

дования кинетических характеристик таких систем, так и при разработке новых систем с заранее прогнозируемыми свойствами.

Библиографический список

1. **Петросян С.Г., Шик А.Я.** Фотопроводимость неоднородных полупроводниковых твердых растворов. — Письма в ЖЭТФ, 1982. — Т. 35. — №9. — С. 357–359.
2. **Артеменко С.Н., Шульман А.Я.** Влияние плавных флуктуаций состава полупроводникового твердого раствора на форму края собственного поглощения. — Письма в ЖЭТФ, 1974. — Т. 19. — вып. 3. — С. 145–149.
3. **Шлимак Н.С., Эфрос А.Л., Янгев Н.Я.** Исследования роли флуктуаций состава в твердых растворах $Ge:Si$, ФТП, 1977. — Т. 11. — Вып. 2. — С. 257–261.
4. **Фистуль В.Н.** Распад пересыщенных полупроводниковых твердых растворов. — М.: Металлургия, 1977. — 240 с.
5. **Пфани В.Г.** Зонная плавка. — М.: Металлургия, 1970. — 336 с.
6. **Захаров А.Ю., Иванченко Ю.М.** Теория электропроводности неупорядоченных сплавов. — ФНТ. — Т. 4. — Вып. 1. — С. 41–53.
7. **Лифшиц Н.М.** О структуре энергетического спектра и квантовых состояниях неупорядоченных конденсированных систем. — УФН, 1964. — Т. 83. — Вып. 4. — С. 617–663.
8. **Твердые растворы в полупроводниковых системах.** (Справочник). — М.: Наука, 1978. — 198 с.
9. **Абдуллаев А.А., Алексеева В.Е., Заец Н.Ф. и др.** Оптические свойства сплавов висмут-сурьма. — Письма в ЖЭТФ, 1973. — Т. 17. — Вып. 6. — С. 292–293.
10. **Зембатов Х.Б., Кравченко А.Ф., Машуков Ю.П.** Край поглощения варизонных эпитаксиальных пленок $Al_xGa_{1-x}As$. ФТП, 1975. — Т. 9. — № 7. — С. 1314–1318.

© Щербак Я.Я., 2005

УДК 539.2

Канд. физ.-мат. наук. ЩЕРБАК Я.Я. (ДонНТУ)

СТРУКТУРА КРАЯ ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЫ В ИЗОВАЛЕНТНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ

В технике для изменения электрофизических свойств материалов в нужную сторону широко применяют легирование их различными примесями. Примеси оказывают влияние на закон дисперсии электронов — происходит как изменение границ и структуры спектра исходного материала, так и возникновение дополнительных уровней и зон в его запрещенной зоне.

В последнее время возрос интерес к легированию полупроводников изоэлектронными примесями, в особенности таких как Si , Ge , полупроводниковых соединений A^3B^5 , A^2B^6 и др. Такое легирование позволяет плавно изменять их свойства (например, ширину запрещенной зоны), что очень важно для промышленного применения таких материалов.

В работе [1] показано, что в некоторых случаях (8 из рассмотренных 47) примеси изовалентного замещения могут привести к появлению в запрещенной зоне исходного соединения локальных уровней, из которых при повышении концентрации примеси формируется примесная зона. Даже если таковых и не возникает, то вблизи краев зон могут возникать, так называемые, флуктуационные уровни, приводящие к появлению «хвостов» зон.

Наряду с образованием примесной зоны и «хвостов» зон, примеси могут привести к существенной перестройке зон исходного (беспримесного) кристалла.

Из анализа существующих по этому вопросу работ [2] можно сделать вывод, что изменение структуры зон обусловленное примесными центрами, оказывает существенное влияние на свойства полупроводников и недостаточно изучено.

Хорошо известно [3], что строгое описание энергетического спектра носителей тока в твердых растворах (как и в любых неупорядоченных системах) возможно лишь в терминах плотности состояний квазичастиц.

Плотность состояний носителей $\rho(\omega)$ (ω — энергетический параметр) в твердых растворах может быть найдена с помощью усредненной по распределению примеси одночастичной гриновской функции $G(x, \vec{k}, \omega)$:

$$\rho(x, \omega) = \frac{1}{\pi} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} Sp \{ Im G(x, \vec{k}, \omega) \}, \quad (1)$$

имеют вид $G_{mn}^{-1} = \delta_{mn} (\omega - \varepsilon_n(x, \vec{k})) - \sum_{mn'}(x, k, \omega)$.

Здесь $\varepsilon_n(x, \vec{k})$ — закон дисперсии носителей в n -й зоне исходного кристалла, приведенного к объему образца с примесью; $\sum_{mn'}(x, \vec{k}, \omega)$ — матричные элементы массового оператора, являющегося функционалом примесного потенциала и функции Грина; x — концентрация примеси, \vec{k} — волновой вектор. Интегрирование проводится по зоне Бриллюэна.

Следует отметить, что спектр элементарных возбуждений определяется плюсами точной (a не усредненной) гриновской функции. В связи с этим информация, содержащаяся в усредненной по распределению примесных центров одночастичной функции Грана, будет зависеть от способа усреднения.

