формации пространства при $x^0=0$ равна нулю; *3*) по всем координатным осям скорость деформации пространства при $x^0=0$ равна нулю. Случаи *2, 3* имеют место только при специальном выборе начальных данных. Неравенство (10) определяет ограничение на ускорение деформации пространства при $x^0=0$ по разным координатным осям.

Вблизи регулярного минимума R объем элемента пространства изменяется по закону

$$V=(V)_0+\frac{1}{2}(\ddot{V})_0 t^2+\ldots,\ (\ddot{V})_0\geqslant 0.$$

Из (3) легко видеть, что в случае идеальной среды $(\dot{\rho})_0=0$, $(\ddot{\rho})_0\leqslant 0$, тогда вблизи регулярного минимума R плотность ρ изменяется по закону $\rho=(\rho)_0+(1/2)(\ddot{\rho})_0 t^2+\ldots$, таким образом, момент максимума плотности совпадает с моментом минимума объема. Однако в случае вязкой среды эти два момента не совпадают и плотность изменяется по закону $\rho=(\rho)_0+(\dot{\rho})_0 t+(1/2)(\ddot{\rho})_0 t^2+\ldots$, причем $(\dot{\rho})_0>0$.

Скалярное уравнение Эйнштейна в х. и. форме при $x^0=0$ можно представить в виде [3]

$$3\left(\frac{{}^*\ddot{R}}{R}\right)_0+(\Pi_{ik}\Pi^{ik})_0-(A_{ik}A^{ik})_0+\left({}^*\nabla_j F^j-\frac{1}{c^2}F_j F^j\right)_0=$$
$$=-\frac{\varkappa}{2}(\rho c^2+3p)_0+\Lambda c^2.$$

Поскольку ${}^*\ddot{R}\geqslant 0$ на гиперповерхности $x^0=0$, где достигается регулярный минимум R, и $\Pi_{ik}\Pi^{ik}\geqslant 0$ именно в силу наличия вращения (A_{ik} — х. и. тензор угловой скорости вращения) или отрицательной физической дивергенции гравитационно-инерциальной силы при $x^0=0$, начальное значение плотности $(\rho)_0$ может быть задано положительным.

Автор выражает искреннюю благодарность А. Л. Зельманову и Л. П. Грищуку за помощь в работе и ценные замечания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Зельманов А. Л. К вопросу о деформации сопутствующего пространства в теории тяготения Эйнштейна. — ДАН СССР, 1960, **135**, № 6, с. 1367—1370. [2] Белинский В. А., Лифшиц Е. М., Халатников И. М. Колебательный режим приближения к особой точке в релятивистской космологии. — УФН, 1970, **102**, № 3, с. 463—500. [3] Зельманов А. Л. К релятивистской теории анизотропной неоднородной вселенной. — В кн.: Тр. 6-го сов. по вопросам космогонии. М., 1957; изд. АН СССР, М., 1959, с. 144—173. [4] Синг Д. Общая теория относительности. М., 1963, 432 с. [5] Петровский И. Г. Лекции об уравнениях с частными производными. М., 1961, 400 с. [6] Грищук Л. П. К проблеме сингулярностей в решениях уравнений Эйнштейна. Автореф. канд. дис. М., ГАИШ, 1967, 8 с.

Поступила в редакцию
09.04.79

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1981, т. 22, № 2

УДК 539.293.5.011

ГЛУБОКИЙ ХВОСТ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ В СИЛЬНО ЛЕГИРОВАННОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ

Н. В. Бурбаева

(кафедра физики полупроводников)

Задача о глубоком хвосте плотности состояний в полупроводнике, легированном мелкими примесными атомами, была рассмотрена методом оптимальной флуктуации [1] в работе [2]. Были получены ре-

