

ЛЕНИНГРАДСКИЙ ОРДЕНА ЛЕНИНА И ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ  
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. А.А.ЖДАНОВА

A 85  
1948

На правах рукописи

ГАДИЯК ГРИГОРИЙ ВАСИЛЬЕВИЧ

УДК 538.915  
538.971

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ  
СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ И НАРУШЕНИЙ  
РЕШЕТКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

01.04.07 - физика твердого тела

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Ленинград, 1983

Работа выполнена в Институте теоретической и прикладной механики  
СО АН СССР

О ф и ц и а л ь н ы е о п п о н е н т ы :

1. член-корр. АН СССР, профессор  
В.Е.Панин
2. доктор физико-математических наук, профессор  
А.Г.Жилич
3. доктор физико-математических наук, профессор  
А.Н.Орлов

В е д у щ е е п р е д п р и я т и е -

Институт химической физики АН СССР  
(г. Москва)

Защита диссертации состоится " \_\_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 1984 г.

на заседании специализированного совета Д:063:57:32 при Ленинград-  
ском ордена Ленина и ордена Трудового Красного Знамени государ-  
ственном университете им. А.А.Жданова

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке им. Горького  
университета

Автореферат разослан " \_\_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 1984 г.

Ученый секретарь  
специализированного совета

Соловьев В.А.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Диссертация посвящена изучению электронных и энергетических характеристик приповерхностных слоев и точечных нарушений в полупроводниках и диэлектриках. Решение поставленных задач осуществлялось путем построения физической модели процесса и реализации ее методом численного моделирования. Результаты расчетов сопоставляются с имеющимися экспериментальными данными.

Актуальность работы. Создание новой элементной базы для будущих электронно-вычислительных машин (ЭВМ), интегральных схем и других элементов современного приборостроения невозможно без развития теоретических моделей физических явлений, происходящих в твердом теле и на его поверхности. Данные вопросы тесно соприкасаются с проблемой ускорения химических процессов на поверхности твердого тела (поисками новых эффективных катализаторов для химической промышленности, ростом совершенных кристаллов и т.д.); проблемой окисления материала; задачей старения материала в результате воздействия космического излучения и химически активных веществ в условиях космоса; созданием высокоэффективных аэрозолей для решения прикладных задач; разработкой высокодисперсных материалов, обладающих во многих отношениях уникальными свойствами (кластерные среды). Исследование экситонных систем и примесных центров интересно также с точки зрения моделирования астрофизических объектов, например, пульсаров и белых карликов. Решение поставленных задач путем проведения модельных численных экспериментов является примером нового направления, получившего в основном развитие за рубежом - вычислительной физики. Численный эксперимент обладает рядом преимуществ по сравнению с реальным физическим экспериментом - это экономичность, возможность реализовать ситуации, недоступные современным экспериментальным установкам, возможность более детального изучения процесса на более "элементарном" уровне, чем в реальном эксперименте. В последние годы численный эксперимент зачастую предваряет реальный эксперимент, делая его менее дорогостоящим и более эффективным.

Цель настоящей работы - разработка квантовомеханических, квантостатистических и молекулярно-динамических методов для исследования фазовых переходов в двумерных системах - монослои (пример адсорбированных слоев со слабой связью и электроны над жидким гелием,

степень покрытия  $\theta = 1$ ); изучение энергетике одиночной хемосорбции некоторых атомов и молекул на поверхности идеальных граней германия и никеля (степень покрытия  $\theta \ll 1$ ); моделирование перестройки грани (100) германия и изучение электронных свойств идеальных и неидеальных граней (различные типы ступеней) кремния; моделирование точечных дефектов в алмазоподобных кристаллах и поиск методов определения параметров потенциалов межатомного взаимодействия в твердых телах, построение уравнения состояния и других термодинамических свойств кристалла в сверхсильном магнитном поле и при сверхвысоких давлениях, а также электронных и энергетических свойств одно- и двухэлектронных экситонов и примесных центров в сильном магнитном поле. Разработан пакет программ квантовой механики и молекулярной динамики для решения нелинейных и нестационарных задач.

**Научная новизна.** В работе впервые в квантостатистической модели учтено внешнее сильное магнитное поле<sup>\*)</sup>, в двух предельных случаях  $1 \ll B \ll z^{4/3}$  и  $B \gg z^{4/3}$  (без внешнего давления), получены уравнения и их численное решение для некоторых частных случаев. Предложена и реализована теория возмущения для решения одно- и двухэлектронных экситонных и биэкситонных систем в сильном магнитном поле. На основе единого подхода проведено систематическое исследование фазовых переходов в двумерных системах с тремя типами потенциального взаимодействия: кулоновским, дипольным и леннард-джонсовским, что позволило обнаружить гексатическую фазу в системе с кулоновским законом взаимодействия. Для построения термодинамики и кривых химического равновесия атомов или молекул при их адсорбции на поверхности германия и никеля получены электронные, энергетические, зарядовые, геометрические и популяционные характеристики некоторых систем, а также потенциалы взаимодействия атомов и молекул с идеальными гранями (111) и (100) германия и никеля. Показана однозначная связь координаты атома на поверхности или в объеме с числом поверхностных состояний (ПС) в запрещенной зоне. В случае кремния обнаружены дефекты нового типа - ориентационные (полувакансия и пара полувакансий).

**Практическая ценность.** Разработанные в диссертации методы решения квантовомеханических и молекулярно-динамических задач могут быть использованы в институтах и конструкторских бюро, разрабатывающих приборы и аппараты новой техники специального назначения.

Ряд разработанных программ внедрен в Институтах Сибирского отделения<sup>\*)</sup> Магнитное поле измеряется в единицах  $B_0 = \frac{e^2 \cdot cm^2}{h^3} = 2.35 \cdot 10^9$  Гс.



ления, а также за его пределами.

Корреляционный и автокорреляционный анализ двумерных систем, выполненный для систем с разного типа взаимодействием, от мягкого до жесткого, является исходным материалом для построения более простых феноменологических теорий фазовых переходов. Результаты расчетов могут быть использованы при теоретических и экспериментальных исследованиях физико-химических процессов, протекающих на поверхности и в объеме алмазоподобных полупроводников. Электронные спектры и моменты электронной плотности для одно- и двухэлектронных экситонных и биэкситонных систем, а также уравнения состояния вещества в сильном магнитном поле могут быть использованы для объяснения экспериментальных результатов по поглощению, проводимости полупроводников, а также для описания динамики и излучения белых карликов и пульсаров.

Надежность результатов обоснована проверкой метода и алгоритма расчета с аналитическими решениями, а также сравнением с имеющимися в литературе расчетными или экспериментальными результатами.

Автор защищает

1. Результаты численных экспериментов в двумерных системах с разного сорта потенциалами взаимодействия (адсорбционные слои со слабой связью с подложкой).

2. Результаты расчетов электронных спектров идеальных и неидеальных поверхностей ковалентных кристаллов, энергии адсорбции атомов и молекул на идеальных гранях (111) и (100) никеля и германия.

3. Расчеты спектров и некоторых моментов волновой функции для примесных центров, экситонов и биэкситонов с одним или двумя электронами в сильном магнитном поле, диссоциацию  $ex_2$  и появление молекул  $ex_2$  и  $ex_2^+$  с новым типом связи, обнаружение дефектов ориентационного типа в кремнии.

Апробация работы. Основные результаты докладывались на ряде всесоюзных и международных конференций и семинарах в научных институтах Академии наук СССР, Болгарии, Чехословакии. В последние годы работа докладывалась: на III совещании по радиационным нарушениям (Новосибирск, 1973); на II (Ленинград, 1976), У (Кривой Рог, 1977), XIУ (Ташкент, 1981) постоянном Всесоюзном семинаре по моделированию радиационных и других дефектов на ЭВМ; на II и III семинарах по физической химии поверхности полупроводников (Новосибирск, 1975, 1977); на VI Всесоюзном совещании по физике поверхности (Киев, 1977); на IV Всесоюзном совещании по квантовой

химии (Новосибирск, 1978); на УІ Международной конференции по атомной физике (Рига, 1979); на Всесоюзной конференции по теории атомов и молекул (Вильнюс, 1979); на Всесоюзной конференции по теории атомов (Воронеж, 1980); на У и УІ Всесоюзной школе по моделям механики сплошной среды (Рига, 1979, Алма-Ата, 1981); на I, II и III Всесоюзных школах по физике, химии и механике поверхности (Черноголовка, 1979; Чегет, 1981; Ташкент, 1983); на ІУ Всесоюзной школе-семинаре по физике поверхности полупроводников (Ленинград, 1979); на I, II, III Всесоюзном семинаре по уравнениям состояния вещества в экстремальных условиях (Нальчик, 1978, 1980, 1982); на УІІ Всесоюзном симпозиуме по электронным процессам на поверхности полупроводников и границе раздела полупроводник-диэлектрик (Новосибирск, 1980); на ІУ Международном симпозиуме по квантовой теории адсорбции и катализа (Москва, 1981); на I Всесоюзном симпозиуме по теории сверхплотных небесных тел (Ереван, 1980); на Всесоюзном семинаре по теории функционала плотности и ее приложениям в теории квантовых систем (Чимкент, 1982); на семинаре по электронным процессам в двумерных системах (Новосибирск, 1982); на семинарах отдела вычислительной физики в Институте теоретической и прикладной механики СО АН СССР (предс. академик Н.Н.Яненко); на семинаре в Институте гидродинамики СО АН СССР (предс. член-кор. АН СССР В.М.Титов); на семинарах в Институте физики полупроводников СО АН СССР (предс. член-кор. АН СССР А.В.Ржанов, предс. профессор Л.С.Смирнов, предс. профессор А.В.Чаплик); на семинаре теоретического отдела Института ядерной физики СО АН СССР (предс. профессор В.Г.Зелевинский); на объединенном семинаре секции квантовой химии СО АН СССР (предс. член-кор. АН СССР К.И.Замараев); на семинаре теоретического отдела физического института АН СССР им. П.Лебедева (предс. академик В.Д.Гинзбург); на семинаре теоретического отдела Института высоких температур АН СССР (предс. д.ф.-м.н. И.Т.Якубов); на семинаре в Институте электрохимии АН СССР (предс. д.х.н. В.Е.Казаринов); на семинаре теоретического отдела квантовой химии в Институте физической химии и электрохимии ЧСАН (г. Прага) (предс. доктор М.Томашек); на семинаре в Институте механики и биомеханики БАН (предс. профессор Д.Запryanов); на семинаре отдела твердого тела Института ядерной физики БАН (предс. академик Х.Я.Христов); на семинаре квантовой химии Высшей технической школы (г.Братислава) (предс. доктор П.Пеликан); на кафедре статистической физики ЛГУ

(предс. профессор Ф.М.Куни); на кафедре физики металлов Ленинградского политехнического института (предс. профессор В.А.Степанов).

Публикации. Содержание работы отражено в 42 публикациях.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы. Объем диссертации 450 страниц текста, который включает 100 рисунков, 30 таблиц и 595 ссылок на литературные источники.

### СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обосновывается выбор темы, указаны основные трудности и проблемы, возникающие при решении задач физики твердого тела и физики поверхности твердого тела, сформулированы цели и задачи исследования.

Глава I. Является теоретической, в ней сформулированы основные методы и приближения для решения уравнений квантовой, квантостатистической и классической механики, дано обоснование и вывод уравнений. Она состоит из трех параграфов, которые посвящены квантовым методам решения уравнения Шредингера, статистической модели электронного газа (квазиклассическая модель) и классической механике - методу молекулярной динамики.

Первый параграф начинается с краткого рассмотрения методов решения многоцентрового и многоэлектронного уравнения Шредингера. Рассмотрены основные квантохимические методы ЛКАО-типа в кластерном приближении. Функционал электронной энергии для замкнутой оболочки в приближении Рутана имеет вид

$$E(P) = \sum_{\mu\nu} P_{\mu\nu} \left( H_{\mu\nu} + \frac{1}{2} G_{\mu\nu} \right), \quad (I)$$

где  $N$  - число вещественных базисных функций (атомных орбиталей),  $P_{\mu\nu}$ ,  $H_{\mu\nu}$ ,  $G_{\mu\nu}$  - матричные элементы матрицы плотности гамильтониана остова, кулоновских и обменных интегралов в базисе АО.

Частным случаем уравнений Рутана являются уравнения расширенного метода Хюккеля (РМХ) (итеративный вариант) и уравнения метода ПЦДП. В последнем случае отсутствует обменное взаимодействие, включено электрон-электронное взаимодействие, но число вычисляемых кулоновских интегралов резко сокращено по сравнению с методом Рутана, где их число  $\sim N^4$ , а в методе ПЦДП -  $\sim N^2$ . Данное обстоятельство позволяет использовать метод ПЦДП для расчета кластеров, содержащих несколько десятков атомов, что оказывается достаточным



для воспроизводства некоторых локальных свойств твердого тела. Параметризация данных полуэмпирических методов является важной составной частью общей задачи расчета некоторых свойств твердого тела.

Метод  $X_{\alpha}$  является другим полуэмпирическим методом, как и рассмотренные выше методы РМХ и ШЦП, но с меньшим числом эмпирических параметров. В методе сочетается использование аналитического и численного базиса. Функционал энергии в этом методе (функционал электронной плотности)  $E(\rho)$  имеет вид

$$E = \sum_{i=1}^n n_i \epsilon_i - \frac{1}{2} \int \frac{\rho(r)\rho(r') d\vec{r} d\vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \\ + \frac{3}{4} \alpha \left[ \frac{3}{8\pi} \right]^{1/3} \int \rho^{4/3} d\vec{r} + \frac{1}{2} \sum_{\beta, \gamma}^M \frac{Z_{\beta} Z_{\gamma}}{|\vec{R}_{\beta} - \vec{R}_{\gamma}|}, \quad (2)$$

где  $n_i$  - числа заполнения,  $\rho(r)$  - электронная плотность,  $\alpha$  - эмпирический параметр. Последнее слагаемое в (2) отвечает взаимодействию между  $M$  ядрами системы, а предпоследнее обусловлено обменным взаимодействием. В методе  $X_{\alpha}$ -РВ пространство интегрирования разбивается на ячейки, содержащие особые точки потенциала. В каждой ячейке строятся решения уравнения, по ним строится матрица рассеяния  $T$ . В работе предлагается способ выбора радиуса атомных сфер (одного из эмпирических параметров метода  $X_{\alpha}$ -РВ). На примере расчета молекулы  $Ge_2$  продемонстрировано, что выбор этих параметров существенно влияет на результаты.

