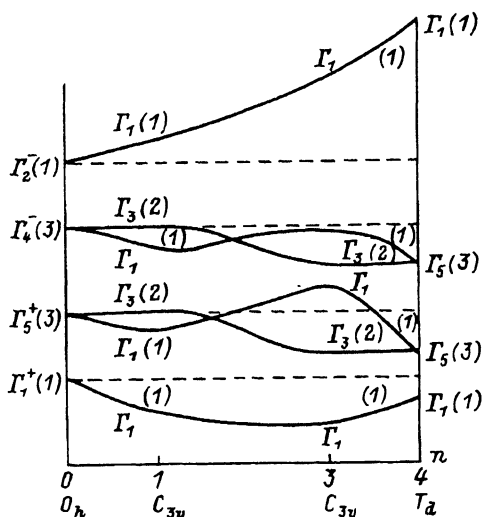


Рис. 1. Диаграмма энергетических уровней молекул  $A(4-m)H_m$ , где  $m = 0, 1, 2, 3, 4$ .

Энергии уровней следующие:

$$(\Gamma_2^- \Gamma_1) : E + \frac{1}{2}(E_H - E + 3h + 3a) + \frac{1}{2}\sqrt{(E_H - E + 3h - 3a)^2 + 4(3p + n)^2},$$

$$(\Gamma_4^- \Gamma_3) : E + \frac{1}{2}(E_H - E - h - a) + \frac{1}{2}\sqrt{(E_H - E - h + a)^2 + 4(p + n)^2},$$

$$(\Gamma_5^+ \Gamma_3) : E + \frac{1}{2}(E_H - E - h - a) - \frac{1}{2}\sqrt{(E_H - E - h + a)^2 + 4(p - n)^2},$$

$$(\Gamma_1^+ \Gamma_1) : E + \frac{1}{2}(E_H - E + 3h + 3a) - \frac{1}{2}\sqrt{(E_H - E + 3h - 3a)^2 - 4(3p + n)^2},$$

$$\Gamma_1^+ : E + 3a + 3b + c,$$

$$\Gamma_5^+ : E - a + b - c,$$

$$\Gamma_4^- : E - a - b + c,$$

$$\Gamma_2^- : E + 3a - 3b - c.$$

го атома. Параметры тензоров таких образований рассчитываются с использованием полученных ранее параметров для молекул  $A(4)$  и  $A(0)H_4$ . Это позволяет для молекулярных образований с относительно низкой симметрией использовать меньшее число параметров, чем это диктуется соображениями симметрии.

На рис. 2 даны диаграмма энергетических уровней для кремния, силана и полимерных цепочек типа  $(-SiH_2-)_m(a)$  и диаграмма «кратности вырождения» уровней  $b$ . Расчет проводился с использованием метода Якоби на ЭВМ типа IBM PC при перечисленных выше параметрах матриц. Из рис. 2,  $b$  видно, что в такой системе имеются два уровня с кратностью вырождения  $m$ , энергия которых совпадает с энергией трехкратно вырожденных уровней силана. Иными словами, при увеличении количества звеньев в цепочке положение этих уровней не претерпевает никаких изменений, что можно объяснить отсутствием в полимерных цепочках данного типа взаимодействий, приводящих к расщеплению указанных уровней. Аналогичный эффект должен наблюдаться и для полимеров других типов.

