

Расчет электронной структуры вакансий и их компенсированных состояний в полупроводниках $A^{III}B^{VI}$

© М.А. Мехрабова[¶], Р.С. Мадатов

Институт радиационных проблем Национальной академии наук Азербайджана,
Az-1143 Баку, Азербайджан

(Получена 15 декабря 2010 г. Принята к печати 21 декабря 2010 г.)

На основе теории функций Грина и модели связывающих орбиталей определена электронная структура локальных дефектов — вакансий, а также их компенсированных состояний в полупроводниках $A^{III}B^{VI}$. Определены энергетические уровни в запрещенной зоне, вычислены изменения электронной плотности в полупроводниках GaS, GaSe, InSe с анионной и катионной вакансией и компенсацией этих вакансий. Установлено, что при компенсации вакансий атомом элемента той же подгруппы с такой же тетраэдрической координацией, ионный радиус которого меньше ионного радиуса замещенного атома, локальные уровни, образованные при введении вакансий, полностью исчезают. Показано, что этот механизм позволяет не только восстановить параметры кристалла, но и улучшить его характеристики.

1. Введение

Получение радиационно стойких материалов со стабильными электрическими и оптическими характеристиками является актуальной проблемой современной физики. Это связано с развитием ядерной энергетики, полетами в космос, экологией и т.д. Материалы в этих условиях, подвергаясь сильнейшему воздействию ионизирующего излучения, изменяют свои физические свойства, образуются радиационные дефекты. Создание способов восстановления свойств таких материалов требует изучения природы и свойств дефектов, а также причин их образований.

Цель предлагаемой работы заключается в теоретическом исследовании электронной структуры дефектных полупроводников $A^{III}B^{VI}$ и определение механизма восстановления их исходных свойств. В предлагаемой работе рассчитаны энергетические уровни локальных дефектов — вакансий и их компенсированных состояний в полупроводниках GaS, GaSe, InSe с помощью функции Грина и метода орбит связи.

Зонная структура слоистых полупроводников $A^{III}B^{VI}$ была изучена различными методами [1–5]. Влияние ионизирующего излучения на полупроводники GaSe, InSe было экспериментально исследовано авторами [6]. Природа и структура локализованных в запрещенной зоне энергетических состояний радиационных дефектов изучены еще не достаточно, представления о механизмах влияния дефектов на свойства не сформированы. В работах [7,8] теоретически исследована электронная структура кристаллов GaSe с вакансиями методами орбит связи и локализованных орбиталей. Результаты расчетов имели хорошее согласие с экспериментом.

2. Модель связывающих орбиталей

Наличие дефектов в полупроводниках приводит к локальным энергетическим дефектным состояниям обо-

рванных связей, из-за чего происходит изменение электрофизических и оптических свойств полупроводников.

Модель орбит связи является, конечно, приближенной и не объясняет многих важных особенностей тетраэдрически координированных твердых тел. Тем не менее эта модель позволяет описать сравнительно широкий набор свойств, включая свойства, зависящие от основного состояния твердого тела [9–11]. Мы описали верхние валентные зоны слоистых полупроводников GaS, GaSe, InSe, используя несколько отличающуюся форму модели орбит связи, предложенную в работе [12], и использовали волновые функции из работы [13]:

$$|\psi_0^i\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+b_i^2}} (b_i|s^i\rangle \pm |p_z^i\rangle),$$

$$|\psi_1^i\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+a_i^2}} \left(|s^i\rangle \pm \frac{a_i}{\sqrt{1+c_i^2}} (c_i|p_x^i\rangle + |p_z^i\rangle) \right),$$

$$|\psi_2^i\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+a_i^2}} \left(|s^i\rangle \pm \frac{a_i}{\sqrt{1+c_i^2}} \times \left(\frac{1}{2} c_i (\sqrt{3}|p_y^i\rangle - |p_x^i\rangle) + |p_z^i\rangle \right) \right),$$

$$|\psi_3^i\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+a_i^2}} \left(|s^i\rangle \pm \frac{a_i}{\sqrt{1+c_i^2}} \times \left(\frac{1}{2} c_i (-\sqrt{3}|p_y^i\rangle - |p_x^i\rangle) + |p_z^i\rangle \right) \right), \quad (1)$$

где

$$a_i = \sqrt{\frac{2(1+c_i^2)}{(c_i^2-2)}}, \quad b_i = \sqrt{\frac{2}{(c_i^2-2)}}. \quad (2)$$

Здесь i — соответствует аниону (a) или катиону (c).