В случае твердых растворов изовалентного замещения с короткодействующим примесным потенциалом при усреднении целесообразно производить суммирование по всем возможным положениям примесных центров в узлах решетки с учетом веса этих состояний. При таком подходе естественным образом разрешается и проблема критерия локализации. Вся информация о спектре содержится в массовом операторе \sum , особенности которого соответствует дискретной части спектра.

Для количественного расчета спектра требуется знание массового оператора, вычисление которого представляет достаточно трудную задачу. Однако некоторые общие качественные выводы о структуре валентной зоны можно сделать и без явного вычисления массового оператора. Ограничимся при этом учетом двух зон — зон легких и тяжелых дырок ($n=2$ и 1 соответственно).

Зонные структуры компонентов (т.е. при $x=0$ и $x=1$) будет считать известными, функция $\varepsilon_n(1, \vec{k})$ представляет собой закон дисперсии в n -й зоне первого компонента, приведенного к объему второго компонента [4].

При $x=1$ матричные элементы массового оператора совпадают с матричными элементами примесного потенциала:

$$\sum_{mn'}(1, \vec{k}, \omega) = U_{mn'}(k).$$

Найдем закон дисперсии при $x=1$:

$$\omega_{1,2} = \frac{\varepsilon_1(1, \vec{k}) + \varepsilon_2(1, \vec{k}) + (U_{11}(\vec{k}) - U_{22}(\vec{k}))}{2} \pm \left[\left(\frac{\varepsilon_1(1, \vec{k}) + \varepsilon_2(1, \vec{k}) + (U_{11}(\vec{k}) - U_{22}(\vec{k}))}{2} \right)^2 + |U_{12}|^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

Поскольку валентные зоны обоих компонентов при $\vec{k} = 0$ вырождены, т.е.

$$\varepsilon_1(1, \vec{k}) /_{\vec{k}=0} = \varepsilon_2(1, \vec{k}) /_{\vec{k}=0};$$

$$\omega_1(\vec{k}) /_{\vec{k}=0} = \omega_2(\vec{k}) /_{\vec{k}=0};$$

$$\text{то } U_{11}(0) = U_{22}(0); U_{12} = 0.$$

Так как примесный потенциал в изовалентных растворах является короткодействующим, то $U_{mn'}(\vec{k})$ практически не зависит от \vec{k} [4] и матрица $U_{mn'}$ диагональна. Поэтому в двухзонном приближении

$$U = U_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Таким образом, примесный потенциал для дырок в изовалентном растворе в двухзонном приближении характеризуется единственным параметром U_0 (зависящим, строго говоря, от концентрации примеси, поскольку матричные элементы потенциала вычисляются на блоховских функциях исходного кристалла, приведенного к объему кристалла с примесями).

Примесный потенциал не является единственной причиной перенормировки спектра носителей. Помимо уже учтенной поправки, связанной с изменением объема кристалла вследствие введения примеси, имеются еще и вклады, обусловленные фононами и статическими искажениями решетки. Последние наиболее существенны в тех случаях, когда размеры замещающего и замещаемого атомов заметно различаются. В первом порядке по смещениям атомов массовый оператор возмущения, связанного с искажением решетки, пропорционален среднеквадратичному отклонению атомов от узлов, $\langle \delta R^2 \rangle$, которое согласно [5]:

$$\langle \delta R^2 \rangle \leq 10^{-3} x(1-x)a^2,$$

где a — постоянная решетки.

В связи с этим недиагональные по зонным индексам элементы массового оператора относительно невелики — их вкладом в зонную структуру можно пренебречь.

Тогда выражение (1) приводится к виду:

$$\rho(x, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \sum_{n=1}^2 \frac{\Gamma_n(x, \omega)}{[\omega - \varepsilon_n(x, \vec{k}) - \text{Re} \sum_n(\omega, x)]^2 + \frac{\Gamma_n^2(x, \omega)}{4}}, \quad (3)$$

где $\Gamma_n(x, \omega)$ — скачок массового оператора $\sum_n(x, \omega)$ на вещественной оси; зависимостью $\sum_n(x, \omega)$ от \vec{k} пренебрежено вследствие сильной локализации примесного потенциала.

Вычислим интегралы по k в (3) для параболического «затравочного» закона дисперсии $\varepsilon_n(x, \vec{k})$:

$$\rho(x, \omega) = \sum_{n=1}^2 \rho_n(x, \omega),$$

где

$$\rho_n(x, \omega) = \frac{(m_n(x))^{3/2}}{2\pi^2} \left[\left((\omega - \text{Re} \sum_n(x, \omega))^2 + \frac{\Gamma_n^2(x, \omega)}{4} \right)^{1/2} + (\omega - \text{Re} \sum_n(x, \omega)) \right]^{1/2}. \quad (4)$$

Если пренебречь величиной $\Gamma_n(x, \omega)$, т.е. затуханием, то из полученного выражения следует обычный результат $\rho(\omega) \approx \omega^{1/2}$.