Метод рекурсий является примером приближения сильной связи. Метод предназначен для расчета локальной плотности электронных состояний  $\rho(\epsilon)$  на атоме с помощью матричных элементов функции Грина

$$\rho(\epsilon, \vec{R}_{\alpha}) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\Delta \rightarrow 0} \text{Im} G_{\alpha\alpha}(\epsilon + i\Delta), \quad (3)$$

где  $\vec{R}_{\alpha}$  - координата атома  $\alpha$ ,  $\Delta$  - малое положительное число.

Метод состоит из 2 этапов. На первом - находятся коэффициенты рекурсии  $\{a_i, b_i\}$  (коэффициенты трехдиагонализированной матрицы гамильтониана), а на втором этапе - определение плотности электронных состояний с помощью непрерывной дроби.

Постановка краевого условия является неотъемлемой частью всех кластерных приближений, используемых для расчета поверхности или нарушений решетки. Однако кластеры являются не только идеализацией расчетных схем, но физической реальностью - составной частью газовых, жидких или кристаллических сред. Богатый экспериментальный материал, большой опыт расчета дефектов поверхности свидетель-



ствуют в пользу локальности явления хемосорбции или образования дефекта. Учет 4-5 координационных сфер оказывается достаточным, чтобы воспроизвести зарядовые состояния, энергетiku, порядки связи и другие величины на центральном атоме кластера.

Особое внимание уделено выбору начального приближения. В методе  $X_{\alpha}$ -РВ начальный потенциал в атомных сферах подбирался с учетом влияния оболочечных эффектов. Для ускорения сходимости процесса к решению был разработан ряд приемов, среди которых демпфирование матрицы плотности или потенциала в атомных сферах, пересчет матрицы плотности с помощью метода сдвига уровней.

Во втором параграфе рассматривается статистическая модель для описания электронной подсистемы в атомах, молекулах или кластерах. Функционал энергии электронной системы  $E[\rho]$  имеет с точностью до членов  $O(\hbar^4)$  следующий вид:

$$E = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} \int \rho^{5/3} d\tau + \int V_a \rho d\tau + \frac{1}{2} \int \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\tau d\tau' - \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{2/3} \int \rho^{4/3} d\tau + \frac{1}{72} \int d\tau \frac{(\nabla\rho)^2}{\rho} + O(\hbar^4). \quad (4)$$

Включение градиентной поправки  $\int \frac{(\nabla\rho)^2}{\rho} d\tau$  в функционал (4) приводит к появлению связи в молекулярных системах. Варьируя функционал (4) при условии сохранения полного числа электронов, получим уравнение для функции  $\sqrt{\rho}$ , по своему виду похожее на уравнение Шредингера. Для решения полученного уравнения предлагается метод, аналогичный методу  $X_{\alpha}$ -РВ. Сложность точного вариационного расчета можно обойти, воспользовавшись приближенным представлением молекулярной электронной плотности в виде суперпозиции плотностей свободных атомов

$$\rho(\vec{r}) = \sum_a \rho_a(\vec{r}). \quad (5)$$

Подстановка выражения (5) в (4) позволила вычислить энергию и длину связи ряда молекул и кластеров.

Используя полеву технику, разработанную Д.А.Киржницем (1963), в работе получены выражения для плотности кинетической и обменной энергии, электронной плотности в случае сильного магнитного поля В. Окончательное выражение для плотности кинетической энергии

$$E_k = \frac{3}{20} (3\pi^2)^{2/3} \left\{ (2\rho_+)^{5/3} + (2\rho_-)^{5/3} \right\} + \frac{B}{2} (\rho_+ - \rho_-) + \frac{1}{72} \left[ \frac{(\nabla\rho_+)^2}{\rho_+} + \frac{(\nabla\rho_-)^2}{\rho_-} \right] - \frac{1}{24} \Delta(\rho_+ + \rho_-) - \frac{B^2}{768} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \left\{ (2\rho_+)^{1/3} \left[ \frac{g(\vec{r}_1, \vec{\nabla})\rho_+}{\rho_+} - 12 \right] + (2\rho_-)^{1/3} \left[ \frac{g(\vec{r}_1, \vec{\nabla})\rho_-}{\rho_-} - 12 \right] \right\}, \quad (6)$$

где  $\rho_{\pm}$  - плотность электронов со спином против и по полю,  $\vec{r}_1$  - компонента пространственного вектора  $\vec{r}$ , перпендикулярного магнитному полю  $\vec{B}$ . Линейное по полю  $\vec{B}$  слагаемое учитывает своеобразный электронный парамагнетизм, а квадратичное по полю слагаемое связано с диамагнитными эффектами. Оно возникает только при учете квантовых поправок и имеет квантовую природу. В квазиклассическом приближении отсутствует анизотропия в распределении электронной плотности (впервые эта модель была предложена Ю.Е.Дозови-ком, Л.Н.Лабзовским, 1974), учет квантовой поправки (градиентной) привел к анизотропии в распределении электронной плотности. Область применимости квазиклассической модели можно получить, если рассмотреть квазиклассические параметры  $\xi_1$  и  $\xi_2$ :

$$\xi_1 = \left(\frac{d}{\ell}\right)^2 \sim Z^{-2/3} \quad \text{и} \quad \xi_2 = \left(\frac{d}{r_L}\right)^2 \sim \left(\frac{B}{Z^{4/3}}\right)^2, \quad (7)$$

где  $\ell$  - размер атома  $\sim Z^{-1/3}$ ,  $r_L$  радиус Лармора,  $r_L \approx \frac{v}{B} \sim \frac{Z^{2/3}}{B}$ ,  $d$  - среднее расстояние между электронами. Условие применимости квазиклассики требует  $\xi_1 \ll 1$  и  $\xi_2 \ll 1$ , откуда следует

$$1 \ll B \ll Z^{4/3} \quad (8)$$

Электроны в магнитном поле можно рассматривать не только как классические частицы, но и как квантовые, подчиняющиеся квантованию Ландау. Проведя соответствующие вычисления, можно получить выражения для плотности кинетической энергии и электронной плотности. Применимость полученных выражений следует из условия справедливости статистического описания системы, т.е. должно быть велико число заполненных состояний  $N_{||}$  для движения вдоль поля и поперек поля  $N_{\perp}$ . Так как  $N_{\perp} \sim B\ell^2$ ,  $N_{\perp} \cdot N_{||} = Z$  (условие нормировки) и  $N_{\perp} \gg 1$  и  $N_{||} \gg 1$ , то получим

$$Z^{4/3} \ll B \ll Z^3. \quad (9)$$

Условие применимости (9) было получено Б.Б.Кадомцевым для более простой модели (все электроны расположены на нижнем уровне Ландау). Рассмотренные квантовая и классическая модели были обобщены на случай произвольных температур  $T$ . В последнем случае просто вычисляются все необходимые термодинамические функции, т.е. строится замкнутая термодинамика системы.

В третьем параграфе рассматриваются классические подходы к задаче о прямом (причинном) моделировании физических процессов.

В основе метода лежит решение классических уравнений движения для ансамбля взаимодействующих  $N$  частиц. Как и в квантовом случае, моделирование осуществляется на конечном числе частиц. В работе сделан анализ возможных постановок краевых условий, а также сформулированы условия применимости той или иной постановки граничных условий. В случае кремния решена также задача о моделировании эмпирического потенциала взаимодействия. Сформулированы области применимости эмпирических констант, задающих некоторые аналитические выражения для потенциала.

Глава II посвящена аналитическому и численному исследованию двумерных систем на основе разработанных в I главе методов, алгоритмов и программ. В кратком введении к главе дана характеристика существующих в природе двумерных кристаллических систем с непрерывной группой симметрии. К ним следует отнести адсорбционные слои, пленки жидкого гелия, свободные двумерные кристаллы - пленки, смектические кристаллы, электронный кристалл и т.д. В последнем случае возникло целое направление из-за многих приложений в области электроники (напыление электронов на поверхность жидкого гелия или твердого молекулярного водорода, инверсионные слои в МДП-структурах и т.д.). Принципиальным моментом при исследовании двумерных систем является вопрос о фазовых переходах, типе фазовых переходов, фазовой диаграмме конкретных систем.

Фазовые переходы в кристаллах тесно связаны с устойчивостью динамической системы. Это следует из простого наблюдения над физической системой в целом или отдельными ее частями в окрестности фазового перехода. Движение частиц в этом случае становится нерегулярным, сложным и непредсказуемым. Выполнен качественный анализ устойчивости двумерной динамической системы.

Во втором параграфе рассмотрена термодинамика двумерного кристалла. Приведены выражения для основных термодинамических функций и их производных в высокотемпературном и низкотемпературном приближениях, а также в моделях Дебая и Эйнштейна.

В третьем параграфе развивается модель однокомпонентной классической плазмы с кулоновским законом взаимодействия, а также с произвольным степенным законом межчастичного взаимодействия. Для характеристики кулоновской системы можно ввести безразмерный параметр  $\Gamma_q$

$$\Gamma_q = \frac{e^2}{kTd}, \quad (10)$$

определяющий отношение энергии кулоновского взаимодействия к энер-



гии кинетического движения ( $d$  - среднее расстояние между частицами). Аналитический анализ системы возможен в двух предельных случаях:  $\Gamma_q \ll 1$  - идеальная однокомпонентная двумерная плазма;  $\Gamma_q \gg 1$  - неидеальная однокомпонентная двумерная плазма. Первый случай отвечает слабо взаимодействующей кулоновской жидкости, другой - электронному кристаллу. Случай  $\Gamma_q \ll 1$  отвечает хорошо известной линейной теории Дебая-Хюккеля. В этом пределе удастся получить аналитические выражения для самосогласованного потенциала  $\varphi(r)$ , внутренней энергии, обусловленной кулоновским взаимодействием и другими термодинамическими функциями. В пределе  $\Gamma_q \gg 1$  мы имеем дело с кристаллической системой. Используя термодинамическую теорию возмущения, можно вычислить ангармонические поправки к свободной энергии. Полученные выражения легко обобщаются на случай с произвольным законом взаимодействия типа

$$\frac{V(r)}{kT} = \left(\frac{\sigma}{d}\right)^n \frac{\mathcal{E}}{kT} \frac{1}{x^n}, \quad (11)$$

где  $\mathcal{E}$  - силовая постоянная,  $\sigma$  - параметр длины,  $n$  - показатель степени. Вводя безразмерный параметр

$$\Gamma^{(n)} = \left(\frac{\sigma}{d}\right)^n \frac{\mathcal{E}}{kT}, \quad (12)$$

можно вычислить термодинамические функции для кристалла с произвольным законом взаимодействия (11).

Данная техника обобщается и на кристаллические системы с более сложным законом взаимодействия. В работе приведены выражения термодинамических функций для системы, где взаимодействие осуществляется с помощью потенциала Леннарда-Джонса.

В четвертом параграфе анализируется кривая плавления кулоновского, дипольного и леннард-джонсовского кристаллов в классической области. Для электронов классическая область определения параметров определяется условиями

$$\lambda_e = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m kT}} \ll \frac{2}{\sqrt{\pi n}}, \quad kT \gg E_F = \frac{\pi\hbar^2 n}{m}, \quad T \ll 2 \cdot 10^5 \frac{1}{r} \quad (13)$$

(случай кулоновского взаимодействия), где  $\lambda_e$  - волна де Бройля,

$n$  - двумерная электронная плотность. Для систем с дипольным законом взаимодействия имеем

$$T > 10 \frac{\pi}{k} \frac{eD}{\sqrt{m}} n^{5/4}. \quad (14)$$

На рис. I представлены фазовые диаграммы кулоновской, дипольной и леннард-джонсовской систем. Волнистой линией отмечен переход от квантовой области к классической. Кривая плавления для кулоновской и дипольной систем определяется из безразмерных параметров