С учетом того что в гексагональной элементарной ячейке одного слоя содержатся четыре атома — два атома Ga и два атома Se, получаются 9 валентных

[¶] E-mail: Mehrabova@mail.ru

Таблица 1. Параметры кристаллов GaS, GaSe, InSe (ε_g — ширина запрещенной зоны, d — атомные расстояния, $\varepsilon_s, \varepsilon_p$ — орбитальные потенциалы)

Полупроводник	ε_g , эВ	d_{ac} , Å	d_{cc} , Å	ε_{sc} , эВ	ε_{pc} , эВ	ε_{sa} , эВ	ε_{pa} , эВ
GaSe	2	2.42	2.58	-11.37	-4.90	-20.32	9.53
GaS	2.5	2.30	2.52	-11.37	-4.90	-20.8	-10.27
InSe	1.1	2.51	3.16	-10.12	-4.69	-20.32	-9.53

зон и 7 зон проводимости, тогда только девять валентных зон оказываются заполненными в основном состоянии кристалла. Поскольку 4s-уровня аниона можно рассматривать как уровни атомного остова из-за их почти сферической симметрии, в дальнейшем будут рассматриваться только семь верхних валентных зон. Наиболее простой путь описания верхних валентных зон состоит в образовании обычных sp^3 -гибридов на атомах катиона и аниона, которые направлены к ближайшим атомам. Связующие комбинации двух таких гибридов на соседних атомах катиона обозначим $|b_1\rangle$. Шесть других орбит связи $|b_2\rangle, \dots, |b_7\rangle$ можно образовать из оставшихся гибридов атомов катиона и 4p-орбиталей аниона, направленных к атомам катиона. Благодаря взаимодействиям орбит связи на различных узлах связи уровни изолированных связей уширяются в валентные зоны. Располагая всего семью орбитами связи, можно получить описание шести верхних валентных зон.

С этой целью образуем обычные блоховские суммы для каждой орбиты связи в семи возможных узлах связи элементарной ячейки модели одного слоя:

$$\alpha_{i,k} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=0}^{\infty} \exp ik(\mathbf{R}_l + \mathbf{r}_i) \mathbf{b}_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i + \mathbf{R}_l). \quad (3)$$

Здесь векторы \mathbf{R}_l соединяют узлы двумерной решетки Браве. Матрица гамильтониана кристалла в базисе этих блоховских сумм представляет собой 7×7 матрицу, которая распадается на два блока. Один блок относится к четным валентным зонам относительно отражения в плоскости слоя, а другой — к нечетным зонам. Типичный матричный элемент дается выражением

$$H_{ij}(\mathbf{k}) = \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)) \times \sum_{l=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_l) b_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j - \mathbf{R}_l) \hat{H} b_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) d\mathbf{r}, \quad (4)$$

где H — одноэлектронный гамильтониан для кристалла с химическим псевдопотенциалом, а векторы \mathbf{r}_i и \mathbf{r}_j соединяют центр элементарной ячейки с узлами связи [5].

В приближении ближайших соседей только пять параметров взаимодействия определяют вид матрицы гамильтониана. Два параметра относятся к энергиям связи электрона на орбите галлий-галлий и орбите галлий-селен:

$$B_1 = \int b_1 \hat{H} b_1 d\mathbf{r}, \quad B_2 = \int b_2 \hat{H} b_2 d\mathbf{r}.$$

Третий параметр описывает энергию переноса

$$B_3 = \int b_1 \hat{H} b_2 d\mathbf{r}.$$

Два оставшихся параметра характеризуют энергию переноса между двумя связями GaS, GaSe, InSe с общим анионом или катионом:

$$B_a = \int b_2 \hat{H} b_3 d\mathbf{r}, \quad B_c = \int b_2 \hat{H} b_3 d\mathbf{r}.$$

Матрица гамильтониана кристалла в модели орбит связи имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} H_{11} &= B_1, \quad H_{12} = H_{13} = H_{14} = H_{15} = H_{16} = H_{17} = H_{21} \\ &= H_{31} = H_{41} = H_{51} = H_{61} = H_{71} = B_3, \\ H_{22} &= H_{33} = H_{44} = H_{55} = H_{66} = H_{77} = B_2, \\ H_{23} &= H_{56} = B_c + B_a e^{ip}, \quad H_{24} = H_{57} = B_c + B_a e^{i(p+q)}, \\ H_{32} &= H_{65} = B_c + B_a e^{-ip}, \quad H_{34} = H_{67} = B_c + B_a e^{iq}, \\ H_{42} &= H_{75} = B_c + B_a e^{-i(p+q)}, \quad H_{43} = H_{76} = B_c + B_a e^{-iq}. \end{aligned} \quad (5)$$

В работе [5] значения параметров взаимодействия модели орбит связи B_1, B_2, B_3, B_c и B_a были определены подгонкой под фотоэмиссионные данные селенида галлия. В данной работе эти параметры были вычислены с помощью волновых функций (1). При расчетах были использованы параметры полупроводников, представленные в табл. 1.