зультаты для предельно глубоких уровней в предположении, что потенциалы, создаваемые отдельными примесными ионами, не экранированы. В настоящей работе та же задача рассматривается с учетом экранировки при условии дебаевского закона экранирования. Предполагается, что в полупроводнике имеются два сорта примесей — доноры и акцепторы. Для определенности будем интересоваться глубокими донорными состояниями. Как и в [2], вычисления будем проводить в рамках метода эффективной массы, интересуясь уровнями с энергией ионизации E, существенно меньшей ширины запрещенной зоны, E_g. В соответствии с методом работы [1] избыточную плотность примесных атомов в оптимальной флуктуации, $\widetilde{\xi}_д(\mathbf{r})$ и $\widetilde{\xi}_а(\mathbf{r})$, можно вычислить по формулам:

$$\widetilde{\xi}_д(\mathbf{r}) = N_д \left\{\exp\left[\beta \int |\psi(\mathbf{r}')|^2 v_д(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}'\right] - 1\right\}, \tag{1}$$

$$\widetilde{\xi}_а(\mathbf{r}) = N_а \left\{\exp\left[\beta \int |\psi(\mathbf{r}')|^2 v_а(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}'\right] - 1\right\}. \tag{2}$$

Здесь индексы д, а относятся к донорам и акцепторам соответственно: $N_а$ и $N_д$ — концентрации примесей, β — неопределенный множитель Лагранжа, введенный в работе [1], $\psi(\mathbf{r})$ — волновая функция электрона в основном состоянии оптимальной потенциальной ямы; $v_{д,а}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ — потенциальная энергия электрона в поле отдельного заряженного донора или акцептора.

Волновая функция, $\psi(\mathbf{r})$, определяется приближенно вариационным методом, аналогично работе [3]. Точная волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ должна реализовать экстремум функционала

$$J'[\psi] = S\{\widetilde{\xi}_д[\psi], \widetilde{\xi}_а[\psi]\} + \beta \int \psi^*(\mathbf{r})\, \widehat{H}[\psi]\, \psi(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} =$$

$$= \int \left\{(N_д + \widetilde{\xi}_д[\psi]) \ln \frac{N_д}{N_д + \widetilde{\xi}_д[\psi]} + \widetilde{\xi}_д[\psi]\right\} d\mathbf{r} +$$

$$+ \int \left\{(N_а + \widetilde{\xi}_а[\psi]) \ln \frac{N_а}{N_а + \widetilde{\xi}_н[\psi]} + \widetilde{\xi}_а[\psi]\right\} d\mathbf{r} + \beta \int \psi^*(\mathbf{r})\, \widehat{H}[\psi]\, \psi(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} \tag{3}$$

при дополнительных условиях

$$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1,$$

$$E = \int \psi^*(\mathbf{r})\, \widehat{H}[\psi]\, \psi(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}. \tag{4}$$

Здесь

$$\widehat{H}[\psi] = -\frac{\hbar_2}{2m}\Delta + \int [\widetilde{\xi}_д(\mathbf{r}')\, v_д(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + \widetilde{\xi}_а(\mathbf{r}')\, v_а(\mathbf{r}-\mathbf{r}')]\, d\mathbf{r}',$$

а $\widetilde{\xi}_д[\psi]$ и $\widetilde{\xi}_а[\psi]$ определяются формулами (1) и (2).

Предположим, что волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ имеет простой водородоподобный вид:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}\, e^{-\alpha r}, \tag{5}$$

где α — варьируемый параметр.

Подставляя выражение (5) в (1) и (2), и полагая, что

$$v_{д,а}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \mp \frac{z_{д,а} e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{r_0}\right), \tag{6}$$

получаем:

$$\widetilde{\xi}_{\text{д}}(\mathbf{x}) = N_{\text{д}}\left\{\exp\frac{t'}{x}\left[e^{-x/\alpha'} - \left(1 + x\left(1 - \frac{1}{4(\alpha')^2}\right)\right)e^{-2x}\right] - 1\right\}, \quad (7)$$

$$\widetilde{\xi}_{\text{а}}(\mathbf{x}) = N_{\text{а}}\left\{\exp\left(-\frac{t'z_{\text{а}}}{xz_{\text{д}}}\left[e^{-x/\alpha'} - \left(1 + x\left(1 - \frac{1}{4(\alpha')^2}\right)\right)e^{-2x}\right]\right) - 1\right\}, \quad (8)$$

