следнего случая толщина переходного слоя сопоставима с критической и релаксация напряжений может пойти путем образования сетки дислокаций. Кроме того, реальные пленки всегда обладают некоторым количеством различных дефектов, которые могут стать самостоятельными центрами образования дислокаций в упругом поле напряжений несоответствия.

Можно сделать вывод, что даже в том случае, когда пленка и подложка согласованы по параметру решетки, напряжения несоответствия возникают из-за диффузии в переходном слое, а следовательно, будет происходить формирование дислокаций несоответствия и анизотропной остаточной упругой деформации, которые могут изменить рабочие параметры и физические свойства гетероструктуры.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Vasil'ev A. N., Nikiforov V. N., Malinski I. M. et al.//Semicond. Sci. and Technol. 1990. **5**, N 11. P. 1105. [2] Woolhouse G. R. et al.//J. Vac. Sci. Technol. 1985. **A3**, N 1. P. 83. [3] Тхорик Ю. А., Хазан Л. С. Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных структурах. Киев, 1983. [4] Basson J. H., Booyens H.//Phys. Stat. Solidi (a). 1983. **80**. N 2. P. 663. [5] Васильев А. Н., Гайдуков Ю. П., Никифоров В. Н. А. с. 4299270 СССР. [6] Landolt-Bornstein. New series. Vol. 17f, Semiconductors: Physics of Tetrahedral Compounds. Springer-Verlag, 1982. [7] Dinan J. H., Qadri S. B.//Thin Solid Films. 1985. **131**. P. 267.

Поступила в редакцию
24.05.93

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1994. Т. 35, № 2

УДК 621.315.592

ПРИМЕСНОЕ ЭКРАНИРОВАНИЕ В КОМПЕНСИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

А. Г. Миронов

(кафедра физики полупроводников)

Рассчитан ряд эффектов случайного поля в компенсированных полупроводниках в условиях примесного экранирования. Найдено распределение потенциальной энергии в зависимости от степени компенсации K и радиуса экранирования r_0. Самосогласованным образом определены зависимости r_0 и уровня Ферми от K и температуры. Конкретные результаты даны для случая германия с многозарядным акцептором — золотом и донорами.

Общепризнана роль эффектов случайного поля, неизбежно присутствующего в легированных полупроводниках, в формировании их наблюдаемых физических характеристик. В особенности это относится к подвижности носителей заряда, радиусу экранирования, энергетическому положению уровня Ферми. Последнее зависит от положения и ширины примесных пиков плотности состояний в запрещенной зоне и в свою очередь определяет эффективность примесного экранирования за счет перераспределения электронов по центрам локализации, а вместе с тем и суммарное случайное поле в системе. Однако существующий количественный анализ названных эффектов весьма неполон, а отдельные оценки для простоты делаются в гауссовом приближении для распределения случайного поля без установления пределов его применимости.

В настоящей работе находится удобное для приложений представление для распределения $\mathscr{P}(V)$ случайной потенциальной энергии электрона V при хаотическом расположении примеси в компенсированном материале в предположении, что все потенциалы примесных центров разных сортов имеют форму дебаевски экранированного кулоновского потенциала с различными по знаку и величине зарядами Ze. Вторая цель состоит в самосогласованном расчете радиуса примесного экранирования r_0 и положения уровня Ферми μ как функций концентраций примеси, степени компенсации K и температуры T. Рассматриваются столь низкие температуры, что можно пренебречь наличием свободных носителей заряда, так что экранирование осуществляется путем перераспределения электронов, ушедших с полностью опустошенных мелких уровней доноров, по различным акцепторным центрам. Энергетические уровни, на которые попадают электроны, под влиянием случайного потенциала прочих центров оказываются разбросанными так, что плотность состояний пропорциональна $\mathscr{P}(V)$. Заполнение такой примесной полосы согласно фермиевскому распределению определяет положение μ и величину r_0, а этими параметрами в свою очередь задается суммарный потенциал V и его распределение. Таким образом, вторая задача должна решаться самосогласованным образом с использованием фактического распределения $\mathscr{P}(V)$, оказывающегося заметно отличным от обычно используемого гауссова. Процедура самосогласования технически сложна, почему и необходимо иметь компактное и достаточно универсальное (для разных комбинаций примесей) выражение для распределения $\mathscr{P}(V)$ (или его фурье-образа по V, непосредственно фигурирующего в расчетах наблюдаемых величин). В практических применениях положение часто осложняется тем, что актуальными оказываются промежуточные степени компенсации и такие температуры, при которых приближение вырожденной статистики непригодно.