3. Метод функции Грина

Исследование состояний вне разрешенных зон позволяет ввести понятие функции Грина. Пусть V — потенциал дефекта, создающего глубокое локализованное состояние, H_0 — гамильтониан идеального кристалла. Энергия E и волновая функция ψ глубокого центра находятся из уравнения Шредингера:

$$(H_0 + V)\psi = E\psi. \quad (6)$$

Перепишем (6) в следующем виде:

$$\psi = (EI - H_0)^{-1} V \psi, \quad \psi = G_0(E) V \psi. \quad (7)$$

Здесь I — единичный оператор, $G_0(E)$ — функция Грина. Для идеального кристалла она имеет вид

$$G_0(E) = (EI - H_0)^{-1}. \quad (8)$$

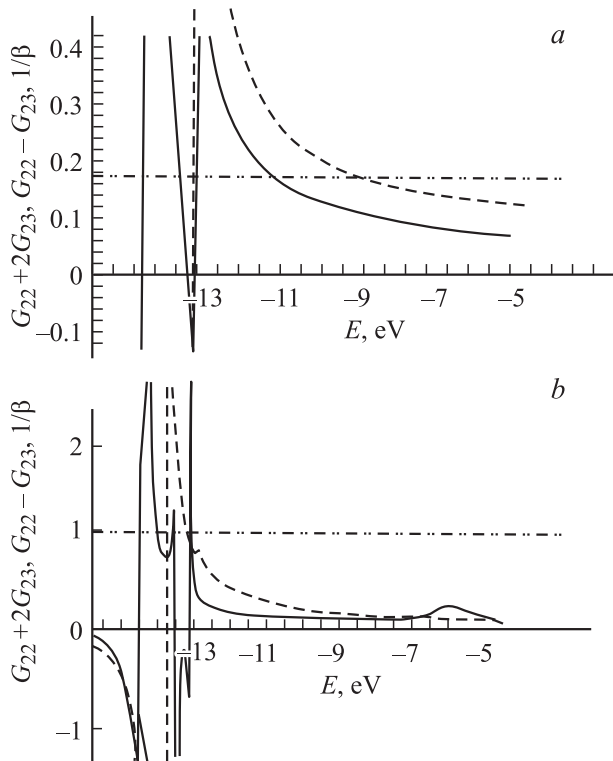


Рис. 1. Графики решения уравнения (11) в GaS: *a* — для анионной вакансии, *b* — для катионной вакансии.

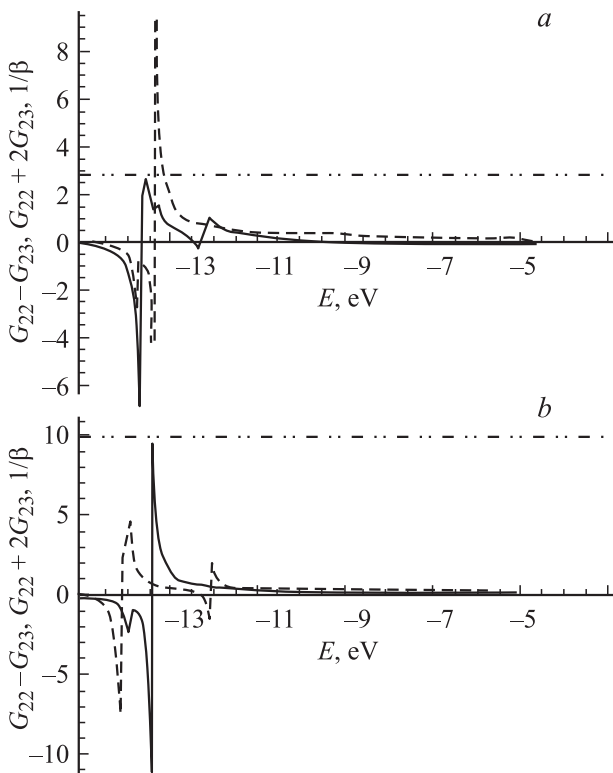


Рис. 2. Графики решения уравнения (11) в GaS: *a* — для анионного замещения GaS(Se), *b* — для катионного замещения GaS(Tl).

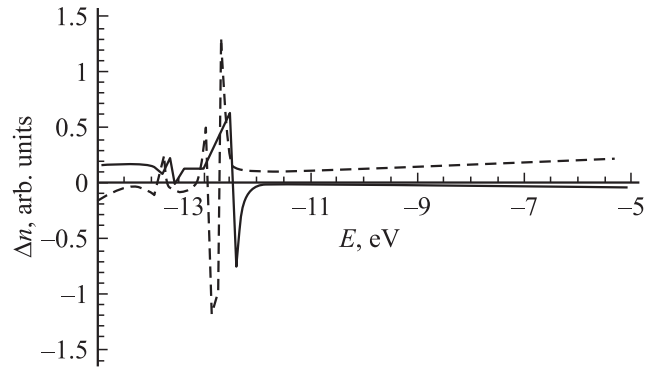


Рис. 3. Изменение плотности состояний, вызванное анионной и катионной вакансиями в GaS: пунктир — анионная вакансия, сплошная линия — катионная вакансия.