где введены обозначения:

$$\alpha' \equiv \alpha r_0, \ \mathbf{x} \equiv \alpha \mathbf{r}, \ t' \equiv -16\beta z_{\text{д}} e^2 \alpha^5 \varepsilon^{-1}\left[4\alpha^2 - \frac{1}{r_0^2}\right]^{-2}. \quad (9)$$

Интересуясь глубокими донорными уровнями с энергией ионизации $|E| \gg W_B$, предположим, что оптимальная флуктуация такова, что в центре ее выполняется условие: $\widetilde{\xi}_{\text{д}} \gg N_{\text{д}}$. Как следует из формул (7), (8), это одновременно означает: $t' \gg 1$, $\widetilde{\xi}_{\text{а}} \ll N_{\text{а}}$, а следовательно, и $\widetilde{\xi}_{\text{а}} \ll \widetilde{\xi}_{\text{д}} (N_{\text{а}} \leqslant N_{\text{д}})$.

Аналогично работе [3] для дальнейших вычислений заменим выражения (7) и (8) приближенными:

$$\widetilde{\xi}_{\text{д}}(\mathbf{x}) \approx N_{\text{д}} \exp[t(1 - ax)],$$

$$\widetilde{\xi}_{\text{а}}(\mathbf{x}) \approx 0, \quad (10)$$

где

$$t \equiv t'(A - 0{,}5B); \quad a = -B(A - 0{,}5B)^{-1};$$

$$A = \frac{1}{x_0}\left[e^{-x_0/\alpha'} - e^{-2x_0}\left[1 + x_0\left(1 - \frac{1}{4(\alpha')^2}\right)\right]\right];$$

$$B = \frac{1}{x_0^2}\left[-\left(1 + \frac{x_0}{\alpha'}\right)e^{-x_0/\alpha'} + e^{-2x_0}\left[(x_0 + 1)^2 + x_0^2\left(1 - \frac{1}{2(\alpha')^2}\right)\right]\right].$$

A и B — коэффициенты разложения аргумента экспоненты (7) в ряд Тейлора в точке $x_0 = 0{,}5$. Можно показать, что относительную ошибку Δ, возникающую в дальнейшем при вычислении энергии E и «энтропии» $S\{\widetilde{\xi}\}$ с помощью приближенных формул (10), можно оценить по формуле:

$$\Delta \sim \alpha' t' (at)^2 \exp\left[-\left(\frac{3}{\alpha'} + t\right)\right],$$

здесь $0{,}3 < a < 0{,}5$.

Подставляя выражения (5), (6) и (10) в уравнение $\delta J'[\psi] = 0$ с учетом (3) и (9), получаем аналогично [3] уравнение для α':

$$(1 + 2\alpha')^3\left\{(\alpha')^4 + \frac{32\pi e^t}{(at)^3}\delta\left[\frac{6(at)^2 + 8(at) + 4}{(at + 2)^4}\right]\right\} = \frac{32\pi e^t}{(at)^3}\delta(\alpha')^2(2\alpha' + 3), \quad (11)$$

где $\delta \equiv \frac{N_{\text{д}} r_0^4}{a_B}$.

Затем из уравнения (4) находим для энергии ионизации E:

$$-\eta \equiv \frac{E}{\hbar/2mr_0^2} = (\alpha')^2 - \frac{64\pi e^t}{(at)^3}\delta\left[\frac{1}{(1 + 2\alpha')^2} - \frac{2(at + 1)}{(at + 2)^3(\alpha')^2}\right]. \quad (12)$$

Используя (7) и (10), получаем для величины S

$$S\frac{r_0}{a_B} = -\frac{4\pi e^t}{(\alpha')^3}\delta\left\{t'\left[\frac{1}{(at + 1/\alpha')^2} - \frac{at + 4}{(at + 2)^3}\right] - \frac{2}{(at)^3}\right\}. \quad (13)$$

Система уравнений (11), (12) и (13) позволяет определить безразмерный радиус локализации электрона $1/\alpha r_0 = 1/\alpha'$ и величину S (а тем самым и плотность состояний $\rho(E)$ с экспоненциальной точностью: $\rho(E) \sim \exp[S(E)]$). Соответствующие графики представлены на рис. 1 и 2.