В качестве конкретного примера рассмотрим германий с золотом (в концентрации N) и мелкими донорами — атомами сурьмы [1]. Концентрация последней равна $N_{+1}=(2+K)N$, при этом имеется $N_{-2}=(1-K)N$ ионов золота с двумя электронами и $N_{-3}=KN$ — с тремя. Примесное экранирование происходит путем перераспределения KN третьих электронов ($0<K<1$) по золоту. В отсутствие случайного поля многозарядный акцептор Au имеет в запрещенной зоне уровни, лежащие на 0,2 и 0,04 эВ ниже дна E_c зоны проводимости. Таким образом, энергетические расстояния от полосы вблизи уровня E_c —0,04 эВ до уровня двухзарядного золота E_c —0,2 эВ или до дна зоны проводимости и близких к ней уровней мелких доноров велики как по сравнению с kT (величиной порядка нескольких мэВ в интересующем нас интервале температур от $5\div 8$ до $30\div 40$ К), так и по сравнению с ожидаемой шириной распределения $\mathscr{P}(V)$ (также порядка нескольких единиц мэВ). Последняя оценка следует просто из величины кулоновского потенциала на характерном межпримесном расстоянии $l=N^{-1/3}$: $E_l=e^2/\varepsilon l$ ($\sim$0,9 мэВ при $\varepsilon=16$ и $N\sim 10^{15}$ см$^{-3}$). В описанной ситуации допустимо рассматривать только форму и заполнение одной полосы, происходящей из примесного уровня E_c —0,04 эВ.

Существенной чертой подхода является выбор дебаевски экранированного потенциала для отдельного центра. Основанием для этого служит достаточно сильное перекрытие полей различных центров, характеризуемое параметром $W=4\pi N r_0^3 \gg 1$, дающим число центров в сфере с радиусом действия потенциала. Учет более тонких эффектов кулоновского взаимодействия выходит за рамки данной работы, и распределение в пространстве центров всех сортов принимается полностью хаотичным; при этом не следует рассматривать далекие по энергии хвосты распределения $\mathcal{P}(V)$, обусловленные близкими в пространстве центрами.

В рамках такой постановки проблемы известно формально замкнутое выражение для $\mathcal{P}(V)$ хольцмарковского типа в задаче с центрами одного сорта [2, 3]. Наличие нескольких сортов центров не принципиально, и соответствующее обобщение выполняется без труда. Затруднение, однако, вызывает использование этого результата ввиду отсутствия для $\mathcal{P}$ явного окончательного выражения, пригодного для непосредственного применения в последующих расчетах наблюдаемых величин. Как правило, берется гауссово приближение [4—6] или же предпринимаются попытки численного расчета, как, например, в работе [7]. Авторам [7], однако, даже для анализа одной частной ситуации пришлось выполнить весьма трудоемкий расчет и, что особенно неудовлетворительно, прибегнуть к искусственному обрезанию потенциала на малых расстояниях от центра.

Перейдем к решению первой из поставленных задач. Возьмем в качестве единицы длины радиус экранирования r_0, а безразмерную энергию $E=V/E_0$ $(E_0=e^2/\varepsilon r_0)$ будем отсчитывать от указанного уровня одиночного центра, перенормированного с учетом фактора вырождения уровня.