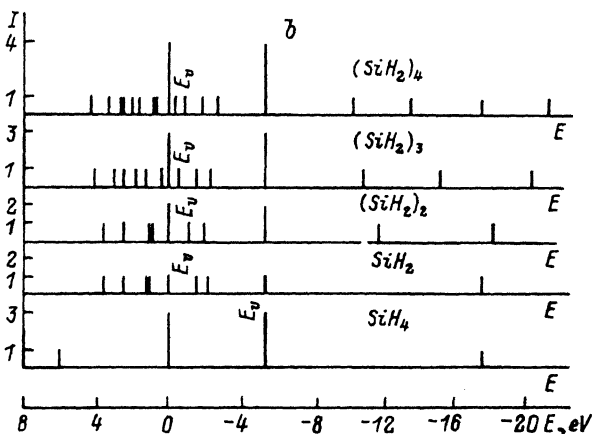
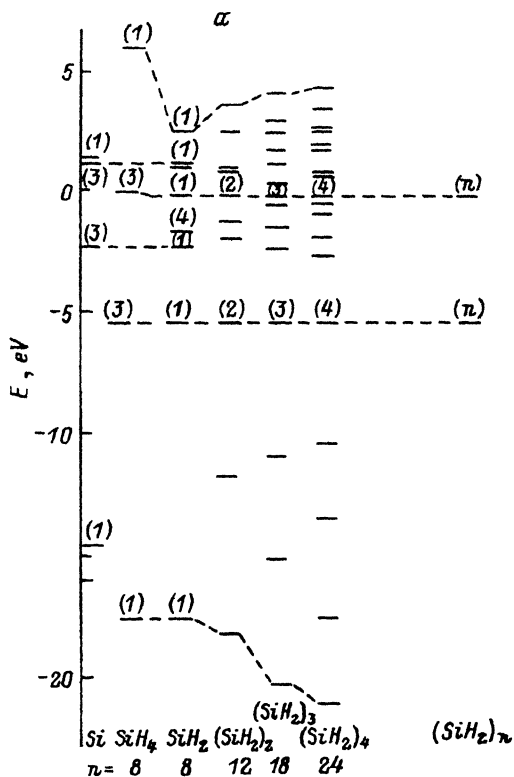


Рис. 2. Сравнительная диаграмма расщеплений молекул  $Si$ ,  $SiH_4$ ,  $SiH_2$ ,  $(SiH_2)_2$ ,  $(SiH_2)_3$ ,  $(SiH_2)_4$  (а) и диаграмма кратности вырождения  $I$  энергетических состояний этих молекул (б).



### 3. Диаграмма энергетических уровней для молекулярных образований кремния

Чтобы определить возможности изложенного выше метода для исследований энергетического спектра твердых полупроводников, были рассчитаны спектры собственных значений матриц, состоящих из 5 и 14 диагональных блоков вида (7). Это структуры координационного многогранника и элементарной ячейки монокристалла кремния. Значения элементов за пределами диагональных блоков определены из соображений топологии. Схематично структура химических связей в таких образованиях представлена на рис. 3, *a, b*. Полученные матрицы оказались разреженными и отличались так называемым диагональным преобладанием, т.е. большая часть элементов матриц имела нулевые значения, а ненулевые элементы в основном были сосредоточены вблизи главной диагонали. Указанные особенности матриц вновь позволили использовать для расчета спектров ЭВМ класса IBM PC. Рассчитывалась также суммарная энергия связывания

$$E_{\text{bond}} = \sum z_i E_i, \quad (11)$$

где  $z_i$  и  $E_i$  — заселенность и энергия  $i$ -го уровня, а суммирование ведется по всем уровням электронной подсистемы.

Результаты расчетов спектров плотности состояний для молекулярных образований на основе кремния приведены на рис. 4, *a-c*. На рис. 4 показан генезис энергетических уровней по мере расширения области взаимодействия (*a*) и дана диаграмма кратности вырождения уровней этих молекул (*b*). Отметим, что в молекулярной системе координационного многогранника кремния имеются два четырехкратно вырожденных уровня. Возможно, что эти состояния происходят от состояний «угловых» атомов с тремя внешними насыщенными связями. На рис. 4, *c* приведены для сравнения спектры плотности состояний кристаллического (*c*-Si) и аморфного (*a*-Si) кремния, полученные

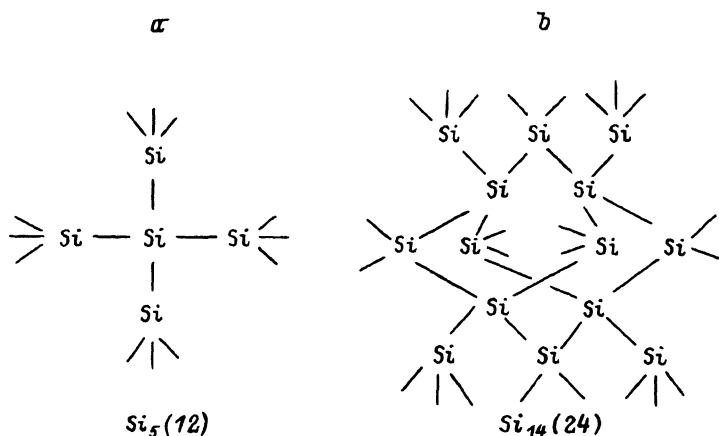


Рис. 3. Структура химических связей для координационного многогранника (*a*) и элементарной ячейки кристалла кремния (*b*).