Для рассматриваемых растворов массовый оператор можно записать в виде:

$$\sum(x, \omega) = UF_1(x, GU).$$

В модели (2) U и F диагональные, поэтому

$$\sum(x, \omega) = U_0 F(x, G_n(x, \omega) U_0), \quad (5)$$

где $G_n(x, \omega) = \int_V \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\omega - \varepsilon_n(x, \vec{k}) - \sum_n(x, \omega)}$

Учитывая, что $\rho_n(x, \omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} G_n(x, \omega)$ и полагая, что в окрестности края зоны $\rho_n(x, \omega)$ мала, из (5) получим:

$$\text{Re} \sum_n(x, \omega) + i\Gamma_n(x, \omega) = U_0 F(x, \text{Re} G_n(x, \omega) U_0) + iU_0^2 F'_y(x, G_n(x, \omega) U_0) / \text{Im}_{y=0} \cdot \rho_n(x, \omega),$$

где $y = G_n U_0$, откуда:

$$\Gamma_n(x, y) = U_0^2 F'_y / \text{Im}_{y=0} \cdot \rho_n(x, \omega). \quad (6)$$

Здесь существенно используется условие дифференцируемости функции $F(x, y)$ по y . Функция $F(x, y)$ не дифференцируема при значениях y , соответствующих локализованным (связанным) состояниям носителей.

Поэтому выражение (6) применено лишь для токовых состояний носителей, причем $\rho_n(x, \omega)$ представляет плотность токовых состояний.

Подставим (6) в (4) и решим полученное уравнение относительно $\rho_n(x, \omega)$:

$$\rho_n(x, \omega) = \frac{(2m_n(x))^{3/2}}{4\pi^2} \left[(\omega - \text{Re} \sum_n(x, \omega)) + \frac{m_n^3(x) U_0^4 (F'_y(n, x, \text{Re} y))^2}{32\pi^4} \right]^{1/2}.$$

Отсюда следует, что плотность токовых состояний в твердом растворе с короткодействующим примесным потенциалом аналогична плотности электронных состояний в идеальном кристалле — этим объясняется тот, известный из опыта, факт, что многие кинетические свойства растворов подобны свойствам соответствующих идеальных кристаллов.

Решение уравнения $\rho_n(x, \omega) = 0$ относительно ω дает критическое значение энергии E_c^n , начиная с которого появляются токовые электронные состояния.

Критические энергии для разных подзон валентной зоны различны, поскольку при x отличном от нуля и единицы массовые операторы легких и тяжелых дырок существенно отличаются — происходит «расщепление» токовых состояний валентной зоны.

Полученный результат может быть использован при изучении кинетических характеристик новых полупроводниковых материалов на основе изовалентных твердых растворов.

Библиографический список

1. Захаров А.Ю., Щербак Я.Я. Локальные уровни в твердых растворах. — ФТП, 1979. — Т. 13. — Вып. 10. — С. 1906–1911.
2. Бродин М.С., Витроховский Н.И. Спектральные исследования энергетической структуры смешанных монокристаллов. ФТП, 1972. — Т. 6. — №4. — С. 698–702.
3. Бонч-Бруевич В.Л. О некоторых точных теоремах теории многих тел. — В кн.: Проблема многих тел и физика плазмы. — М.: Наука, 1967. — С. 32–41.
4. Захаров А.Ю. Об энергетическом спектре твердых растворов. — ФТТ, 1975. — Т. 17. Вып. 5. — С. 1274–1279.
5. Кривоглаз М.А. Статические искажения в твердых растворах с гранецентрированной кубической решеткой. — ФММ, 1960. — Т. 10. — №4. — С. 169–174.

© Щербак Я.Я., 2005

УДК 622.258

Докт.техн.наук ПОЛОЗОВ Ю.А., инж. ЛАЗЕБНИК А.Ю. («Спецтампонажгеопроект»)

ЛИКВИДАЦИЯ ПРИТОКОВ ВОДЫ ПРИ ПРОХОДКЕ НАКЛОННОГО ФЛАНГОВОГО СТВОЛА ШАХТЫ «ИЛОВАЙСКАЯ» ГП «ОКТЯБРЬУГОЛЬ»

При подготовке и вскрытии резервных блоков полей действующих угольных шахт приходится пересекать участки трещиноватых и обводненных горных пород подготовительными и капитальными выработками. Проведение протяженных выработок через такие обводненные зоны без применения специальных способов сопровождается внезапными прорывами напорных подземных вод, что приводит к резкому падению темпов проходки и технико-экономических показателей.

Согласно проекта «Вскрытие и подготовка 1-го горизонта уклонного поля шахты «Иловайская» ГП «Октябрьуголь» протяженность наклонного ствола составила 823 м при сечении в проходке 17,7 м². Наклонный ствол запроектирован по вмещающим породам под углом 13° к горизонту.

Пересекаемые стволом водоносные горизонты приурочены, в основном, к песчаникам карбона, которые широко распространены в данном районе. Водоносность пород каменноугольного возраста обусловлена их коллекторскими свойствами: открытой трещиноватостью и пористостью. Коэффициент фильтрации песчани-