Для фурье-образа $P(t)$ искомого распределения,

$$P(t)=\int\limits_{-\infty}^{\infty} dE\exp\{-iEt\}\,\mathcal{P}(E),$$

используя стандартный метод [2], получим факторизованное выражение

$$P(t)=p_{+1}(t)\,p_{-2}(t)\,p_{-3}(t) \tag{1}$$

(индекс Z при парциальных распределениях p_Z отвечает заряду Ze центра соответствующего типа) с

$$p_Z(t)=\exp\{N_Z W f(Zt)/N\}, \tag{2}$$

где

$$f(t)=\int\limits_0^{\infty} x^2\,dx\,[\exp\{it\,\mathrm{e}^{-x}/x\}-1]. \tag{3}$$

Именно для этой функции $f(t)$ надо получить достаточно удобное явное представление. После этого, как видно из формул (1), (2), распространение результатов на другие подобные задачи (с различными комбинациями сортов и зарядов центров) проводится непосредственно. Функция $f(t)$ неаналитична в точке $t=0$, как видно из следующего ее разложения при $|t|\ll 1$:

$$f(t)\approx i\,[t+(t^3/6)(\ln|t|+B-\pi t/2)]-t^2/4+\pi|t|^3/12+$$
$$+(t^4/6)\ln 4|t|-(t^4/30)(11-2C)+\ldots, \tag{4}$$
$$B=2C+\ln 3-11/6\approx 0{,}42;\quad C=0{,}5772\ldots$$

Отметим, что в произведении (1) линейные по t слагаемые взаимно уничтожаются, что отвечает обращению в нуль среднего потенциала в данной нейтральной в целом системе. Ограничение квадратичными по t слагаемыми ведет к гауссову приближению, причем фактически требуемым большим параметром вместо W оказывается еще большая величина $\tilde{W}=6(1+K)W$ из-за совместного действия полей центров различных типов, в том числе многозарядных. Разложение (4), однако, полезно лишь для модельного исследования асимптотик распределения при $|E|\gg 1$.

Задачу явного определения $f(t)$ (а тем самым и $P(t)$) в достаточно широком интервале аргумента t помогает решить смещение контура интегрирования в (3) с вещественной оси к контуру, задаваемому уравнением $x=y\,\mathrm{tg}\,y$, с должным выполнением условий сходимости. В итоге получаем

$$f(t)=f_c(t)+if_s(t)=$$

$$=\frac{1}{3}\int\limits_0^{\pi/2} dy\,(\rho^2+2x+1)\,\xi\,\mathrm{e}^{-\xi}\left[\frac{x}{y}(3y^2-x^2)+i\,(y^2-3x^2)\right], \qquad (5)$$

$$\xi=\frac{t}{\rho}\,\mathrm{e}^{-x}, \quad \rho=y/\cos y.$$

После достигаемого этим устранения сгущающихся осцилляций подынтегральной функции численное интегрирование осуществляется легко, и результаты удается аппроксимировать явными выражениями, воспроизводящими аналитические свойства точной функции $f(t)$ (конкретнее, воспроизводятся четыре ведущих слагаемых разложения (4) и асимптотическое поведение при больших t). Эти аппроксимации, дающие относительную ошибку не более $2\cdot10^{-3}$ в интервале $0{,}01\leqslant t\leqslant200$, где диапазон изменения функции $f_c(t)$ составляет 10^6, а $f_s(t)$ — $2{,}5\cdot10^3$, таковы:

$$f_c(t)=-\frac{u^2}{4}\left\{1+\frac{u}{1+3{,}2u}\left[1{,}1346u+\left(1{,}0691-\frac{\pi}{3}\right)-0{,}2046u^2\right]\right\}, \qquad (6)$$

$$u=[\ln(1+1{,}0691t)]/1{,}0691,$$

$$f_s(t)=-\frac{1}{1+0{,}0815v}\left\{\sqrt{v}\left(1+\frac{1}{12}v\ln v+1{,}18v\right)+1{,}1085v^3\right\}, \qquad (7)$$

$$v=[\ln(1+4{,}31t^2)]/4{,}31.$$

Фактически в дальнейших расчетах, ввиду наличия большого параметра W, потребовались лишь значения $t\leqslant3$, с учетом присутствия утроенного аргумента в одном из сомножителей в (1).