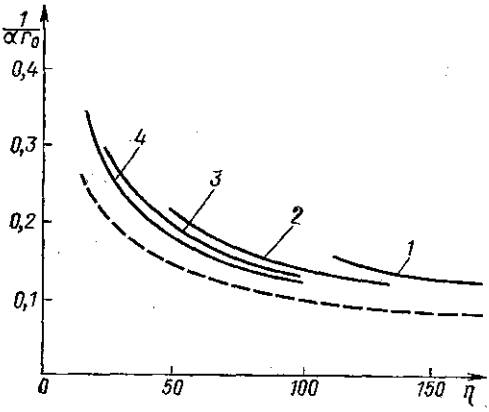

Рис. 1. Зависимость безразмерного радиуса локализации электрона $1/\alpha r_0$ от энергии $-\eta = \frac{E}{\hbar^2/2mr_0^2}$. Пунктирная кривая соответствует зависимости $1/\alpha r_0 = 1\sqrt{|\eta|}$. $\delta=10$ (*1*), 3 (*2*), 1 (*3*) и 0,5 (*4*)

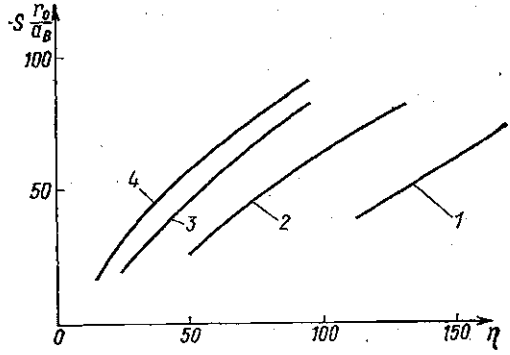

Рис. 2. Зависимость величины Sr_0/a_B от безразмерной энергии $-\eta = \frac{E}{\hbar^2/2mr_0^2}$.

Обозначения те же, что на рис. 1

Наши результаты показывают, что распределение атомов примеси в оптимальной флуктуации с фиксированной энергией основного состояния существенно зависит от r_0. На рис. 3 приведены графики зависимости безразмерной избыточной плотности примесных атомов $\tilde{\xi}_д(r)/N_д$ и потенциальной энергии электрона $V(r)$ от расстояния от центра флуктуации r для двух оптимальных флуктуационных ям. В обоих случаях речь идет о материале с параметрами германия при $N_д = 10^{18}$ см$^{-3}$ и при одной и той же энергии основного состояния $E = -0{,}063$ эВ; однако первые кривые рассчитаны при $r_0 = 3{,}16 \cdot 10^{-7}$ см, а вторые — при $r_0 = 7{,}96 \cdot 10^{-7}$ см. Вероятности реализации таких флуктуаций существенно различны: в первом случае $S = -19{,}8$, во втором $S = -10$, т. е. соответствующие плотности состояний отличаются больше,