В первом случае имеется 12 внешних насыщенных связей, во втором — 24.

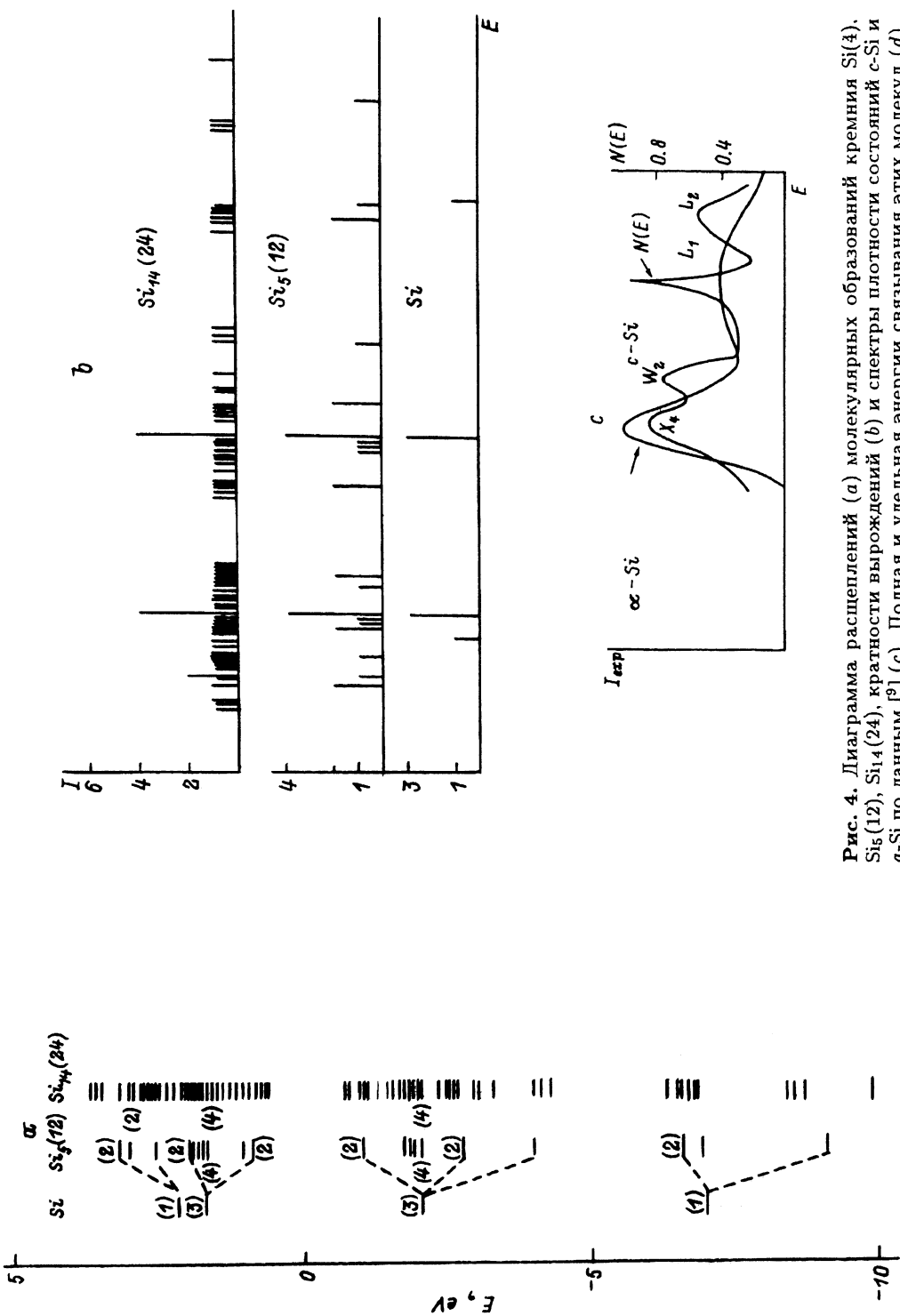


Рис. 4. Диаграмма расщеплений (а) молекулярных образований кремния Si(4), Si<sub>12</sub>(12), Si<sub>14</sub>(24), кратности вырождений (б) и спектры плотности состояний c-Si и a-Si по данным [9] (с). Полная и удельная энергии связывания этих молекул (д).