Далее нетрудно рассчитать форму $\mathcal{P}(E)$:

$$\mathcal{P}(E)=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\ \exp\{iEt+WF(t,\ K)\}, \qquad (8)$$

где

$$F(t,\ K)=F_c(t,\ K)+iF_s(t,\ K)=\sum_Z N_Z f(Zt)/N=$$

$$=(2+K)\,f(t)+(1-K)\,f^*(2t)+Kf^*(3t). \qquad (9)$$

При практическом проведении интегрирования эффективным оказалось применение комбинации квадратурных формул Боде и Филона (последняя позволяет устранить помехи от регулярно осциллирующего фактора $\exp\{iEt\}$). Отметим заметную асимметрию распределения $\mathcal{P}(E)$ и небольшой сдвиг его максимума в область $E<0$. Заметим, однако, что для использования в расчетах наблюдаемых величин вполне достаточно знать не само распределение $\mathcal{P}(E)$, а явно вычисленный его фурье-образ, логарифм которого (поделенный на W) дается формулой (9).

Перейдем ко второй задаче. Радиус экранирования, который до сих пор неявно фигурировал в задаче в качестве масштаба длины, находится по следующей формуле, записанной уже в размерных единицах:

$$r_0^{-2}=\frac{4\pi e^2}{\varepsilon}N\int\limits_{-\infty}^{\infty}dE\,(-dn_F(E)/dE)\,\mathcal{P}(E), \qquad (10)$$

причем в фермиевское распределение $n_F(E)$ входит также неизвестная величина μ. Она дается очевидным условием

$$N_{-3}=KN=N\int\limits_{-\infty}^{\infty}dE\,n_F(E)\,\mathcal{P}(E). \qquad (11)$$

С использованием (9) и фурье-образа функции $n_F(E)$ уравнения (10) и (11) приводятся к виду (энергии — в единицах E_0)

$$1=WT\int\limits_0^{\infty}dt\cdot\exp\{-WF_c(t,\ K)\}\,\mathrm{cosech}\,(\pi tT)\,t\cos[\mu t+WF_s(t,\ K)], \qquad (12)$$

$$K=\frac{1}{2}+T\int\limits_0^{\infty}dt\cdot\exp\{-WF_c(t,\ K)\}\,\mathrm{cosech}\,(\pi tT)\sin[\mu t+WF_s(t,\ K)]. \qquad (13)$$

Эта система трансцендентных уравнений для μ и r_0 как функций K и T решалась численно для $K=0{,}1\div0{,}9$ (с шагом 0,1) и для $T=5\div40$ (с шагом 5 K); именно на этом этапе процедуры решающее значение имело то, что для функции $f(t)$ мы получили явное и достаточно компактное представление. Для найденных самосогласованных значений μ и r_0 рассчитывалось и распределение $\mathcal{P}(E)$. При этом оказалось удобным взять в конечных ответах в качестве масштабов длины и энергии величины $l=N^{-1/3}$ и $E_l=e^2/\varepsilon l$ соответственно, что позволяет трансформировать результаты на случай произвольных — конечно, в рамках применимости расчета — концентраций.

Опишем физические особенности результатов.

1. Радиус экранирования r_0 оказывается в несколько ($2\div6$) раз меньше величины, вычисленной без учета случайного поля, т. е. экранирование более эффективно, чем в отсутствие разброса уровней.