Из уравнения (7) получим

$$(I - VG_0(E))\psi = 0. \quad (9)$$

Уравнение (9) имеет решение, отличное от нуля, если

$$\text{Det}||1 - VG_0(E)|| = 0. \quad (10)$$

Чтобы найти уровни дефектов (вакансия или примесь), необходимо решить уравнение (9). Из решения этого уравнения с учетом матричных элементов для H_0 получим следующее уравнение:

$$[1 - (G_{22} - G_{23})\beta]^2 [1 - G_{11}\alpha - G_{22}\beta - 2G_{23}\beta - 3G_{12}^2\alpha\beta + G_{11}G_{12}\alpha\beta + 2G_{11}G_{23}\alpha\beta] = 0, \quad (11)$$

где

$$\alpha = B'_1 - B_1 \text{ и } \beta = B'_2 - B_2; \quad (12)$$

$$B_1 = \frac{1}{1 + b_c^2} (b_c^2 \varepsilon_{sc} + \varepsilon_{pcz})$$

$$+ \frac{1}{1 + b_c^2} (b_c^2 V_{ss\sigma} - 2b_c V_{sp\sigma} - V_{pp\sigma}), \quad (13)$$

$$B_2 = (\varepsilon_{2c} + \varepsilon_{2a})/2 - [(\varepsilon_{2c} - \varepsilon_{2a})^2/4 + v_2^2]^{1/2}, \quad (14)$$

$$\varepsilon_{2i} = (1 + a_i^2)^{-1} [\varepsilon_{si} + a_i^2 (1 + c_i^2)^{-1} (c_i^2 \varepsilon_{pix} + \varepsilon_{piz})], \quad (15)$$

$$\varepsilon_{paz} = \varepsilon_{pa} - \frac{3}{2} 0.40 \frac{\hbar^2 n^2}{m d_{ac}^2},$$

$$\varepsilon_{pcz} = \varepsilon_{pc} - 0.40 \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{3n^2}{d_{ac}^2} l + \frac{l}{d_{cc}^2} \right), \quad (16)$$

$$\varepsilon_{pix} = \varepsilon_{pi} - \frac{3}{2} 0.40 \frac{\hbar^2 l^2}{m d_{ac}^2},$$

$$a_i = \sqrt{\frac{2(1 + c_i^2)}{c_i^2 - 2}}, \quad b_i = \sqrt{\frac{2}{c_i^2 - 2}}, \quad (17)$$

$$V_{ss\sigma}(d) = -1.32 \frac{\hbar^2 l}{m d^2}, \quad V_{sp\sigma}(d) = 1.42 \frac{\hbar^2 l}{m d^2},$$

$$V_{pp\sigma}(d) = 2.22 \frac{\hbar^2 l}{m d^2}, \quad (18)$$

B_1 и B_2 — значения после возмущения. Параметры α и β вычисляются по формулам (12)–(18).

Таблица 2. Плотность состояний полупроводников $A^{III}B^{VI}$

Полупроводник	Плотность состояний	$E_a^1, \text{эВ}$		$E_c^2, \text{эВ}$		Замещение аниона (Se)		Замещение катиона (Tl)	
		запрещенная зона	валентная зона	запрещенная зона	валентная зона	запрещенная зона	валентная зона	запрещенная зона	валентная зона
GaAs	Резонансы	0.5, 0.2	0.7	0.5	0.6	0.6, 0.2		0.76, 0.86, 1.36, 2.16	
	Антирезонансы	0.4		0.6		0.6, 0.3	0.6	0.96, 1.16, 1.46, 2.16	
GaSe	Резонансы	0.66	0.15, 0.04	0.36, 0.86	2.44	0.36, 0.66, 2	2.34	0.56	2
	Антирезонансы	0.66	0.05	0.76, 0.56	2.34	0.46	2.14	0.56	2

Таблица 3. Энергетические уровни вакансий и замещений в полупроводниках $A^{III}B^{VI}$

Полупроводник	$E_a^1, \text{эВ}$			$E_c^2, \text{эВ}$		Замещение аниона	Замещение катиона	$\varepsilon_g, \text{эВ}$
	запрещенная зона	валентная зона	зона проводимости	запрещенная зона	валентная зона			
GaSe	0.36; 0.46↑	0.45	2.86; 0.56	0.76; 0.56	0.05; 0.35	N: 0.06; 0.35; 0.55; 0.75 в.з.	Tl: 0	2
GaS	0.1; 0.5↑	0.3; 0.7	2.2	0.2; 0.4; 0.6	0.5; 0.8	Se: 0.1; 0.3 в.з.	Tl: 0	2.5
InSe	0.1↓ 0.3; 0.4↑	0.2; 2.6; 2.9; 3.03; 0.7; 2.8	3.17; 1.17	0.2; 0.5; 0.6	0.3; 0.7	N: 0.326; 0.826; 0.926 — в.з.	Ga: 0.325 — в.з.	1.1

Рассматриваются четыре случая.

1. Вакансия атома аниона. При этом

$$\varepsilon'_{sa} = 0, \quad \varepsilon'_{pa} = 0.$$

Тогда $\alpha = 0$ и из уравнения (11) получим:

$$1 - (G_{22} - G_{23})\beta = 0, \quad 1 - (G_{22} + 2G_{23})\beta = 0. \quad (19)$$

Параметр β вычисляется по формулам (12)–(18). Для данного случая $\beta = 0.2$. На основе уравнений (19) построены зависимости, представленные на рис. 1, а, 5, а, 8, а. Так как β является не потенциалом, а некоторым параметром, связанным с возмущающим потенциалом V , то точки пересечения кривых не соответствуют энергиям вакансии, и найденные решения не являются положением уровней энергии вакансии или замещения. Для того, чтобы найти энергию, созданную вакансией или замещением, производится перерасчет. Значения, соответствующие точкам пересечения, следует вычитать из соответствующих собственных значений невозмущенного гамильтониана, и таким образом находить энергии вакансий в замещения.