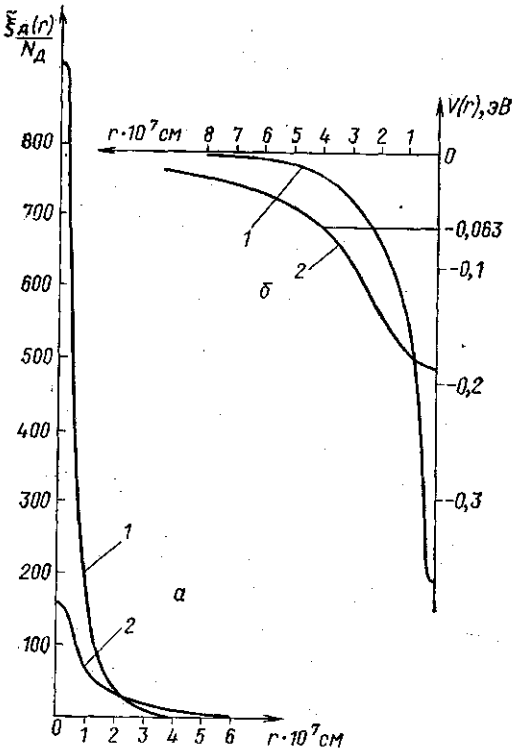

Рис. 3. Избыточная плотность примесных атомов $\tilde{\xi}_д(r)$ в зависимости от расстояния от центра флуктуации r (*а*). Потенциальная энергия электрона $V(r)$ в зависимости от r (*б*). *1* — $r_0 = 3{,}16 \cdot 10^{-7}$ см; *2* — $r_0 = 7{,}96 \cdot 10^{-7}$ см

чем на четыре порядка. Эти результаты дают основания полагать, что учет эффекта экранирования в данной задаче необходим. Как было показано в работе [3], наши результаты совпадают с результатами работы [2] в случае предельно больших энергий ионизации. Как следует из уравнений (11), (12) и (7), предельный переход $E \to -\infty$ одновременно означает $t \to \infty$, $t' \to \infty$ и $\tilde{\xi}_д(0) \to \infty$. В рамках принятых нами предположений $\tilde{\xi}_д(r)$ не может превышать величину порядка 10^{22} см$^{-3}$, поскольку при таких концентрациях начинают действовать межатомные силы отталкивания. Оценка по формуле (7) показывает, что в случае $N_д \sim 10^{18}$ см$^{-3}$ это равносильно ограничению: $t < 15$. Еще более жесткое ограничение связано с условиями применимости метода эффективной массы: в материале с параметрами германия ограничение на энергию $|E| < 0{,}1$ эВ равносильно $t < 8{,}25$, если $r_0 = 3{,}16 \cdot 10^{-7}$ см, и $t < 5{,}5$, если $r_0 = 10^{-6}$ см. В работе [2] показано, что в случае предельно больших энергий оптимальное скопление имеет линейный размер, существенно меньший, чем область локализации электрона. Из наших результатов следует, что линейный размер оптимальной флуктуации может быть сравним с радиусом экранирования r_0. Атомы примеси в скоплении распределены неравномерно; форма распределения плавно изменяется с ростом энергии ионизации. Меньшим энергиям при прочих равных условиях соответствуют более «размазанные» скопления, а бо́льшим энергиям — более сконцентрированные в центре. Изменение вида $\tilde{\xi}_д(r)$ с ростом энергии ионизации можно проследить по формуле (7), увеличивая параметр t'.

В заключение автор выражает свою глубокую благодарность В. Л. Бонч-Бруевичу за постоянное внимание и помощь в работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Лифшиц И. М. Теория флуктуационных уровней в неупорядоченных системах. — ЖЭТФ, 1967, 53, № 2 (8), с. 743—758. [2] Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Глубокие хвосты плотности состояний и поглощение света в полупроводниках. — ЖЭТФ, 1970, 58, № 2, с. 657—665. [3] Бурбаева Н. В. Глубокий хвост плотности состояний в сильнолегированном вырожденном полупроводнике. — Деп. ВИНИТИ, № 1167—79, от 3.04.79 г.

Поступила в редакцию
16.04.79

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1981, т. 22, № 2

УДК 669.017.3

РАСПАД β-ТВЕРДОГО РАСТВОРА В СПЛАВАХ Zr с Nb, Mo, Al, V

М. И. Захарова, А. А. Аминов

(кафедра физики твердого тела)

Цирконий представляет большой интерес для атомной техники благодаря малому сечению захвата тепловых нейтронов. Для получения материалов с высокой прочностью, пластичностью и антикоррозионной стойкостью цирконий легируют ниобием, алюминием, молибденом и другими элементами [1].

В данной работе проводилось исследование фазовых превращений в сплавах циркония с ниобием, алюминием, молибденом, ванадием, в которых из ОЦК β-твердого раствора выделяются фазы с различными механизмами их образования.