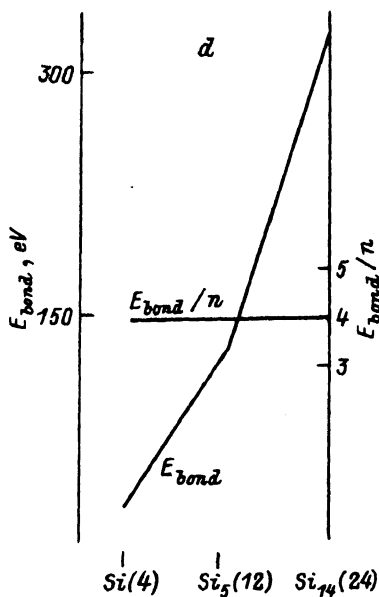


Рис. 4. Продолжение.

по данным рентгеноэлектронных спектров валентной зоны [9]. Как видно из сравнения графиков на рис. 4, *b* и *c*, предложенный метод расчета позволяет получить согласие между расчетными и экспериментальными данными на качественном уровне. Есть все основания полагать, что лучшее количественное совпадение данных можно достичь оптимизацией параметров матрицы тензора молекулярных взаимодействий. Энергия связывания увеличивается по мере увеличения количества взаимодействующих атомов, однако энергия связывания, приходящаяся на одну орбиталь, остается практически постоянной (рис. 4, *d*).

Для аморфного кремния характерно наличие в структуре относительно большого количества оборванных связей. В качестве модели энергетического спектра *a*-Si мы попытались использовать молекулярные образования кремния с переменным количеством внешних насыщенных связей. Напомним, что в структуре элементарной ячейки кремния исходное число таких связей равно 12. Обрыв каждой насыщенной связи моделируется обнулением всех элементов в соответствующих столбце и строке матрицы. Полученные результаты представлены на рис. 5, *a*. По мере обрыва связей снимается вырождение, появляются состояния в «запрещенной зоне» материала, расширяются полосы энергий, соответствующие как связывающим, так и антисвязывающим состояниям. В целом спектр по ряду параметров приближается к спектру *a*-Si. Тем не менее сохраняются два уровня с кратностью вырождения 3 (на рисунке кратность вырождения указана в скобках). Общая энергия связывания по мере обрыва связей уменьшается, однако удельная энергия (приходящаяся в расчете на одну связь) практически остается постоянной (рис. 5, *c*). При этом общее количество состояний в валентной зоне сохраняется. Однако из-за уменьшения количества электронов в результате обрыва связей верхние уровни