2. Анионное замещение. Из рис. 2, а, 6, а, 9, а можно определить энергетические значения, полученные от анионного замещения. Как видно из рисунков, точки

пересечения кривых с прямой исчезают, т.е. локальные уровни в запрещенной зоне передвигаются в разрешенные зоны, что говорит о восстановлении параметров кристалла.

3. Вакансия атома катиона. При этом

$$\varepsilon'_{sc} = 0, \quad \varepsilon'_{pc} = 0.$$

Из решения уравнения (11) построены зависимости (рис. 1, б, 5, б, 8, б), из которых определяются энергетические уровни, отвечающие катионным вакансиям.

4. Катионное замещение. На рис. 2, б, 5, б, 8, б представлены зависимости, из которых определяются состояния катионного замещения.

Резонансные и антирезонансные состояния локализованных дефектов определены по графику изменения плотности состояний. Изменение плотности состояний вычислили по формуле

$$\Delta n = \frac{1}{\pi} \frac{d\delta(E)}{dE}, \quad (20)$$

где

$$\delta(E) = -\text{arctg}(\text{Im } G_0 / \text{Re } G_0). \quad (21)$$

Учитывая матричные элементы G_{22} , G_{23} и выражение $\delta(E)$ из (20), получим значения для резонансных и антирезонансных состояний (рис. 3, 4, 7). Значения представлены в табл. 2.

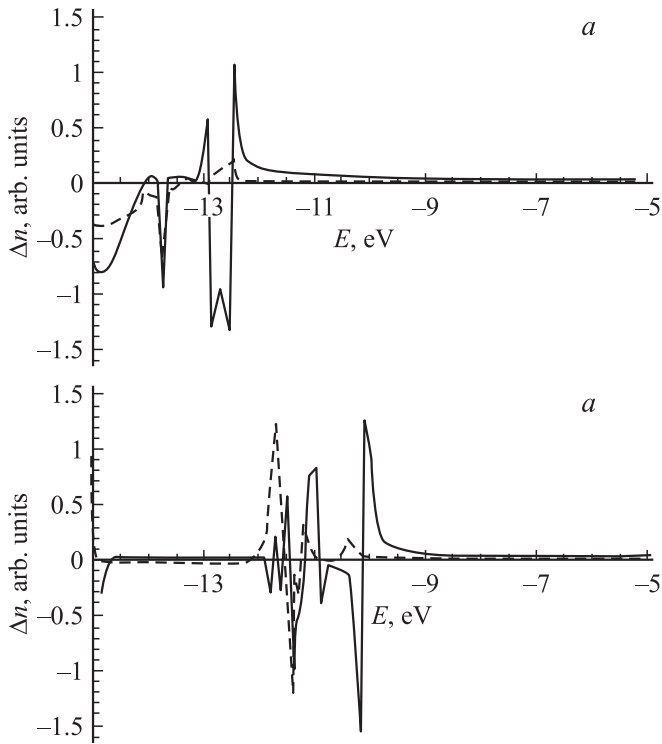


Рис. 4. Изменение плотности состояний, вызванное анионным и катионным замещениями в GaS: *a* — GaS(Se), анионное замещение, *b* — GaS(Tl), катионное замещение.

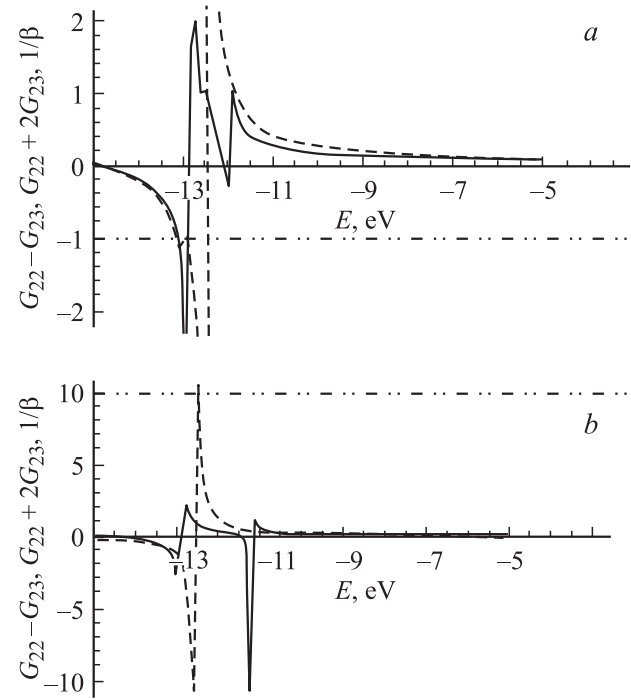


Рис. 6. Графики решения уравнения (11) в GaS: *a* — для анионного замещения GaSe(N), *b* — для катионного замещения GaSe(Tl).