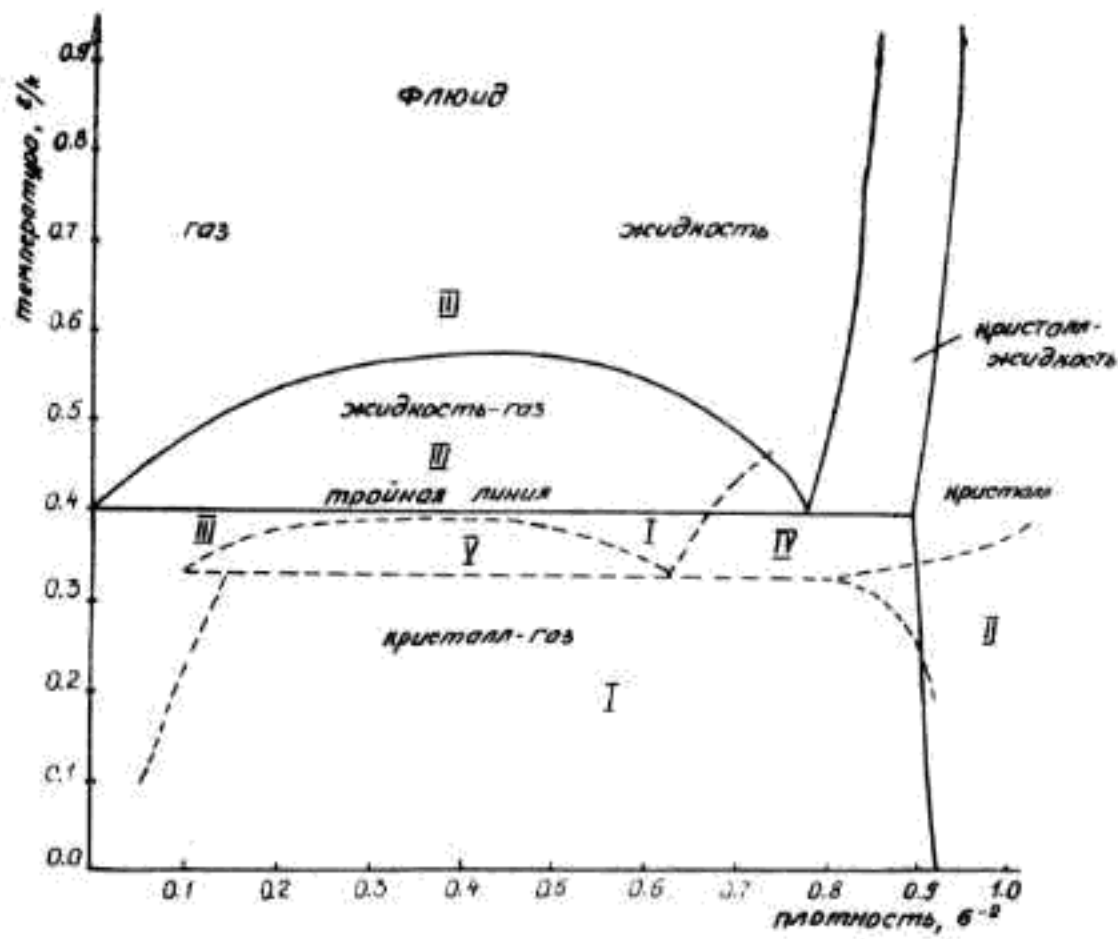
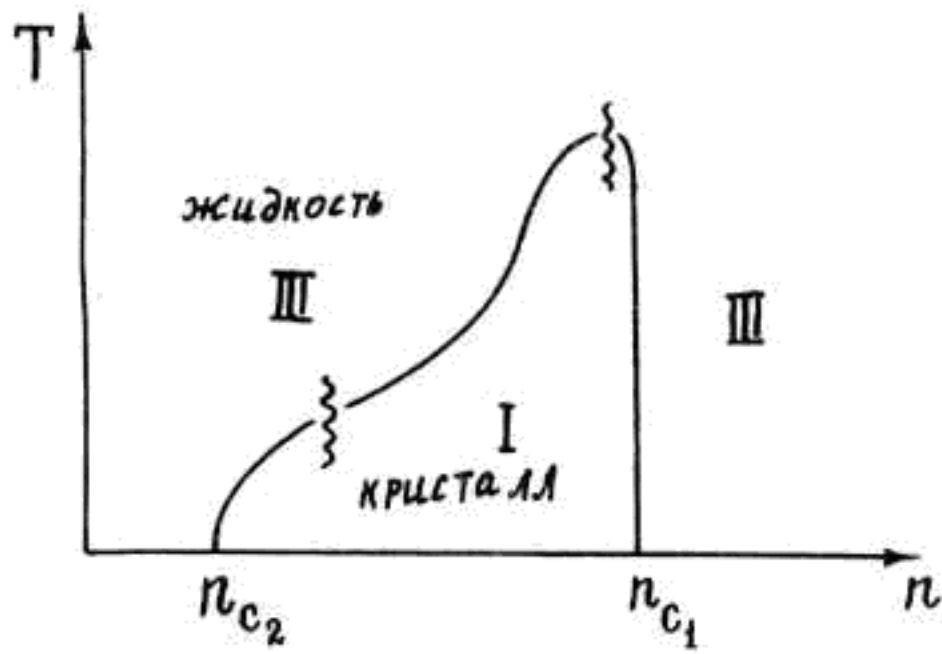
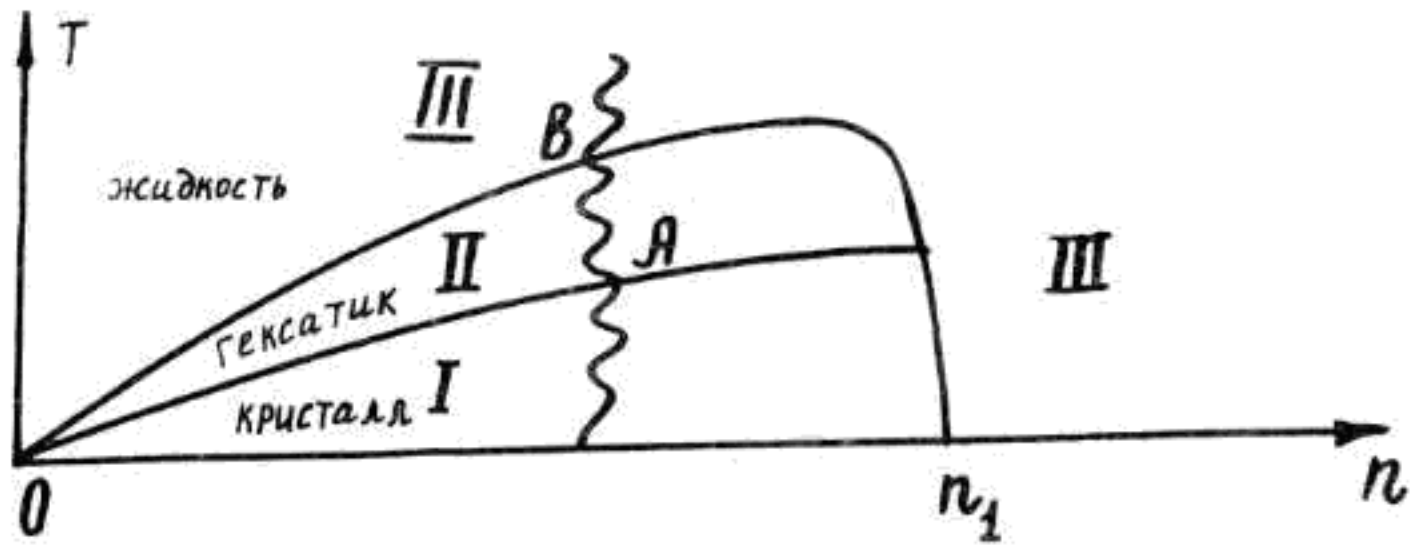


Рис. I (а), (б), (в).

$$\Gamma_g \text{ и } \Gamma^{(3)}, \text{ поэтому имеем} \quad T_{me} = \frac{1}{\Gamma^{(3)}} \sqrt{N_{me}} \quad (15)$$

для кулоновской системы и

$$T_{me} = \frac{1}{\Gamma^{(3)}} N_{me}^{3/2} \quad (16)$$

- для дипольной системы. Задание кривых плавления требует знания критических значений безразмерных параметров. Последние можно определить несколькими путями: с помощью пересечения термодинамических функций, определенных в жидкой и кристаллической областях, используя феноменологический критерий Линдемана и путем прямого численного моделирования.

Результаты, полученные последним способом, представлены в пятом параграфе. Расчеты обнаруживают для кулоновской и дипольной систем в области перехода скачок в величине внутренней энергии  $U(T)$ , приходящейся на одну частицу,  $\sim 2$  К. Оценка теплоемкости  $C_V$  по наклону графика  $U(T)$  дала результат  $C_V \approx 2.0$ к ниже  $T_m = 5.7^\circ\text{К}$  и  $C_V = 2.2$ к - выше  $T_i = 6.6^\circ\text{К}$  (кулоновская система);  $C_V = 2.1$ к - ниже области плавления и  $C_V = 1.9$ к - выше области плавления (дипольная система). Природа большой величины теплоемкости  $\sim 2$ к в жидкой фазе объясняется тем фактом, что среда состоит из кластеров, частицы которых совершают колебательные движения и лишь изредка совершают перескоки. Это согласуется с обнаруженным в расчете механизмом самодиффузии (пример карты траектории 500 частиц представлен на рис.2), который заключается в том, что основной вклад в самодиффузию при температурах выше температуры плавления дают частицы на границах кластеров. В отличие от дипольной системы, где наблюдается более резкий скачок в функции  $U(T)$ , в кулоновской системе наблюдается довольно широкая переходная область  $\Delta T \sim 1^\circ\text{К}$ . Корреляционный анализ с помощью радиальной функции распределения  $g(r)$  и ориентационной корреляционной функции  $g_6(r)$  для разных значений  $\Gamma$  показал:

1. Функции  $g(r)$  и  $g_6(r)$  обнаруживают затухающие осцилляции, с ростом  $\Gamma$  растут амплитуды и их число.

2. Функции  $g(r)$  и  $g_6(r)$  меняют свою асимптотику в зависимости от  $\Gamma$ .

На рис.3 представлены результаты аппроксимации амплитуд корреляционных функций функциями вида

$$\begin{aligned} f_1(r) &= A e^{-\alpha r} + C_1, \\ f_2(r) &= B (r + r_0)^{-\beta} + C_2 \end{aligned} \quad (17)$$



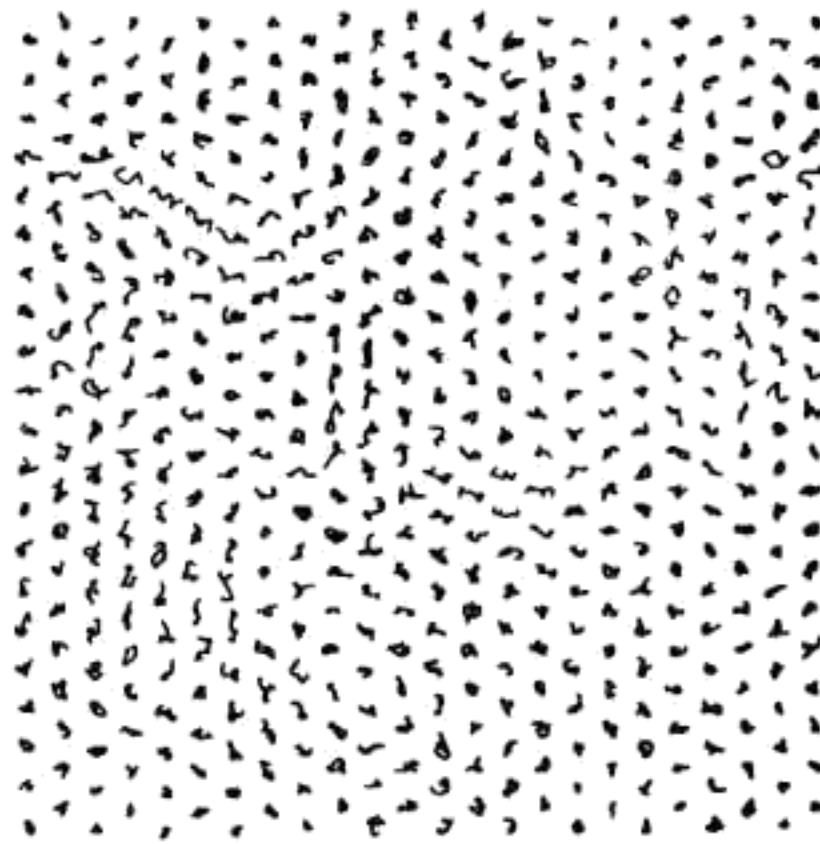


Рис. 2

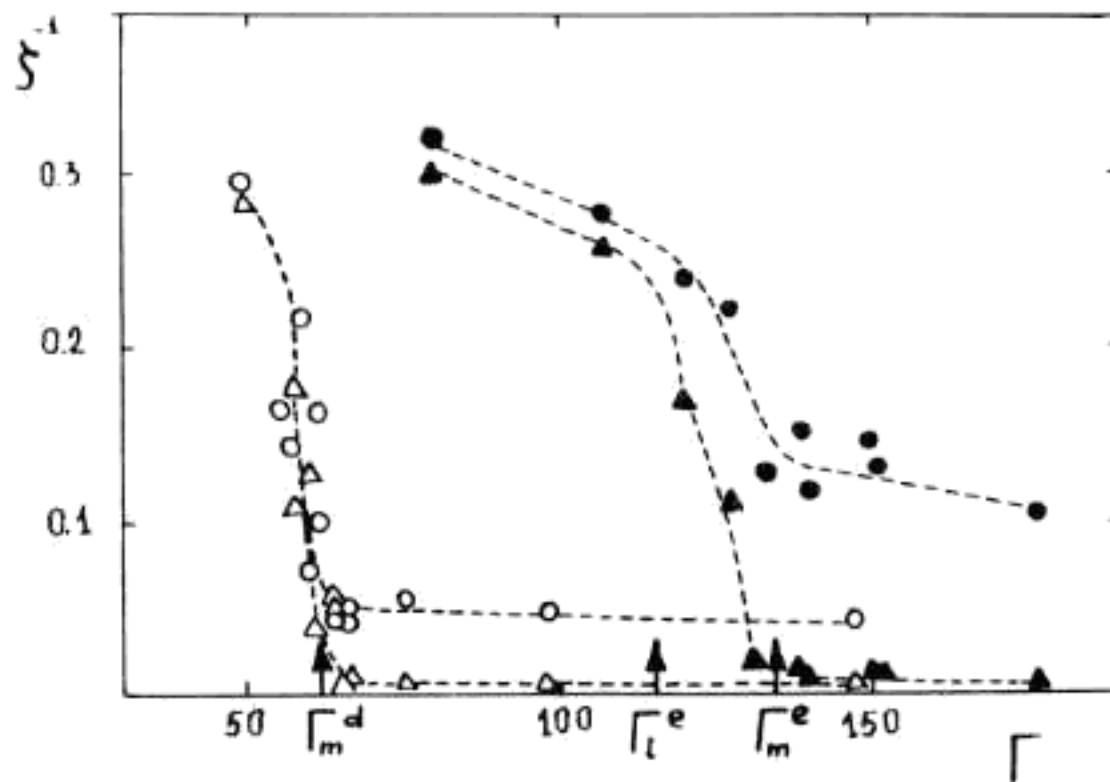


Рис. 3

(корреляционная длина  $\xi_g$  и  $\xi_{g_0}$  есть величина, обратная  $\alpha_g$  и  $\alpha_{g_0}$ ). Из рис.3 следует, что в кристаллической фазе имеется дальний ориентационный порядок  $\xi_{g_0} \rightarrow \infty$  и в кулоновской и в дипольной системах, а трансляционное упорядочение затухает степенным образом. При  $\Gamma_m = 135 \pm 5$  (кулоновская система) происходит изменение в характере убывания корреляционных функций. Величина  $\xi_{g_0}$  становится конечной, а  $\xi_g$  скачком уменьшается до нового значения. При новом значении  $\Gamma_l = 115 \pm 5$  происходит еще один скачок, но уже в ориентационной корреляционной функции  $g_0(r)$ . Наш расчет тем