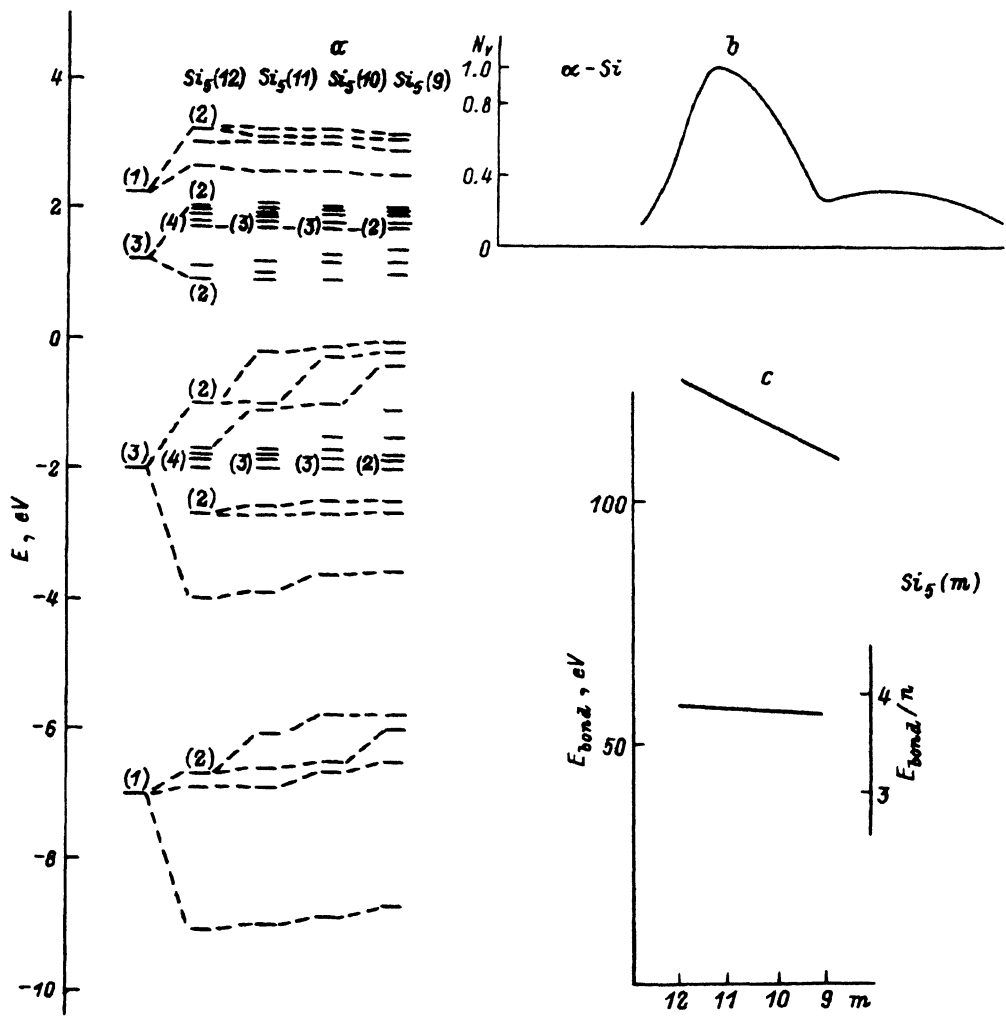


Рис. 5. Диаграмма расщеплений для молекулярных образований  $Si_5(12)$ ,  $Si_5(11)$  и  $Si_5(10)$   $Si_5(9)$  с различным числом оборванных внешних связей (а), спектр плотности состояний  $\alpha-Si$  [8] (б) и полная и удельная энергии образования (связывания) этих молекул (с).

валентной зоны оказываются полузаполненными или незаполненными. Их можно рассматривать как состояния оборванных связей. Число состояний в зоне проводимости уменьшается в соответствии с количеством оборванных связей.

В следующей части этой работы мы покажем результаты расчетов спектров плотности состояний для аморфного кремния без водорода и гидрированного аморфного кремния с оптимизированными параметрами матрицы тензора.

## Список литературы

- [1] Animalu A.O.E. Intermediate quantum theory of crystalline solids. Prentice-Hall, 1977.
- [2] Wybourne B.J. Symmetry principles and atomic spectroscopy. Wiley InterScience, 1969.
- [3] Koster G.F., Dummock J.O., Wheeler R.G., Statz H. // Properties of the thirty-two point groups, M.I.T. Press, Cambridge, Massachusetts, 1963.
- [4] Kustov E.F. // Phys. Stat. Sol. (b). 1975. V. 69. P. 79.
- [5] Kustov E.F. // Phys. Stat. Sol. (b). 1975. V. 71. P. 449.
- [6] Kustov E.F. // Phys. Stat. Sol. (b). 1977. V. 81. P. 421.
- [7] Kustov E.F., Uskova L.I. // Phys. Stat. Sol. (b). 1980. V. 102. P. 209.
- [8] Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии. М.: Мир, 1972.
- [9] Ley L. // Physics of hydrogenated amorphous silicon. Pt II // Ed. J. Joanopoulos and J. Lucovsky. Springer, 1984.

Московский энергетический институт

Поступило в Редакцию  
16 сентября 1993 г.