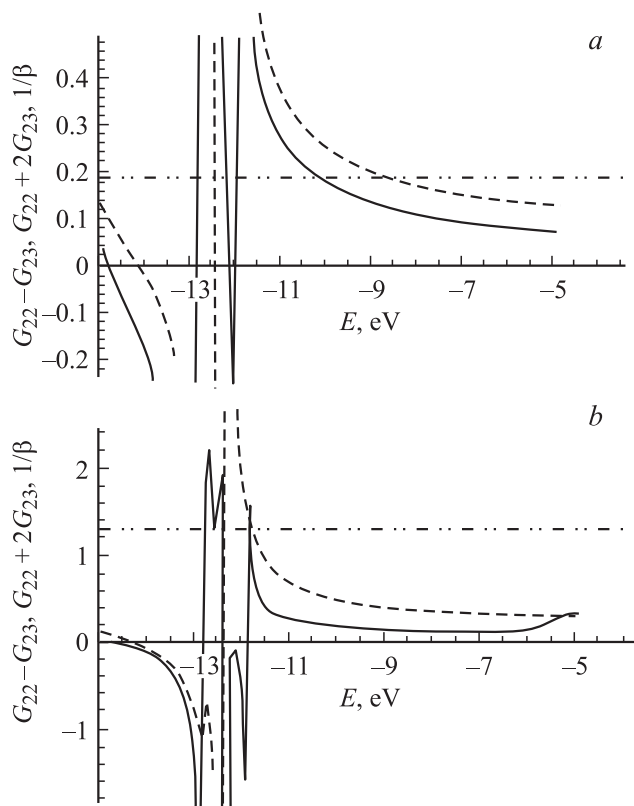


Рис. 5. Графики решения уравнения (11) в GaS: *a* — для анионной вакансии, *b* — для катионной вакансии.

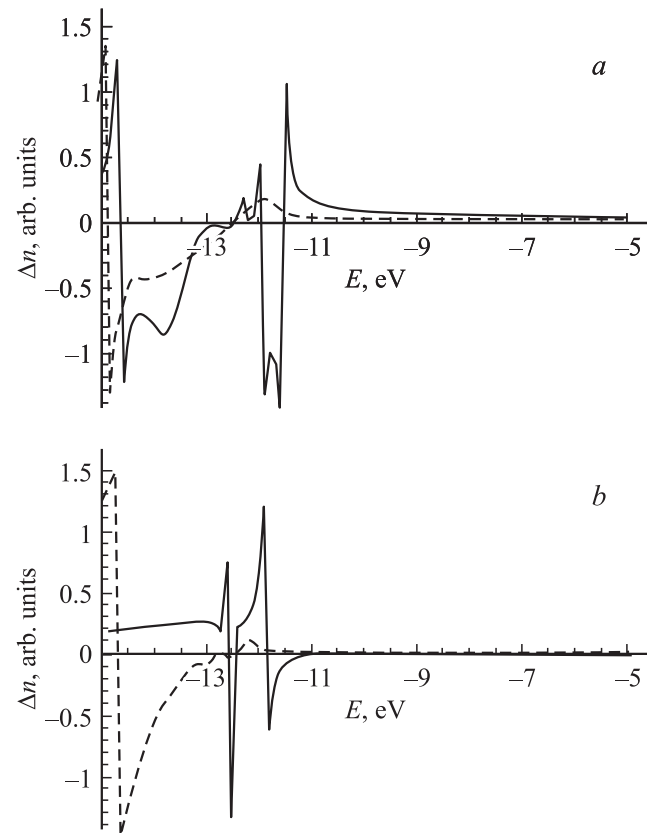


Рис. 7. Изменение плотности состояний, вызванное анионной и катионной вакансиями в GaSe: *a* — для анионной вакансии, *b* — для катионной вакансии.

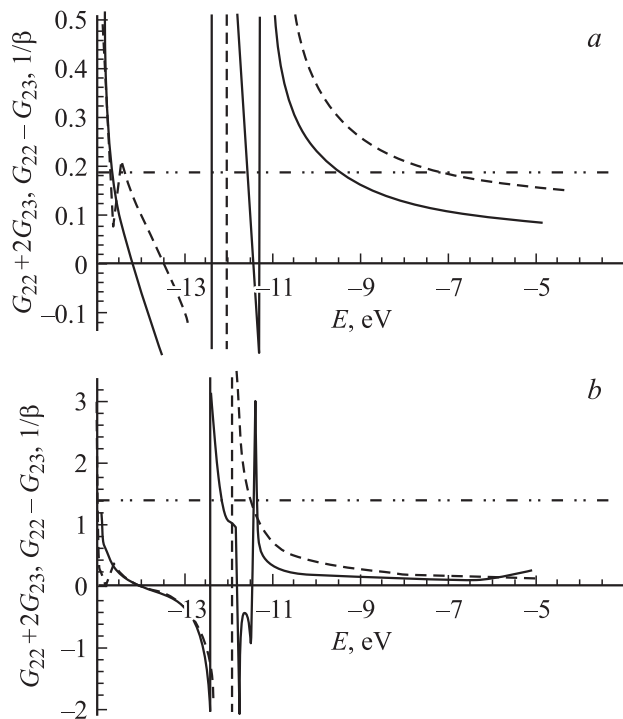


Рис. 8. Графики решения уравнения (11) в InSe: *a* — для анионной вакансии, *b* — для катионной вакансии.