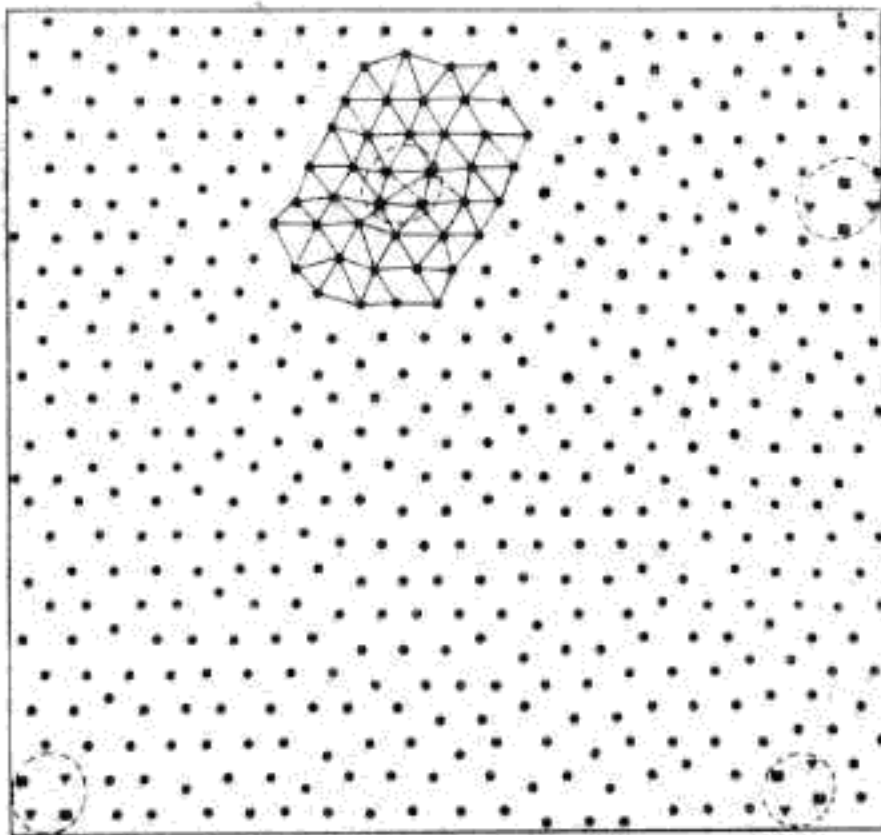


рис. 4

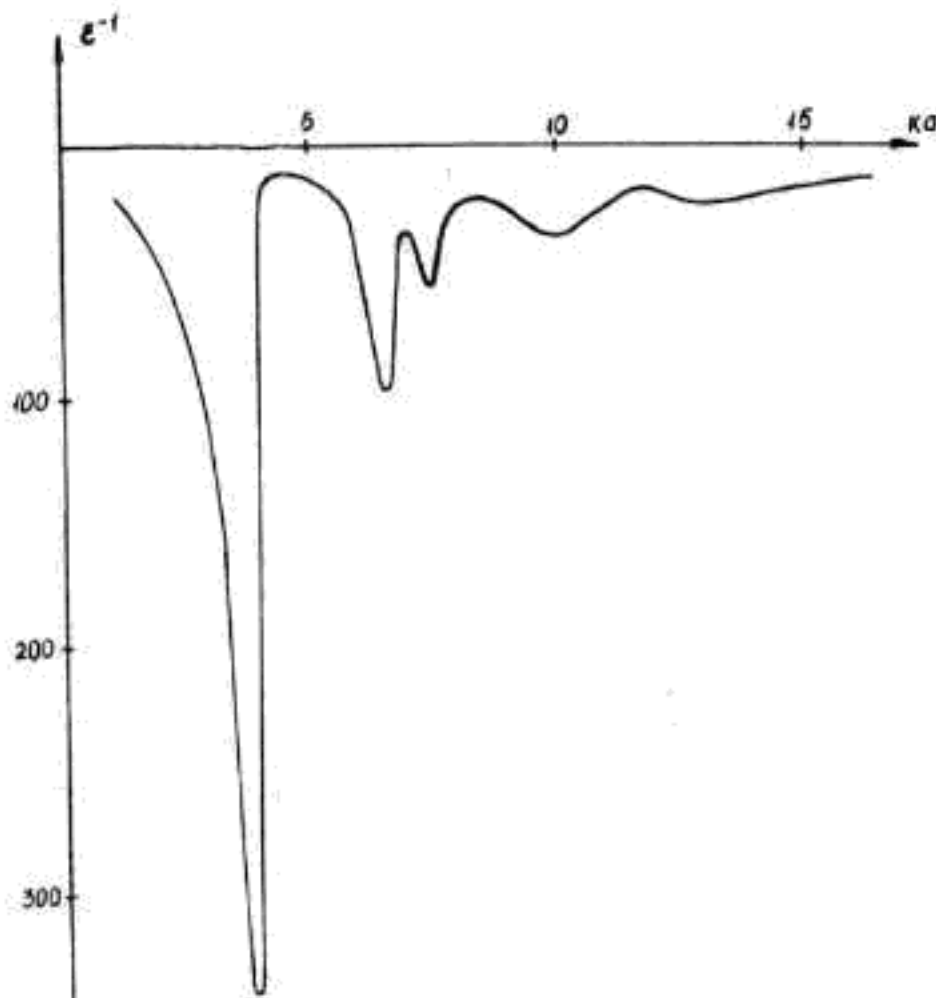


рис. 5

ленно, показал, что плавление происходит при разных значениях  $\Gamma_{\Lambda}$  в дипольной системе  $\Gamma_{\Lambda}^d = 0.14$ ; кулоновской  $\Gamma_{\Lambda}^q = 0.15$ ; лэннард-джонсовской  $\Gamma_{\Lambda} = 0.13$ . Расчет структурного фактора и на его основе статической диэлектрической проницаемости  $\epsilon(K, \omega = 0)$  (рис.5) для разных значений  $\Gamma$  показал, что от кристаллической фазы до глубоко жидкой фазы и в кулоновской и в дипольной

самым свидетельствует в пользу обнаружения промежуточной фазы между кристаллом и изотропной жидкостью - гексатической фазы в кулоновской системе и отсутствия гексатической фазы в дипольной системе. Наши расчеты подтверждают механизм плавления, предложенный Костерлицем-Таулесом. Плавление осуществляется путем размножения 4 дисклиниаций (рис.4) (пара дислокаций) с последующей их диссоциацией.

Анализ критерия Линдемана, проведенный чис-

системах  $\xi < 0$ . Анализ данных расчета автокорреляционных функций скорости  $\dot{z}(t)$  показал, что функции испытывают затухающие осцилляции с частотой  $\omega_g \sim 1.2\tau_0^{-1}$  ( $\tau_0 = \sqrt{\frac{md^3}{e^2}}$ ,  $d$  - среднее расстояние между частицами) для кулоновской системы и  $\omega^{(3)} = 1.2\tau_0^{-1}$  ( $\tau_0 = \sqrt{\frac{md^3}{e^2 D^2}}$ ) - для дипольной системы, форма функции слабо зависит от  $\Gamma$ . Аппроксимация огибающей автокорреляционной функции с помощью формул (17) дала асимптотику  $t^{-1.1}$  (кулоновская система). Расчет коэффициента самодиффузии  $D$  показал плавное растущее изменение (от нуля при  $\Gamma_m = 135$ )  $D$  для кулоновской системы и резкий скачок  $D$  для дипольной системы.

Полученные нами результаты свидетельствуют в пользу фазового перехода первого рода в дипольной системе и второго рода - в кулоновской системе.

Для леннард-джонсовской системы выполнены расчеты озохоры ( $\eta^* = 0.8$ ) и изотермы ( $T^* = 1.0$ ). Были локализованы области соответствующих фаз. Расчеты выполнены для основного и одного из возбужденных состояний. Наши расчеты по потенциальной энергии находятся ниже, чем аналогичные расчеты других авторов. Короткодействующий тип потенциала (Л-Д) существенно изменил характер затухания автокорреляционных функций скорости. Вместо осцилляций по времени, как это было в кулоновской и дипольной системах, наблюдается быстрое затухание по степенному закону. Автокорреляционные функции смещения в кристаллической фазе медленно затухают со временем.

Глава III. Рассмотрено применение квантовомеханических методов к задачам хемосорбции атомов и молекул на поверхности германия, никеля. Развивается кластерная модель для описания перестройки грани германия, одно- и многоцентровой адсорбции, построения потенциального рельефа идеальной поверхности, электронного спектра идеальной и неидеальной поверхности алмазоподобного полупроводника. Большинство расчетов выполнено для кластеров, содержащих 13(22), 17(28) атомов германия, кремния, алмаза, 5, 8, 10, 12 атомов никеля. Эти кластеры включают от 2 до 4 координационных сфер с центром на атоме поверхности и соответственно от 1 до 5 плоскостей вглубь кристалла.

Анализ химической связи для атомов углерода и кремния, расположенных в объеме кристалла, показал одинаковую долю  $ns$ - и  $np$ -орбиталей в химической связи, в то время как для атомов германия



наблюдается понижение доли участия  $4s$ -орбиталей в химической связи. С этим связан рост заряда на  $ns$ -орбитах у поверхностных атомов германия, особенно для грани (100). Валентность атомов на грани (111) германия = 3. Поверхностные атомы кремния на грани (111) имеют характер оборванных связей, близкий к  $sp^3$ -типу, а у атомов углерода наблюдается тенденция к  $sp^2$ -типу. Изучение потенциальной энергии взаимодействия центрального атома германия вдоль осей  $x$ ,  $y$ ,  $z$  показывают существенную анизотропию, что приводит к анизотропии амплитуд колебаний в плоскости  $(x, y)$  -  $\bar{x}^2 > \bar{y}^2$ , амплитуды колебаний в объеме меньше, чем на поверхности.

Изучение поверхностной самодиффузии проводилось путем перемещения диффундирующего атома по идеальной грани германия. Для фиксированных координат этого атома в плоскости поверхности находилась минимум полной энергии системы при изменении расстояния этого атома от поверхности. Так строились потенциальные поверхности диффузии для элементарной поверхностной ячейки. Изучена самодиффузия германия на грани (100) германия. Устойчивым оказывается положение добавочного атома германия между цепочками поверхностных атомов с проекцией на плоскость, совпадающей с проекцией положения атома, достраивающего кристалл, но заглубленного под верхний слой. Этот результат свидетельствует в пользу предположения о смещении навстречу друг другу поверхностных атомов с образованием суперструктур. Рассмотренная модель перестройки поверхности  $Ge$  (100) типа  $(2 \times 1)$  показала, что перестройка поверхностного слоя этого типа является энергетически более выгодной, чем идеальная структура.

Один параграф посвящен изучению хемосорбции атомов и молекул кислорода, водорода, воды, гидроксильной группы, а также некоторых переходных металлов на поверхностях германия и никеля.

Поверхностная диффузия атома кислорода на поверхностях (100) и (111) германия изучалась аналогично самодиффузии германия на грани (100).

На грани (111) атом кислорода адсорбируется в положение трехцентральной адсорбции, при этом его равновесное положение заглублено под плоскость поверхности. Расчет показывает сильную связь атома кислорода с подложкой, а поэтому можно пренебречь его диффузией по поверхности германия.

Адсорбция молекулярного кислорода на поверхности германия была рассмотрена только для некоторых конкретных комплексов. На гра-

ни (100) наиболее устойчивой оказалась структура перекисного мостика над атомом второго слоя и структура одноцентровой адсорбции, а для грани (111) - структура перекисного мостика между атомами верхнего слоя. Молекула кислорода при перпендикулярном к поверхности расположении не адсорбируется. Процесс адсорбции во всех рассмотренных случаях происходил безактивационно.

Как и для кислорода, адсорбция воды на поверхности германия изучалась только в виде конкретных комплексов и с различными типами ориентации воды в них. Расчеты показали, что адсорбция протекает безактивационно. Положение адсорбированной молекулы воды определяется в основном взаимодействием атома кислорода с поверхностными атомами германия с участием неподеленных пар электронов кислорода, что приводит к положению адсорбированной на поверхности молекулы с "торчащими" "наружу" атомами водорода. Адсорбированная молекула заряжена положительно ( $\sim 0.3 + 0.4e$ ).

Нами была изучена хемосорбция железа, никеля, кобальта на грани (111) германия в положения одноцентровое, трехцентровое и на вакансию. Расчеты показали, что переходные металлы захватываются в места трехцентровой адсорбции и на вакансию с энергией связи  $\sim 3.2$  эВ, причем вблизи поверхностного слоя имеется потенциальный барьер, за которым энергия снова понижается, что позволяет ударным механизмом внедрять атомы внутрь кристалла. Сравнивая характеристики различных атомов, видим, что энергия адсорбции растет от *Fe* к *Ni*, а длина связи уменьшается от *Fe* к *Ni*. Металлы заряжаются положительно, отдавая часть электронов атомам германия, проявляя тем самым электроотрицательность по отношению к германию.

Расчеты хемосорбции атома или молекулы водорода на гранях (111) и (100) никеля показали, что адсорбция происходит безактивационно в две стадии, разнесенные энергетическим барьером и расстоянием. Сначала происходит молекулярная адсорбция, расстояние молекулы  $H_2$  от поверхности  $\approx 2.2$  Å (молекула ориентирована параллельно поверхности) для одноцентровой адсорбции и  $\approx 1.2$  Å - для  $H_2$ , многоцентровой. Многоцентровая адсорбция энергетически более выгодна, чем одноцентровая, и для атома, и для молекулы. Адсорбированный атом водорода заряжается, как правило, отрицательно, что связано с более глубоким расположением вакантного уровня в атоме водорода относительно уровня Ферми. В случае молекулы  $H_2$  ситуация обратная, и молекула заряжена положительно. Поверхностный

атом никеля всегда заряжен отрицательно. Удобной характеристикой межатомных связей является кратность связи  $K$ :

$$K_{AB} = \sum_{M \in A, N \in B} \rho_{MN}^2 \quad (18)$$

Наши расчеты показали ослабление связи поверхностных атомов с атомами объема и ослабление связи в адсорбированной молекуле  $H_2$ .