2. Зависимость радиуса экранирования r_0 от температуры оказывается более слабой, чем $\sim T^{1/2}$ — предписываемая стандартной теорией зависимость в случае невырожденной статистики.

3. Зависимость радиуса экранирования от степени компенсации становится также более слабой, чем зависимость $[K(1-K)]^{-1/2}$ в отсутствие эффектов случайного поля.

4. Полуширина пика распределения плотности состояний в примесной полосе составляет $(1+K)^{1/2}$ ($4{,}3\div6{,}5$ мэВ), в несколько раз превосходя величину kT.

Заметим, что в рассматриваемых условиях уширение примесной полосы еще не настолько велико, чтобы надо было учитывать перекрывание ее с соседними. Наряду с этим, хотя радиус экранирования оказывается меньшим, чем без случайного поля, важное условие о существенном перекрытии полей многих центров, т. е. условие $W\gg1$ (а тем более фактически использованное при расчете условие $\tilde{W}\gg1$), все же хорошо выполняется для всех рассмотренных комбинаций K и T.

Таким образом, можно сделать вывод, что даже в случае умерен-

ного легирования эффекты случайного поля весьма существенны и их необходимо учитывать при корректном определении положения уровня Ферми и радиуса экранирования в компенсированных полупроводниках в условиях примесного экранирования.

Автор благодарен И. П. Звягину и А. В. Дмитриеву за плодотворные дискуссии. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и гранта фонда Сороса, предоставленного Американским физическим обществом.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Морозова В. А., Желудева С. И., Курова И. А.//ФТП. 1976. **10.** С. 1702. [2] Chandrasekhar S.//Rev. Mod. Phys. 1943. **15.** P. 1. [3] Morgan T. N.//Phys. Rev. 1965. **A139.** P. 343. [4] Kane F. O.//Phys. Rev. 1963. **131.** P. 79. [5] Бонч-Бруевич В. Л.//ФТТ. 1962. **4.** С. 2660. [6] Бонч-Бруевич В. Л., Звягин И. П., Кайпер Р. и др. Электронная теория неупорядоченных полупроводников. М., 1981. [7] Scribner D. A., Leopold Lutz.//J. Appl. Phys. 1985. **57.** P. 1147.

Поступила в редакцию
06.09.93

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1994. Т. 35, № 2

АСТРОНОМИЯ

УДК 521.14/17.528.21/22

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СПУТНИКОВЫХ МОДЕЛЕЙ ПОТЕНЦИАЛА НА ФИЗИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЯХ ПЛАНЕТ

Н. А. Чуйкова
(ГАИШ)

Даны практические рекомендации для использования разработанной ранее автором теории, позволяющей от спутниковой модели потенциала притяжения планеты перейти к модели, оптимальной для заданного региона физической поверхности планеты. Представлена методика практической проверки теории для спутниковых моделей гравитационного поля Земли.

Использование моделей потенциала, определенных из наблюдений спутниковых орбит, в виде ряда Лапласа для нахождения характеристик гравитационного поля на физических поверхностях планет [1, 2] может встретить много затруднений в силу следующих причин.

1) Для обеспечения сходимости ряда Лапласа поверхность планеты и ее внутреннее строение должны подчиняться вполне определенным условиям [3—5].

2) Полученное решение, в сущности, является решением задачи Коши—Ковалевской и в силу этого некорректно [6]. Поэтому малые ошибки определения коэффициентов разложения потенциала (стоксовых постоянных) в спутниковой зоне могут вызвать значительные ошибки при аналитическом продолжении полученной модели на поверхность тела.

3) Данное решение (ряд Лапласа) не оптимально (в смысле быстроты сходимости) как для всей поверхности несферической планеты (в силу неортогональности системы шаровых функций на несферической поверхности), так и для отдельной части любой поверхности (в силу того, что равномерная сходимость ряда Лапласа гарантирует да-