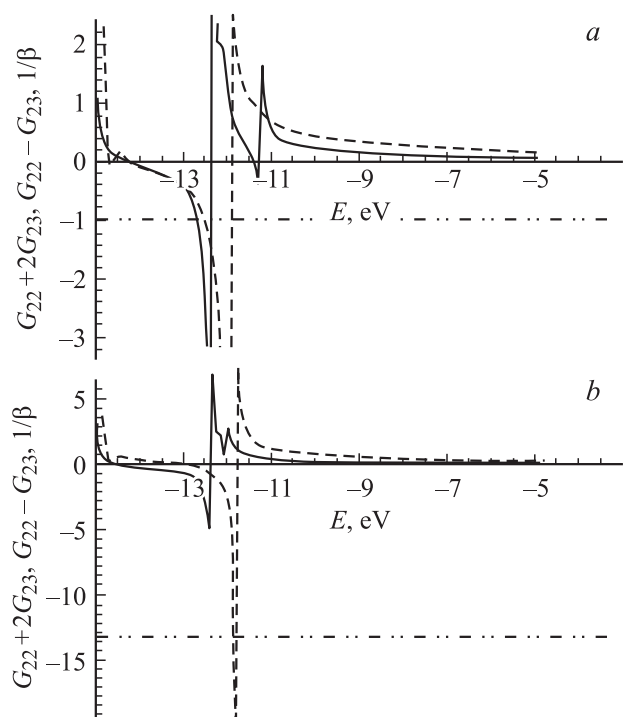


Рис. 9. Графики решения уравнения (11) в InSe: *a* — для анионного замещения InSe(N), *b* — для катионного замещения InSe(Ga).

4. Результаты и обсуждение

Вычислены энергетические уровни в полупроводниках GaS, GaSe, InSe для вакансий аниона, катиона и для ани-

онного и катионного замещений. Анионная и катионная вакансии в этих полупроводниках приводят к глубоким энергетическим уровням в запрещенной зоне, а также к уровням в валентной зоне и в зоне проводимости. Эти значения приведены в табл. 3. По расчетным данным, в кристаллах GaS для катионной вакансии уровни энергий локальных дефектов относительно потолка валентной зоны в запрещенной зоне составляют 0,2, 0,4 и 0,6 эВ, для анионной вакансии 0,1 и 0,5 эВ, в кристаллах GaSe для катионной вакансии 0,6 и 0,8 эВ, для анионной вакансии 0,4 и 0,5 эВ, в кристаллах InSe для катионной вакансии 0,2, 0,5 и 0,6 эВ, для анионной вакансии 0,3 и 0,4 эВ.

Установлено, что при компенсации вакансий атомом элемента той же подгруппы, с такой же тетраэдрической координацией, ионный радиус которого меньше ионного радиуса замещенного атома, например при замещении атомом П, катионная вакансия (рис. 2, *b*, 6, *b*), локальные уровни, образованные от вакансии, полностью исчезают. Таким образом, катионы с малым ионным радиусом и тетраэдрической координацией, замещающиеся в дефектные полупроводники, восстанавливают параметры кристалла. Атомы с другой координацией и большим ионным радиусом создают дополнительные дефекты и локальные уровни. Локализованные уровни от вакансий исчезают не полностью. Пользуясь этим механизмом, можно не только восстановить прежние параметры кристалла, но и улучшить его характеристики.

Полученные теоретические результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными. Выявление локальных уровней, введенных γ -облучением в монокристаллы GaS, проводилось в [14] с помощью исследований фотопроводимости (ФП) и фотолюминесценции (ФЛ) в области длин волн 0,4–1,0 мкм при температурах 120 и 300 К. Авторы определили энергетическое положение уровней прилипания для дырок, которые составляли 0,23 и 0,40 эВ.

Уровни от вакансий Ga и S и примесные уровни для *n*- и *p*-типов GaS, легированных натрием и йодом, были определены в работе [15]. Донорные уровни для *n*-типа GaS составляли 0,57 и 0,85 эВ ниже дна зоны проводимости, а акцепторный уровень — 0,65 эВ выше потолка валентной зоны. Для *p*-типа GaS акцепторные уровни составляли 0,9 и 0,65 эВ от потолка валентной зоны, донорный уровень располагался на 0,57 эВ ниже дна зоны проводимости.

В работе [16] авторы зарегистрировали локальные уровни энергии в GaSe, лежащие в запрещенной зоне на 0,2 и 0,8 эВ выше потолка валентной зоны. Обнаруженный в спектре фотолюминесценции GaSe [17] эмиссионный пик при 1,45 эВ соответствует энергетическому уровню, лежащему на 0,55 эВ выше потолка валентной зоны.