Адсорбция атома и молекулы кислорода на никеле протекает безактивационно. Энергия связи на грани (III) выше, чем на (100) и возрастает при переходе от одноцентровой к многоцентровой адсорбции. При хемосорбции молекулы  $O_2$  связь между атомами в ней ослабляется, что проявляется в увеличении длины связи в  $O_2$  и уменьшении кратности связи  $O - O$ . Кратность связи  $O - O$  при переходе от одноцентровой адсорбции к многоцентровой возрастает, а кратность связи поверхностных атомов никеля с объемом уменьшается. Валентность поверхностных атомов никеля при адсорбции возрастает от 3.2 до 3.56 (грань (III)) и от 2.2 до 2.8 (грань (100)). Кислород во всех формах заряжается отрицательно. Адсорбция гидроксильной группы OH происходит через атом кислорода с участием электронов неподеленных пар кислорода. Энергия адсорбции выше для грани (III), чем для грани (100), и возрастает при переходе от одноцентровой адсорбции к многоцентровой. Заряд на OH отрицательный. При адсорбции воды на никеле моделирование проводилось путем движения молекулы как целого от поверхности, а также варьированием геометрии  $H_2O$ . Расчеты показали, что при адсорбции геометрия молекулы изменяется незначительно, адсорбция протекает безактивационно. Анализ нескольких форм молекулы  $H_2O$  на поверхности никеля показал, что энергетически наиболее благоприятной является ситуация, когда молекула ориентирована перпендикулярно поверхности с "торчащими" вверх атомами водорода. Энергия адсорбции  $H_2O$  на гранях никеля мала, причем на грани (III) выше, чем на грани (100). Молекула  $H_2O$  заряжается положительно.

Исследования электронных состояний осуществлялись методом рекурсий на примере алмазоподобных полупроводников. В расчете вычислялась локальная плотность электронных состояний (ЛПС) для объема, вакансии и дивакансии в объеме кристалла, для идеальных поверхностей (100) и (III) и ступеней на этих поверхностях. Найденная ЛПС на атоме в объеме кристалла хорошо согласуется с экспериментальными УФС-спектрами, а также с результатами расчетов другими методами. Воспроизводится ширина валентной и запрещенной зон, относительное положение характерных пиков. Интенсивность



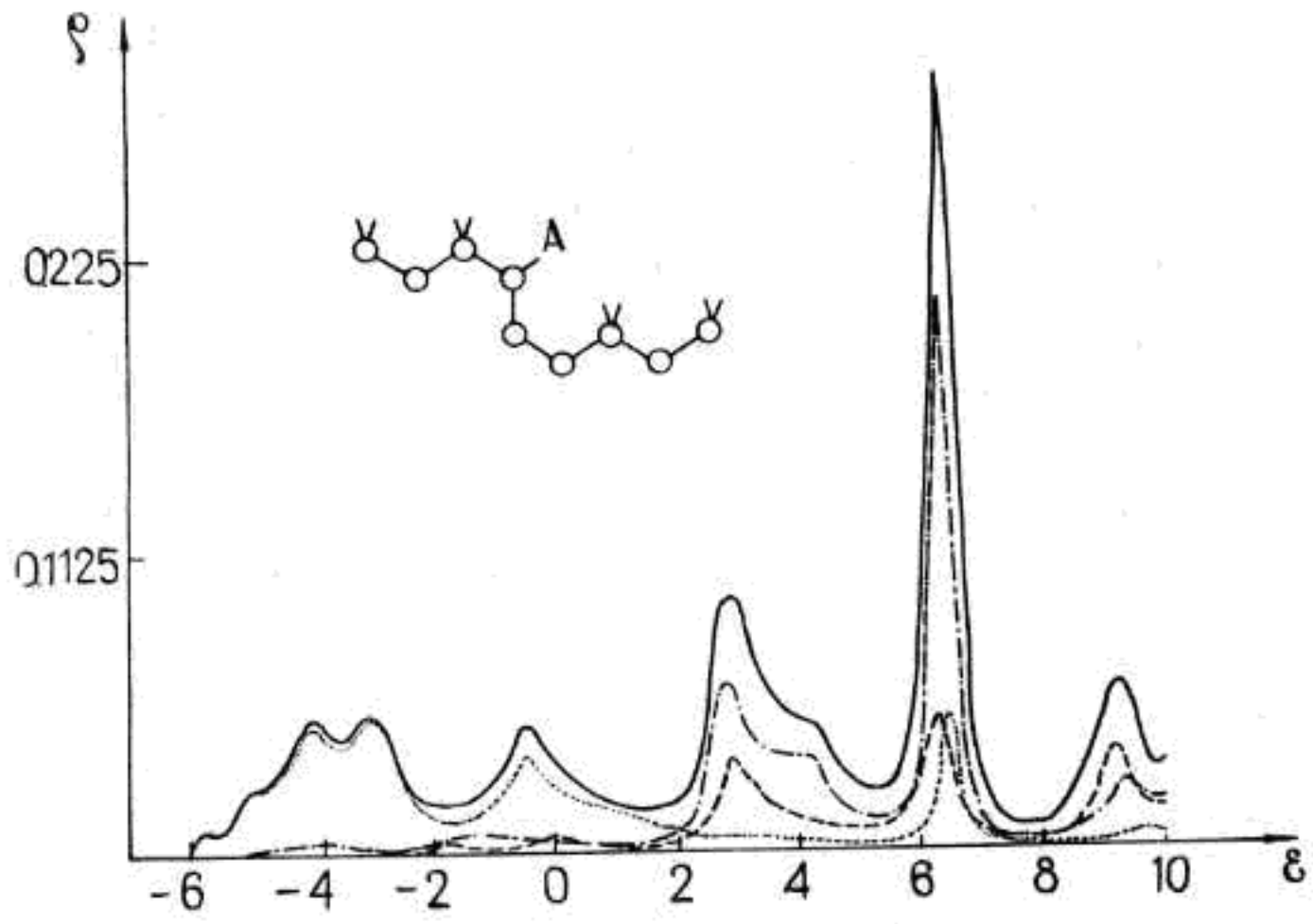


Рис.6

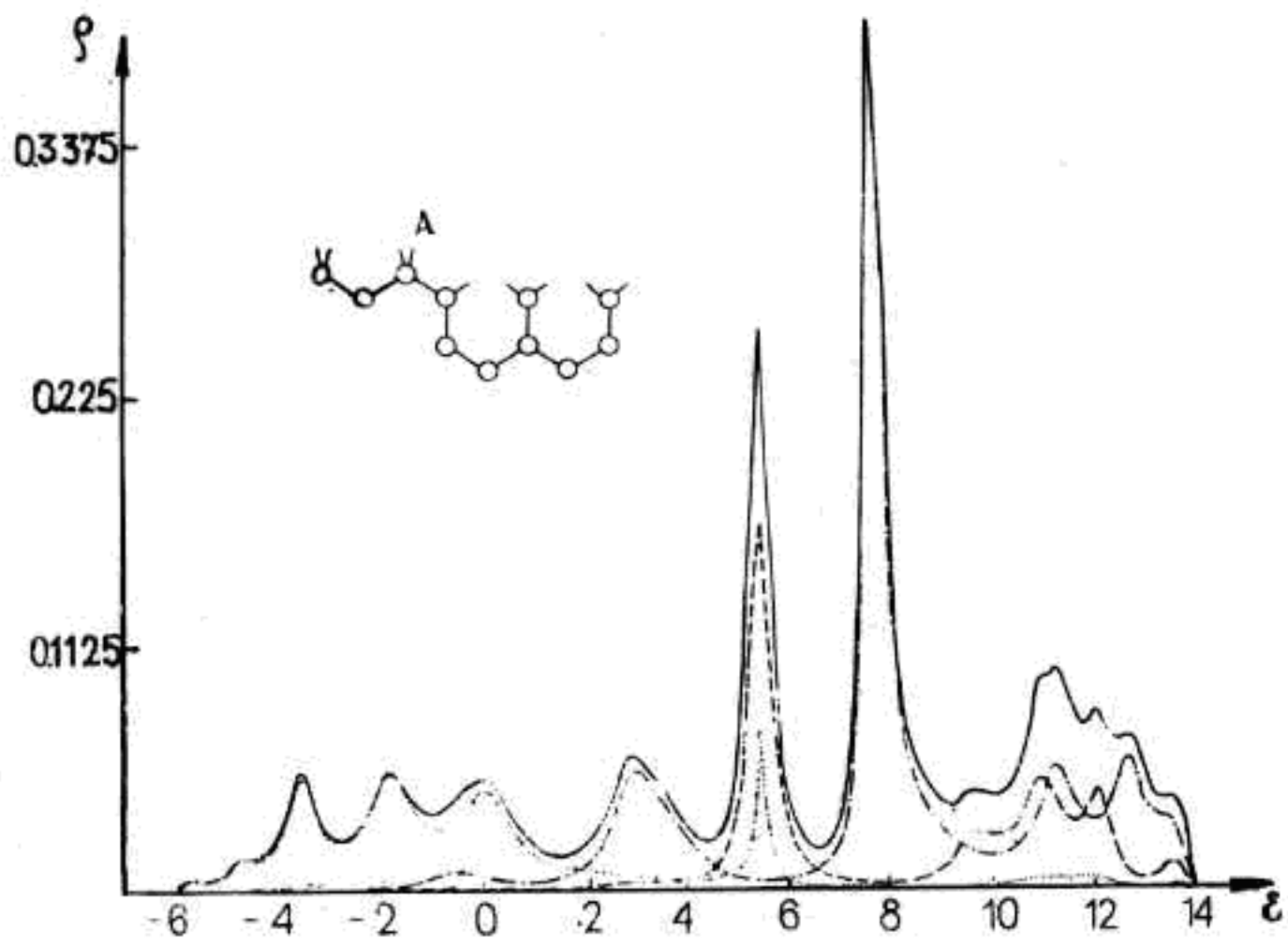


Рис.7

пика вблизи дна валентной зоны и зоны проводимости определяется  $s$ -состояниями, верх валентной зоны формируют  $p$ -состояния. Формирование вакансии или дивакансии путем удаления одного или двух атомов из объема приводило к появлению локализованного состояния, уровень которого расположен приблизительно в центре запрещенной зоны. Расчеты ЛПС на атомах идеальных граней (111) и (100) показали наличие 1 пика поверхностных состояний ПС на грани (111) и 2 пика ПС на грани (100) вблизи краев запрещенной зоны. Число пиков ПС в запрещенной зоне коррелирует с числом оборванных связей у атома данной поверхности. Данное обстоятельство проявляется в быстром изменении ЛПС при переходе от поверхности к объему. Корреляция числа пиков ПС с координацией атома довольно четко проявляется при расчетах разного типа ступеней для граней (111) и (100). Примеры такого расчета представлены на рис.6,7, где также изображены рассчитываемые ступени.

Глава IV. Рассмотрено применение квантовых и классических методов для решения задач точечных нарушений в кристаллах. Движение частиц высокой энергии по кристаллу сопровождается образованием каскада нарушений и потерей частицей энергии на упругих столкновениях. Существует еще один канал потери частицей энергии - на электронах кристалла. В работе обобщается модель Фирсова, развитая для расчета сечения неупругих потерь частицы, с учетом

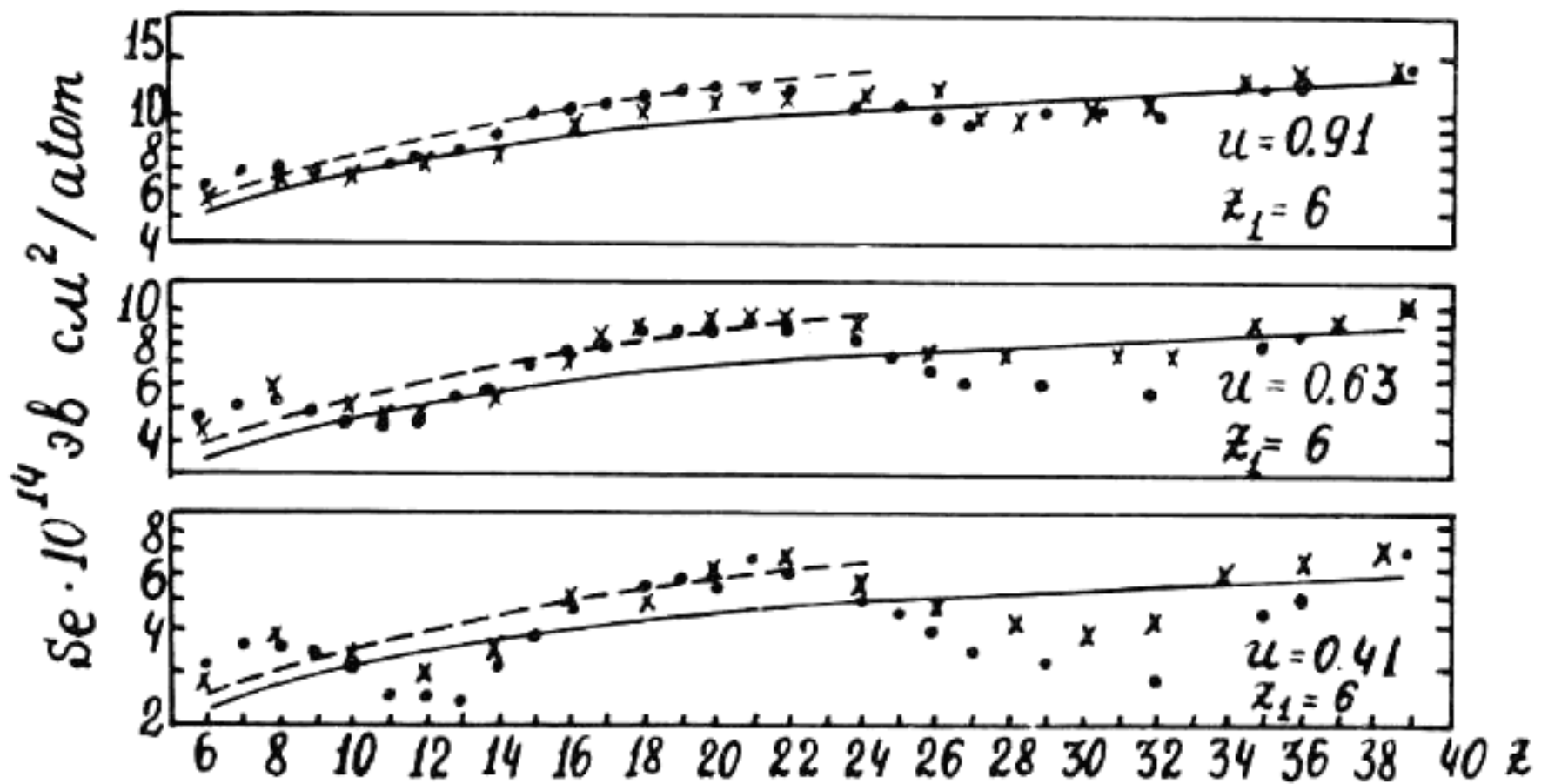


Рис.8

оболочечных эффектов (Д.А.Киржниц, Г.В.Шпатаковская). Используя теорию возмущения, вычислена осцилляционная поправка к сечению неупругих потерь. Результаты расчета представлены на рис.8, иллюстрируя согласие наших расчетов с данными эксперимента и моделью Фирсова.

Во втором параграфе приведены результаты расчетов дефектов типа смещенного атома в кремнии методом молекулярной динамики. Расчеты пороговой энергии образования дефекта в кремнии показали их анизотропный характер, но их величины ниже экспериментальных значений (Л.С.Смирнов и др.). При сообщении первичному атому импульсов, близких к направлениям [111] и [100], наблюдаются цепочки фокусированных столкновений. Эффект фокусировки уменьшается с ростом начальной энергии атома  $E_0$ , а при заданной энергии с увеличением угла отклонения от оптимального направления. Расчет ММД показал, что возможен захват атома, выбитого из узла решетки, в тетраэдрическое междоузлие. Высота активационного барьера созданного дефекта составляла  $\sim 0.5$  эВ. Для дополнительного подтверждения возможности существования такого сорта дефекта были выполнены квантовые расчеты методом ШД/2 в кластерном приближении. Расчеты подтвердили возможность существования ориентационного типа дефектов (полувакансия и пара полувакансий).

Глава У. Рассмотрено поведение примесных центров, экситонов, биэкситонов и электронно-дырочной жидкости в сильном магнитном поле. Данные исследования применимы также для изучения астрофизических объектов - магнитосферы и коры пульсаров и белых карликов.

Исследования экситонов и примесных центров (также биэкситонов) были выполнены в приближении эффективной массы. Задача сведена к задаче об атоме или двухцентрковой молекуле в сильном магнитном поле. Расчет выполнен только для случая одноэлектронной и двухэлектронной систем. Под сильным магнитным полем понимается поле  $B$ , удовлетворяющее условию

$$B \gg B_0 = \frac{e^3 m^{*2} c}{\epsilon^2 \hbar^3}, \quad (19)$$

где  $m^*$  - эффективная масса,  $\epsilon$  - диэлектрическая постоянная среды.

В столь высоких полях плохо работает теория возмущения, и поэтому необходим численный расчет. Гамильтониан водородоподобной системы в магнитном поле в безразмерных переменных имеет вид

$$\hat{H} = -\nabla^2 + \gamma L_z + \frac{\gamma^2}{4} r^2 \sin^2 \theta - \frac{2}{r}, \quad (20)$$

где  $\gamma$  - магнитное поле в атомных единицах,  $L_z$  - оператор проекции



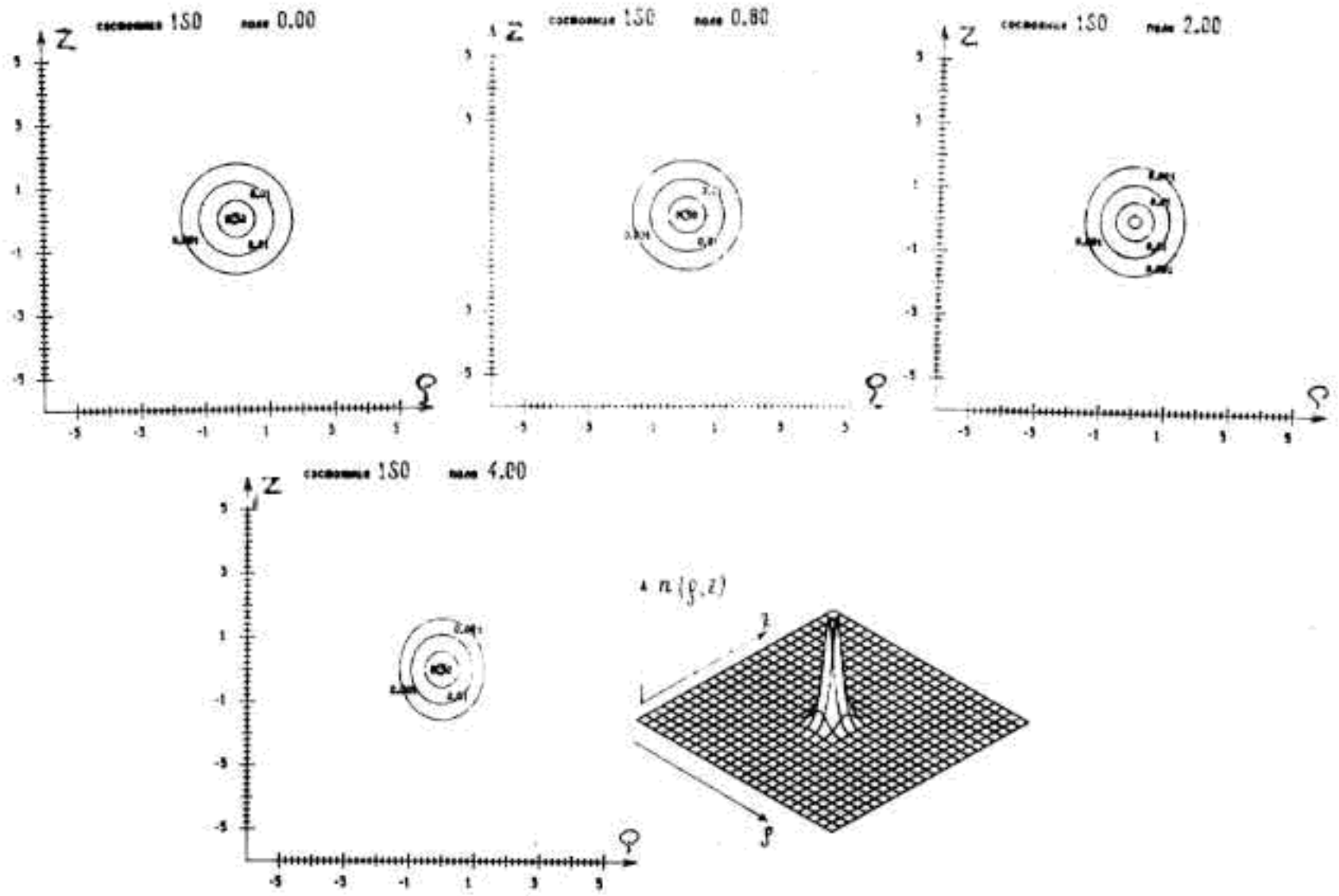


Рис.9 (а)

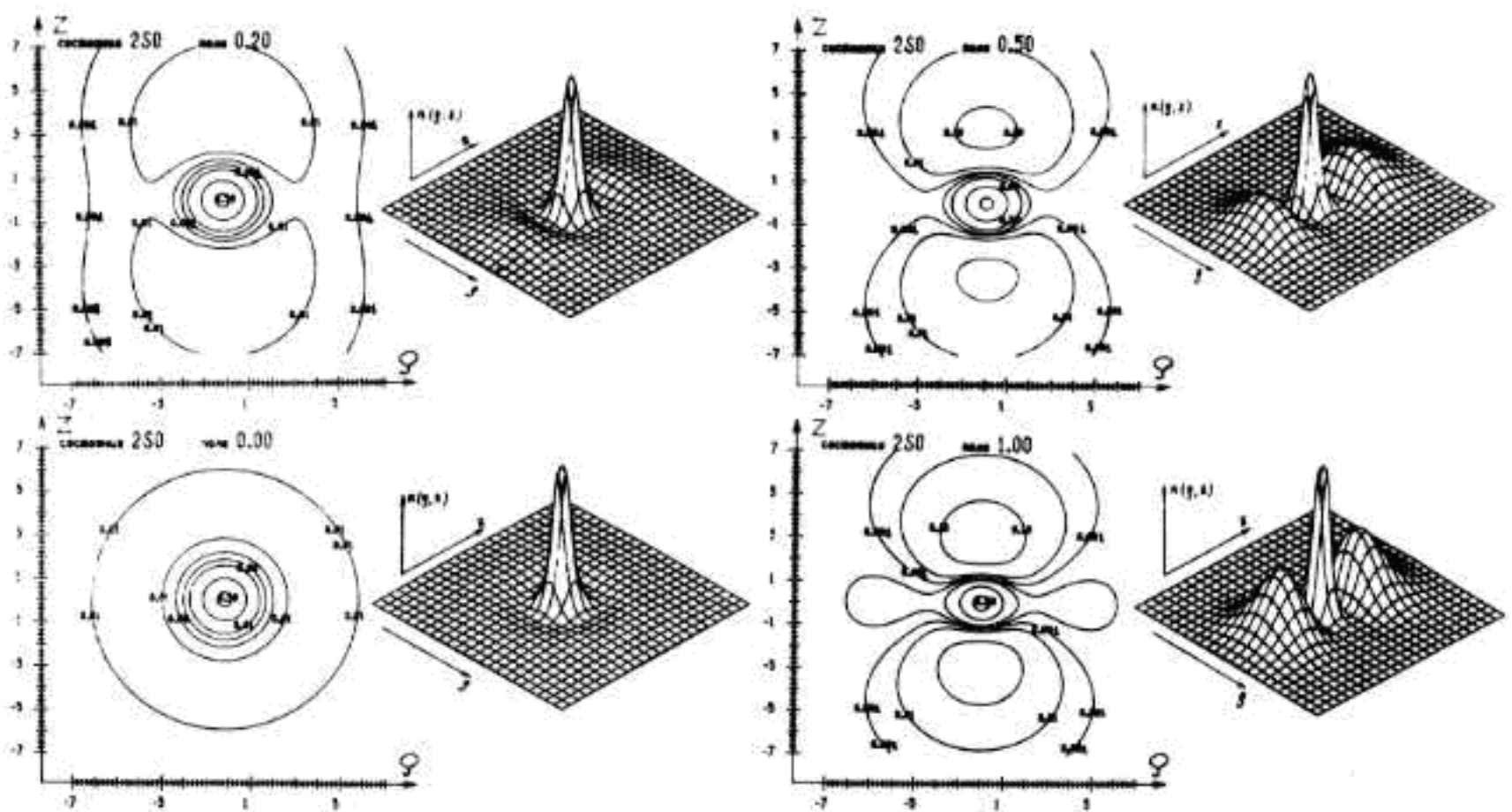


Рис.9 (б)

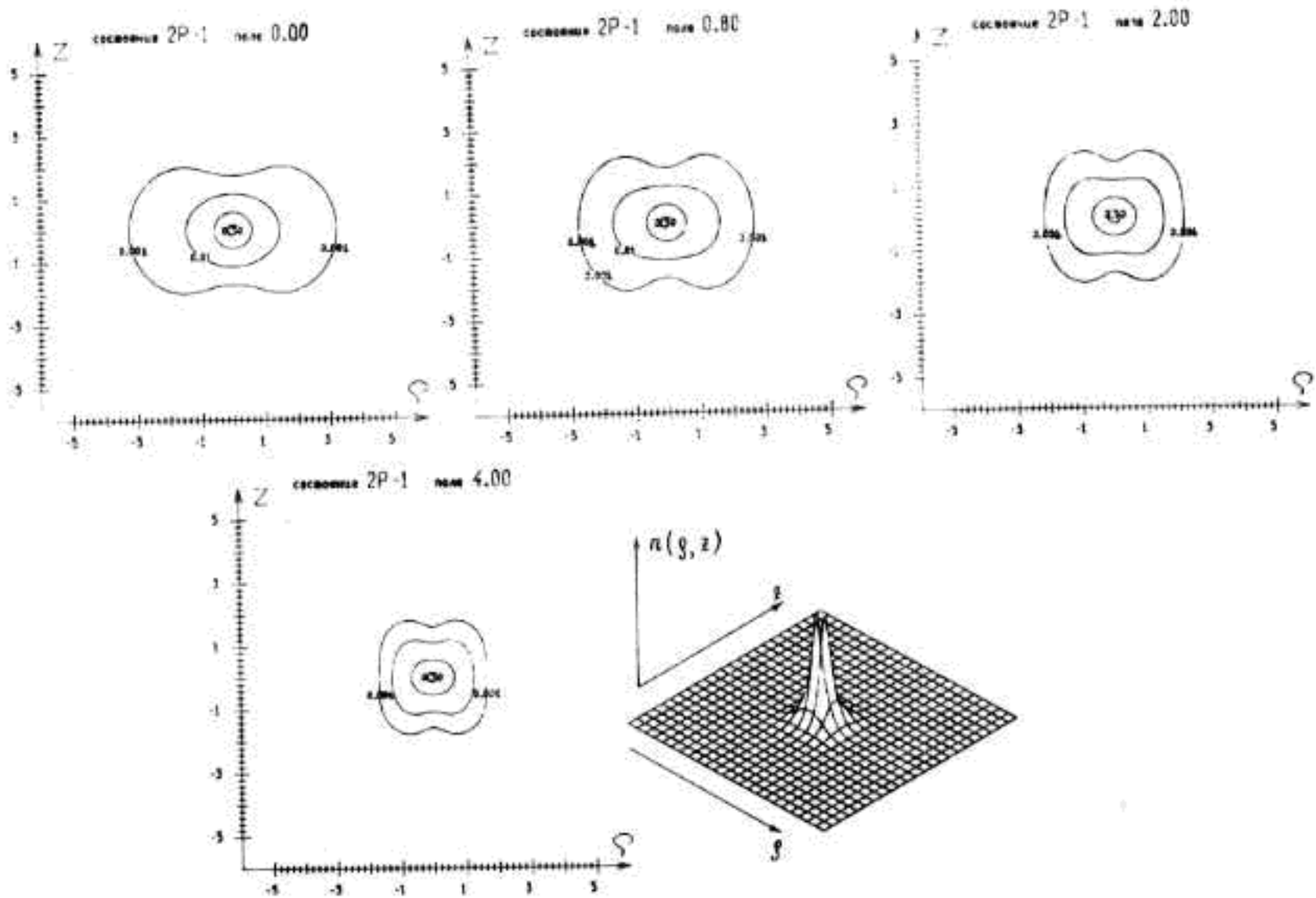


Рис.9 (в)

орбитального момента. Используя аналитические базисные функции, уравнение Шредингера было записано в матричной форме, и задача свелась к диагонализации симметричной матрицы.