Авторы в работе [6] определяли уровни в образцах GaSe *p*-типа после облучения γ -квантами дозой 25,8 Ки/кг, нейтронами дозой $> 3,5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ и электронами с энергией 6 МэВ. В первом случае наблюдали уменьшение коэффициента Холла (R_H), при

котором энергетическое положение акцепторного уровня составляло $E_v + 0.1$ эВ. С ростом дозы γ -квантов до $2.58 \cdot 10^4$ Ки/кг значение R_H возрастало, одновременно с этим наблюдалось увеличение энергии ионизации вводимого облучением дефекта. Подобное поведение R_H возможно в случае, когда вводимые близкие френкелевские пары с ростом дозы облучения рекомбинируют. Во втором случае наблюдалось незначительное уменьшение величины R_H . При этом энергетическое положение акцепторного уровня изменялось от 0.23 до 0.33 эВ. В третьем случае после облучения электронами, плотность которого составляла $\Phi = 10^{13}$ см $^{-2}$, появлялся уровень с $E_v + 0.2$ эВ, а также мелкие акцепторные уровни с энергией ионизации $E_v + 0.065$ эВ с концентрацией $N_a = 5 \cdot 10^{11}$ см $^{-3}$.

В работе [18] авторы исследовали влияние малых доз γ -облучения на спектры инфракрасной и ультрафиолетовой фотопроводимости *n*-InSe. Зарегистрированы спектры краевой фотопроводимости (ФП) при различных дозах облучения, определены максимумы ФП при энергиях квантов 1.26 и 1.28 эВ, что соответствует энергетическим уровням, лежащим на 0.16 и 0.18 эВ выше потолка валентной зоны.

Таким образом, полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными и разработанная методика позволяет варьировать основные физические свойства слоистых материалов путем легирования (радиационного, термического и т.д.), заранее выбирая примесный атом.

Список литературы

- [1] G. Fischer. Helv. Phys. Acta, **36**, 317 (1963).
- [2] H. Kamimura, K. Nakao. J. Phys. Soc. Jpn., **24**, 1313 (1968).
- [3] F. Bassani, G.P. Paravicini. Nuovo Cimento B, **50**, 95 (1967).
- [4] M. Schluter. Nuovo Cimento B, **13**, 313 (1973).
- [5] В.К. Баженов, Д.Й. Марваков, А.Г. Петухов. ФТП, **12**, 1442 (1978).
- [6] Г.Б. Абдуллаев, А.З. Аббасова, А.М. Горшков. ФТП, **15**, 1323 (1981).
- [7] М.А. Мехрабова, З.А. Джахангирли. Изв. НАНАз, **5**, 180 (2005).
- [8] З.А. Джахангирли, М.А. Мехрабова. Изв. вузов. Физика (Томск), **11**, 8 (2006).
- [9] S. Ciraci. Phys. Status Solidi B, **70**, 689 (1975).
- [10] S. Pantelides, W. Harrison. Phys. Rev. B, **11**, 3006 (1975).
- [11] S.T. Pantelides. Phys. Rev. B, **13**, 2667 (1976).
- [12] W. Harrison. Phys. Rev. B, **8**, 4487 (1973).
- [13] A. Nakanishi, T. Matsubara. J. Phys. Soc. Jpn., **51**, 3219 (1982).
- [14] Р.С. Мадатов, А.И. Наджафов и др. Изв. РАН. Неорг. матер., **44**, 1 (2008).
- [15] R.M.A. Lieth, F. van der Maesen. Phys. Status Solidi A, **10**, 73 (1972).
- [16] G. Micocci, P. Siciliano, A. Tepore. J. Appl. Phys., **67**, 6581 (1990).
- [17] S. Shigetomi, T. Ikari, N. Nishimimura. Phys. Status Solidi A, **185**, 341 (2001).
- [18] М. Ланно, Ж. Бургуэн. *Точечные дефекты в полупроводниках. Теория* (М., Мир, 1981).

Редактор Л.В. Беляков

Calculation of electronic structure of vacancies and their compensated stated in semiconductors A^{III}B^{VI}

M.A. Mehrabova, R.S. Madatov

Institute of Radiation Problems,
Azerbaijan National Academy of Sciences,
Az-1143 Baku, Azerbaijan

Abstract The electronic structure of local defects — vacancies as well as their compensated states in semiconductors A^{III}B^{VI} have been determined on the basis of the theory of Green function and bond orbital model. Band gap energy levels have been determined; change of electronic density in semiconductors GaS, GaSe, InSe with anion and cation vacancies and compensation of these vacancies has been calculated. It has been established that at compensation of vacancies by the atom of the element in the same subgroup with the same tetrahedral coordination the ionic radius of which is less than the ionic radius of the replaces atom, the local levels formed at compensation of vacancies completely disappear. Using this mechanism it is possible to restore the parameters of the crystal and also to improve its characteristics.