На рис.9 представлены карты электронной плотности нескольких состояний для различных значений магнитного поля  $\gamma$ . Магнитное поле приводит к вытягиванию электронной плотности вдоль силовой линии. Расчет квадрупольного момента дает количественную характеристику степени вытянутости электронной плотности. Квадрупольный момент всех состояний сначала растет с ростом магнитного поля из-за сжатия атома в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, параболическим барьером  $\sim \gamma^2 r^2$ , затем рост  $Q_{zz}$  замедляется и начинается его уменьшение.

Расчет по теории возмущения дает хорошее приближенное значение квадрупольного момента основного состояния

$$Q_{zz} = \frac{5}{2} \gamma^2. \quad (21)$$

Были получены также спектры и дипольные матричные элементы. Для гелиеподобных систем была предложена теория возмущения по электрон-электронному взаимодействию. Решение строилось в виде ряда

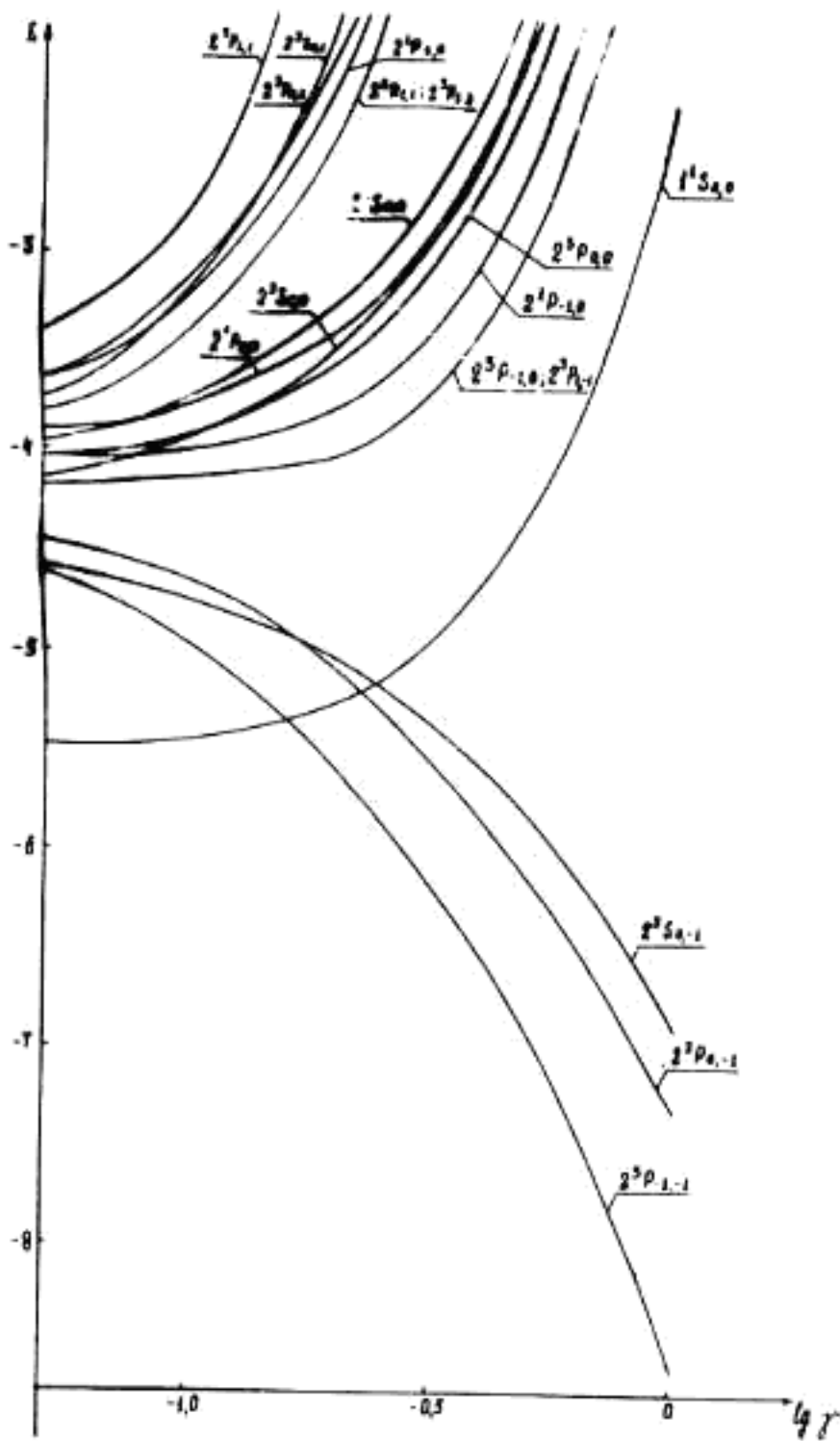


Рис. 10

по степеням  $1/z$ . Мы ограничились только первыми двумя слагаемыми в этом ряду. На рис. 10 представлены зависимости нескольких нижних собственных значений в зависимости от магнитного поля  $\vec{H}$ . С ростом поля  $\vec{H}$  не происходит сближение уровней одинаковой четности, поэтому применимость теории возмущения по взаимодействию оказывается не хуже, чем для атома в нулевом поле. Расчет показывает, что существует критическое значение магнитного поля  $\vec{H}$ , когда происходит смена основного состояния (вместо синглетного - триплетное) ( $\vec{H}_{кр} = 0.72$ ). Происходит спиновая перестройка двухэлектронного центра. Зная значения матричных элементов дипольного и квадрупольного моментов водородоподобной системы, легко вычисляются эти характеристики для гелиеподобной системы.

Используя метод валентных связей, был выполнен расчет биэкситона и иона  $ex_2^+$  в сильном магнитном поле при любой ориентации биэкситона. На рис. 11 представлена потенциальная энергия взаимодействия биэкситона  $ex_2$  для 3 ориентаций биэкситона относительно направления магнитного поля (вдоль, поперек и под углом  $\theta = 65^\circ$  к направлению магнитного поля  $\vec{H}$ ). Основное состояние отвечает ориентации  $\theta = 0$ . Существует критическое значение магнитного поля, которое приводит к магнитной диссоциации биэкситона. Дальнейшее увеличение магнитного поля приводит к образованию биэкситона с новым типом связи.

В § 3 рассмотрена статистическая модель многоэлектронного свободного и сжатого атома в магнитном поле (электрон-дырочная жидкость, сжатый кристалл). Модель справедлива в диапазоне магнитных полей (8). Указанный диапазон магнитных полей отвечает процессам



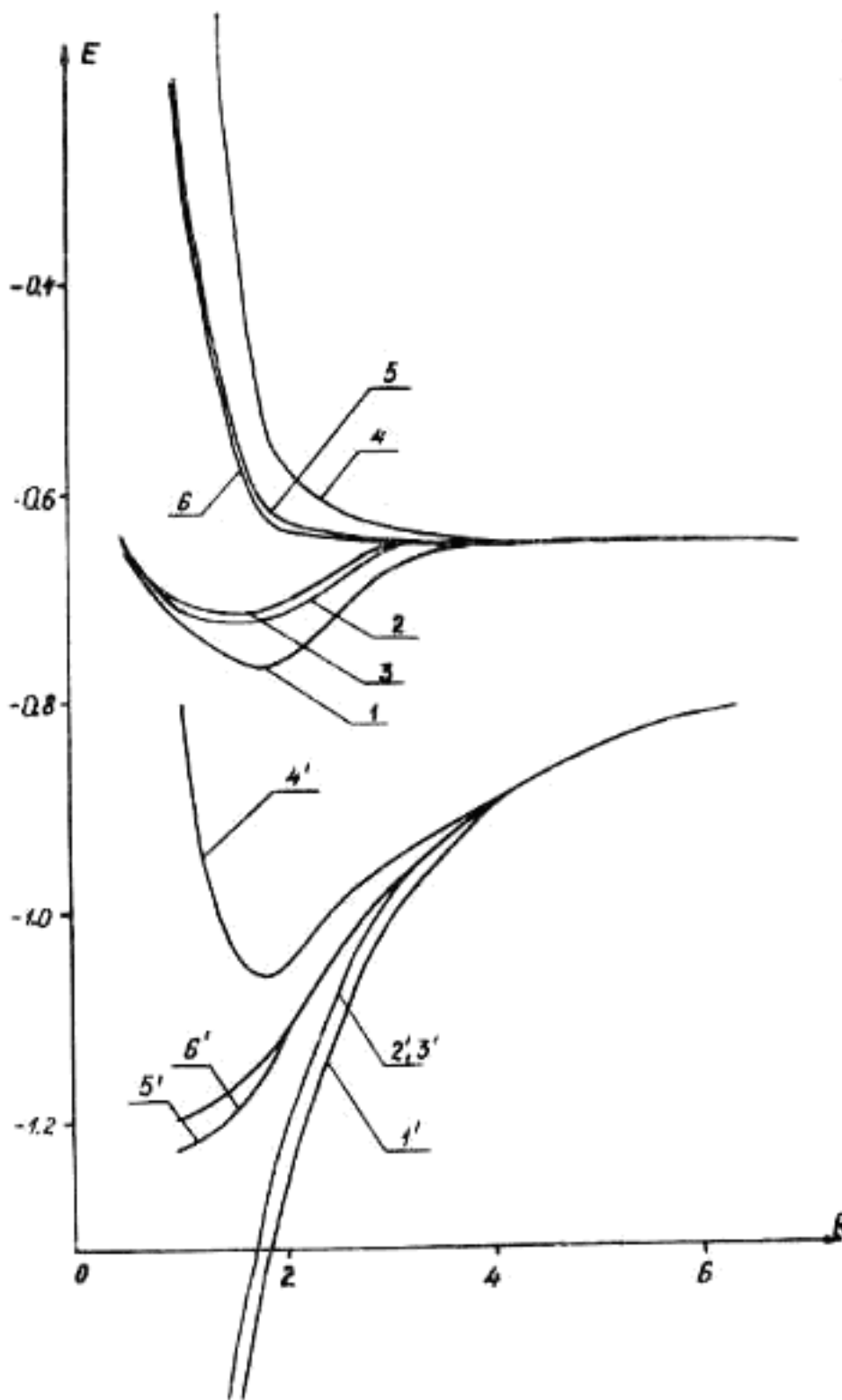


Рис. II

спиновой перестройки. Возникает своеобразный "внутриатомный парамагнетизм".

Первоначально нами была построена интерполяционная модель холодного вещества, связывающая две модели: Лозовика-Лабзовского (диапазон полей (8)) и модель Кадомцева (диапазон полей (9)). Расчеты с этой моделью проводились численно на неравномерной сетке по специально разработанному алгоритму в интервале полей  $B$  ( $0.01 \div 100$ ) э<sup>4/3</sup> для железа. Расчет уравнения состояния  $P(V, B = \text{const})$  обнаруживает ряд отличий от уравнения состояния (УС) вещества без магнитного поля. В частности, более резкое поведение при малых плотностях и, как следствие этого, существенно увеличивается жесткость среды, а сжимаемость нескатоного вещества изменяется на семь порядков при изменении поля от 0.01 до 100. Расчет энергии

атома и ее компонент показал, что полная энергия слабо меняется в процессе спиновой перестройки и начинает возрастать с ростом поля по ее окончании. Обращает внимание влияние обмена, особенно на периферии атома. Обменное взаимодействие замедляет процесс спиновой перестройки.

Монотонность УС  $P(V)$  в интерполяционной модели, тем не менее, привела к осциллирующей зависимости в ее производной - скорости звука. Возникшая аномалия имеет простую физическую причину - скачки в заполнении спина сопровождаются скачками в заполнении уровней Ландау, что проявляется в выражении для электронной плотности и ее моментов.

Дальнейшее развитие обнаруженных осцилляционных эффектов полу-

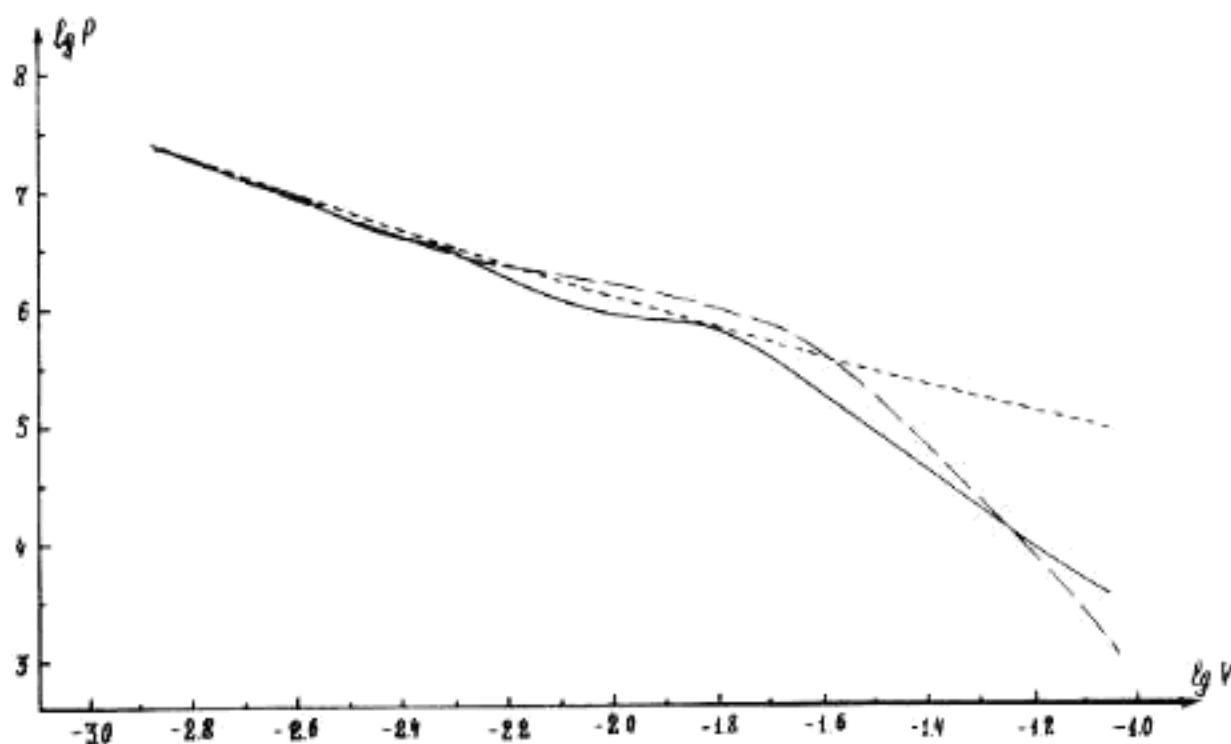


Рис. 12

чило в модели, учитывающей квантование Ландау. Модель справедлива в диапазоне полей (9). Квантование орбит в ней приводит к естественным зависимостям в поведении термодинамических коэффициентов.

Примеры изотерм при температурах  $T = 0, 10, 300$  (поле  $B = (10, \dots) \text{ э}^{4/3}$ ) представлены на рис. 12. Наблюдается качественное согласие более строгой модели с интерполяционной моделью, на изотермах существуют участки, где  $\partial^2 p / \partial V^2 < 0$ . Данные участки обусловлены заполнением очередного уровня Ландау, и они исчезают в пределе высоких температур  $T \sim B$ , поскольку дискретность уровней Ландау становится несущественной.

### ВЫВОДЫ

I. Выполнен математический анализ квантовомеханических методов ЛКАО-типа, включая вопросы сходимости начального приближения, дано обоснование кластерного приближения. Разработан пакет программ квантовой механики.

II. Впервые получены выражения для функционала энергии электронной системы в сильном магнитном поле с учетом квантовых поправок. Обоснованы границы применимости полученных выражений.

III. Молекулярно-динамические расчеты и на их основе:

Обнаружение гексатической фазы, связь устойчивости решетки с пиннигирующими центрами, корреляционный анализ (корреляционные длины).

Обнаружение области отрицательных значений статической диэлектрической проницаемости.

Предложена модель диффузии и дана интерпретация высоких значений теплоемкости, локализованы области соответствующих фаз.

IV. Расчет в приближении ШЦЦ/2 показано, что многоцентровая

адсорбция энергетически более выгодна, чем одноцентровая. Получены энергии адсорбции, десорбции и зарядовые состояния в случае адсорбции атомов и молекул на гранях (111) и (100) *Ge* и *Ni*.

У. Обнаружение корреляции между координацией атома в объеме или на поверхности с числом поверхностных состояний. Получение плотности электронных состояний неидеальных поверхностей ковалентных кристаллов.

УІ. Обнаружение дефектов нового типа - ориентационных (полувакансия, пара полувакансий).

УІІ. Расчет электронных термов, дипольных и квадрупольных моментов примесных центров и экситонов с 1 и 2 электронами.

УІІІ. Рассчитаны критические значения магнитного поля для диссоциации биэкситона. Предсказывается возникновение  $ex_2$  и  $ex_2^+$  с новым типом связи в магнитном поле.

ІХ. Обнаружены аномалии в термодинамических коэффициентах среды в магнитном поле при больших сжатиях. Получены уравнения состояния кристалла в сильных магнитных полях и при больших сжатиях.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Гадияк Г.В., Рузанкин С.Ф. Численное моделирование потенциалов в твердом теле. ЧММСС, 1973, т.4, № 5, с.157 - 165.
2. Волокитин А.И., Гадияк Г.В., Мороков Ю.Н., Репинский С.М., Карпушин А.А., Ржанов А.В. Исследование хемосорбции атома кислорода на поверхностях (111) и (100) германия методом РМХ и ПЩЦ/2, ФТП, 1976, т.10, в.3, с.436 - 442.
3. Волокитин А.И., Гадияк Г.В., Карпушин А.А., Мороков Ю.Н., Репинский С.М., Ржанов А.В. Исследование хемосорбции молекул кислорода на поверхностях (111) и (100) германия методом ПЩЦ/2, ФТП, 1976, т.10, в.10, с.1866 - 1871.
4. Гадияк Г.В., Чигишева Т.М. Модифицированный метод расчета потенциала в атоме. ЧММСС, 1976, т.7, № 1, с.43 - 46.
5. Гадияк Г.В., Лозовик Ю.Е. Атом в сильном магнитном поле. Сб. трудов III Всесоюзного семинара по моделям механики сплошной среды. /Под ред. акад.Н.Н.Яненко./ - Новосибирск, ВЦ СО АН СССР, 1976, с. 211 - 215.
6. Баранов А.И., Гадияк Г.В., Рузанкин С.Ф. Численное моделирование динамики радиационных повреждений в кремнии. Депонирована, ДЭ № 1492, № 16, 1976.
7. Гадияк Г.В., Мороков Ю.Н., Репинский С.М. Анализ потенциальной



- поверхности для идеальной грани (100) германия. ЖФХ, 1978, т. LP, с.2958 - 2960.
8. Гадияк Г.В., Карпушин А.А., Мороков Ю.Н. Квантовохимические методы в задачах адсорбции на поверхностях полупроводников. В сб.: Проблемы физики и химии поверхности полупроводников. Новосибирск, Наука, 1978, с.72 - 78.
9. Гадияк Г.В., Расчет полувакансии и пары полувакансий методом ШДП/2. ФТП, 1978, т.12, в.2, с.1824 - 1825.
10. Гадияк Г.В., Мороков Ю.Н., Репинский С.М. О характере адсорбционного состояния кислорода на поверхности германия. ФТП, 1978, т.12, в.6, с.1228 - 1230.
11. Гадияк Г.В., Насыров К.А. Оболочечные эффекты в неупругих столкновениях атома с кристаллом. ЖТФ, 1979, т.49, в.10, с.2111 - 2113.
12. Gadizak G.V., Lozovik Yu.E. Many-electron atoms in high magnetic fields. Physics B, 1980, v.13, p.1531 - 1535.
13. Гадияк Г.В., Рузанкин С.Ф. Численное моделирование нарушений в полупроводниках квантовохимическими методами. - В сб.: Радиационные эффекты в полупроводниках. /Под ред проф. Л.С.Смирнова./ Новосибирск, Наука, 1979, с.6 - 20.
14. Гадияк Г.В., Карпушин А.А., Мороков Ю.Н., Репинский С.М. Расчет адсорбции молекулы воды на поверхности германия. ЖФХ, 1980, т. LIY, № 2, с.419 - 422.
15. Гадияк Г.В., Лозовик Ю.Е. Водородоподобные ионы в сверхсильном магнитном поле. Оптика и спектроскопия, 1981, т.50, в.5, с.992 - 994.
16. Гадияк Г.В., Обрехт М.С. Уравнение состояния холодного вещества в сверхсильном магнитном поле. Теплофизика высоких температур, 1981, т.19, № 1, с.206 - 208.
17. Гадияк Г.В., Малкин В.Г., Мороков Ю.Н., Рузанкин С.Ф. Расчет молекулы  $Ge_2$  методом  $X_\infty$ -РВ. Структурная химия, 1981, т.22, № 2, с.38 - 42.
18. Gadizak G.V., Obrecht M.S., Yanenko N.N. Anomalous acoustic velocity at high Pressure for condensed matter in a superstrong magnetic field. Phys. Lett A, 1980, v.80, № 2,3, p.191, 192.
19. Гадияк Г.В., Обрехт М.С., Яненко Н.Н. Численное моделирование атома в сверхсильном магнитном поле. ЧМСС, 1980, т.11, № 3, с.27 - 47.
20. Гадияк Г.В., Малкин В.Г., Чернов С.В. Метод  $X_\infty$  в расчетах

молекул и кластеров. Новосибирск, ИТПМ СО АН СССР, препринт № 36, 1980, -58 с.

21. Гадияк Г.В., Мороков Ю.Н., Мухачев А.Г., Чернов С.В. Метод функционала электронной плотности для расчета молекулярных систем. ЖСХ, 1981, т. 22, № 5, с. 36-40.

22. Гадияк Г.В., Малкин В.Г., Мороков Ю.Н., Чернов С.В. Расчеты методом  $X_\alpha$  электронных свойств молекул и больших кластеров. ЖСХ, 1982, т. 23, № 2, с. 125-139.

23. Гадияк Г.В., Мороков Ю.Н., Кушкова А.С., Репинский С.М. Перестройка решетки грани германия (100). ФТП, 1981, т. 15, № 9, с. 1838.

24. Gadizak G.V., Lozovik Yu.E., Mashchenko A.I., Obrecht M.S. Spectra of helium-like systems in a superstrong magnetic field. Phys.Lett. A, 1981, v. 87, N 1,2, p. 18-20.

25. Гадияк Г.В., Обрехт М.С., Яненко Н.Н. Уравнение состояния А-е фазы коры пульсара с учетом действия сверхсильного магнитного поля. Астрофизика, 1981, т. 17, вып. 4, с. 766-774.

26. Беданов В.М., Гадияк Г.В., Романов О.В. Хемосорбция некоторых переходных металлов на поверхности (111) германия методом ПДЦ/2. ЖФХ, 1981, т. 19, № 5, с. 1356-1358.

27. Гадияк Г.В., Лозовик Ю.Е., Машенко А.И., Обрехт М.С. Спектры и силы осцилляторов водородоподобных и гелиеподобных систем в сверхсильном магнитном поле. Оптика и спектроскопия, 1984, т. 56, вып. 1.

28. Gadizak G.V., Lozovik Yu.E., Mashchenko A.I., Obrecht M.S. The spectrum and dipole and quadrupole moments of hydrogen-like and helium-like ions superstrong magnetic fields. J.Phys. B, 1982, v. 15, N 16, p. 2615-2626.

29. Беданов В.М., Гадияк Г.В., Лозовик Ю.Е. Фазовый переход в системе двумерных электронов. - В сб.: Уравнения состояния. /Под ред. Г.В.Гадияка./ Новосибирск, ИТПМ, 1981, с. 39-54.

30. Беданов В.М., Гадияк Г.В., Лозовик Ю.Е. О фазовом переходе кристалл-жидкость в системе двумерных электронов. ФТП, 1982, т. 24, вып. 3, с. 928-930.

31. Bedanov V.M., Gadizak G.V., Lozovik Yu.E. Melting in two-dimensional system with dipole. Phys.Lett. A., 1982, v. 92, N 8, p. 400-402.

32. Гадияк Г.В., Карпушин А.А., Мороков Ю.Н., Томашек М. Расчеты объемных и поверхностных электронных свойств алмазоподобных полупроводников. ФТП, 1983, т. 17, вып. 6, с. 1025-1029.

33. Гадияк Г.В., Мороков Ю.Н., Томашек М. Расчеты методом ПЦП/2 хемосорбции некоторых газов на гранях (111) и (100) никеля. ЖФХ, 1983, т. ЛУП, № 2, с. 370-376.
34. Беданов В.М., Гадияк Г.В., Лозовик Ю.Е. Фазовый переход в двумерной системе взаимодействующих диполей. ФТТ, 1983, т. 25, № 1, с. 207-213.
35. Гадияк Г.В., Малкин В.М., Чернов С.В. Расчет методом  $X_d$  электронных свойств молекул и больших кластеров. Журнал: теоретическая и прикладная механика, БАН, 1982, т. 13, № 3,4, с. 37-51.
36. Гадияк Г.В., Лозовик Ю.Е., Обрехт М.С. Биэкситон в сверхсильном магнитном поле. ФТТ, 1983, т. 25, вып. 4, с. 1063-1067.
37. Беданов В.М., Гадияк Г.В., Димов С.В., Радев С. Фазовый переход в двумерной системе с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса. - Новосибирск, 1983, ИТПМ СО АН СССР, препринт № 1-83, -46с.
38. Гадияк Г.В., Мороков Ю.Н. Полуэмпирические методы расчета задач поверхности полупроводников. Препринт доклада. II семинар "Физическая химия поверхности монокристаллических полупроводников", ИФП СО АН СССР, Новосибирск, 1975, - 6 с.
39. Беданов В.М., Гадияк Г.В. Фазовый переход в двумерной системе с потенциалами взаимодействия Леннарда-Джонса, дипольного и кулоновского типов. - Новосибирск, 1983, ИТПМ СО АН СССР, препринт № 29-83, - 35 с.
40. Беданов В.М., Гадияк Г.В. Численные эксперименты в двумерной системе с фазовым переходом. - В сб.: Модели механики сплошной среды. /Под ред. Г.В.Гадияка./ Новосибирск, ИТПМ, 1983, с.300-325.
41. Gadizak G.V., Lozovik Yu.E., Obrecht M.S. Diamagnetic biexciton. Magnetic field induced dissociation and change of binding type. J.Phys. C, 1983, v. 16,