

МЕЖУЗЕЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ ПРИМЕСЕЙ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В КРЕМНИИ

И. ТЕОРИЯ МИГРАЦИИ

Фистуль В. И., Шмугуров В. А.

Рассмотрена модель, позволяющая определить величину энергетического барьера миграции примесей переходных металлов в кремнии. В основе модели лежат понятия о потенциалах взаимодействия примесного атома с атомами окружения с учетом локальных искажений кристаллической решетки, различий в действии кристаллического поля на d -орбитали примесного атома при его нахождении в равновесном положении и в седловой точке. Показано влияние взаимодействия валентных электронов атомов кремния с d -электронами примесного атома на величину энергетического барьера миграции.

Введение. Несмотря на то что накоплен большой экспериментальный материал по исследованию поведения примесей переходных металлов в полупроводниках, в настоящее время отсутствует полная и строгая теория, позволяющая надежно определять кристаллохимическую позицию наиболее вероятного размещения примесных атомов в решетке, их зарядовое состояние, электронные конфигурации и энергетические характеристики миграции и растворимости.

В настоящей работе будет рассмотрена миграция примесей переходных металлов в различных зарядовых состояниях в кремнии. Как известно [1], существуют две категории теоретических расчетов энергии миграции примесей в полупроводниках — квантово-механические расчеты, исходящие из первых принципов, и полуэмпирические методы, основанные на потенциалах взаимодействия примесного атома с атомами окружения. В обоих случаях процесс межузельной миграции примесей в кристалле можно представить как переход примесного атома из равновесного положения через седловую точку в новое равновесное положение. Поскольку в решетке кремния имеются два вида междоузлий — тетраэдрический (T) и гексагональный (H), в зависимости от того, какое междоузлие является равновесным, а какое седловой точкой, элементарный акт миграции можно представить схемой $T^*—H—T^*$. . . либо $H^*—T—H^*$. . .¹ Энергетический барьер миграции является разностью энергий взаимодействия примесного атома с атомами кристалла в седловой точке и равновесном положении.

Однако современное состояние теории не позволяет достаточно корректно вычислять энергии миграции d -примесей в полупроводниках квантово-механическими методами. Поэтому на данном этапе развития теории предпочтительными оказываются полуэмпирические подходы.

Ранние попытки [2-5] теоретического расчета энергетических барьеров миграции полуэмпирическими методами применимы лишь к некоторым примесям (литию, меди, серебру, золоту) в кремнии и не пригодны для примесей переходных металлов с незавершенной d -оболочкой. Это связано с тем, что в подходах [2-4] не учитываются электронное строение примесных атомов и атомов решетки, взаимодействия электронов атомов примеси и матрицы, влия-

¹ Звездочками отмечены равновесные положения.

ния кристаллического поля и различия в действии кристаллического поля в T - и H -междоузлиях. Например, в [2] Свелин исходил из чисто кулоновского взаимодействия между атомами примеси и решетки, рассматривая их в виде точечных зарядов, возникающих за счет неполного экранирования ядер атомов внешними электронами. Более детально теоретические расчеты энергии миграции применительно к ионизованным межузельным примесям в кремнии и германии развиты Вайзером [3] и Миллеа [4].

Энергия взаимодействия иона примеси с атомами ближайших окружений в T - и H -междоузлиях определялась алгебраической суммой энергии притяжения, обусловленной поляризацией решетки межузельным ионом, и энергии отталкивания за счет перекрывания электронных оболочек атомов кристалла и примеси. Энергия миграции в [3] выражалась как

$$\Delta E_m = \Delta U_{от} - \Delta U_n, \quad (1)$$

где $\Delta U_{от} = U_{от}^H - U_{от}^T$ — разность энергий отталкивания, $\Delta U_n = U_n^H - U_n^T$ — разность энергий поляризации между H - и T -межузельными положениями примесного атома.

Существенным недостатком данного подхода является использование в качестве описания энергии отталкивания двухпараметрического потенциала Борна—Майера $U_{от} = A \exp [(r_s + r_i - r)/\rho]$, где r — расстояние между примесным ионом и атомами решетки. Энергетический параметр A и мера спада отталкивания с расстоянием ρ определялись из данных по сжимаемости решеток щелочногалогенидных кристаллов с использованием константы Маделунга для решеток типа NaCl. Вообще говоря, потенциал Борна—Майера применим для кристаллов с чисто ионным характером химической связи и не пригоден для кристаллов кремния, в которых связь между атомами носит ковалентный характер. Еще один недостаток заключается в невозможности корректного выбора радиусов атомов или ионов примеси r_i и атомов решетки r_s . Поскольку размеры атомов и ионов — величины переменные, изменяющиеся от одной неэквивалентной связи к другой в зависимости от геометрии структуры, не ясен выбор величины радиуса примесного атома в T - и H -междоузлиях. Особенно сильно это должно проявляться при рассмотрении межузельной миграции примесей переходных металлов с незавершенной d -оболочкой, у которых под действием кристаллического поля внешние электронные оболочки претерпевают значительные изменения [1].

Шагом вперед явилась работа Оксенгендлера с сотр. [5], в которой при определении энергетических барьеров миграции нейтральных примесей лития, меди, серебра, золота и цинка учитывалось взаимодействие внешних s -электронов примесного атома с электронами химической связи кремния. Однако и в [5] для замкнутых электронных оболочек примесного атома применялся двухпараметрический потенциал Борна—Майера при нахождении отталкивающей части барьера миграции.

В нашей работе [1] были проведены расчеты энергии миграции межузельных $3d$ -примесей в нейтральном состоянии в кремнии. Но как в [2-5], так и в [1] не учитывались локальные искажения кристаллической решетки вокруг примесного атома, вносящие определенный вклад в величину энергии миграции. Как показано в работе [6], наиболее сильному смещению подвергаются атомы первых двух ближайших окружений вокруг межузельного d -атома, причем атомы решетки, образующие первую сферу, смещаются в направлении от примесного атома, а вторые ближайшие соседи — в направлении к атому примеси. При этом энергия, идущая на искажения решетки, составляет 0.4 эВ в случае $3d$ -примеси в T -междоузлии [6].

В работе [1] также не рассмотрена миграция $3d$ -примесей в ионизованном состоянии и примесей переходных металлов второго и третьего переходных периодов. Эти вопросы будут решены в настоящей работе.

М о д е л ь м и г р а ц и и

В основу модели миграции положена схема Вайзера [3]: переход примесного атома из равновесного положения через седловую точку в новое равновесное положение. С учетом энергии отталкивания ($U_{от}$) за счет перекрывания элек-

тронных оболочек примесных атомов кремния, энергии поляризации (U_n) решетки в случае ионизованного состояния примеси, вклада внутреннего кристаллического потенциала ($U_{кр}$), а также энергии экстрастабилизации кристаллическим полем (δ_a) энергию миграции примесей переходных металлов можно представить в виде

$$\Delta E_m = \Delta U_{от} - \Delta U_{кр} - \Delta U_n - \Delta \delta_a, \quad (2)$$

где $\Delta U_{от} = U_{от}^H - U_{от}^T$, $\Delta U_n = U_n^H - U_n^T$, $\Delta U_{кр} = U_{кр}^H - U_{кр}^T$, $\Delta \delta_a = \delta_a^H - \delta_a^T$. Индексы H и T относятся соответственно к гексагональному и тетраэдрическому междуузлиям.

Для нахождения энергии поляризации мы воспользовались методом Мотта—Литтлетона—Вайзера [8], согласно которому энергия поляризации определяется дипольными моментами μ_i , наводимыми на атомы решетки междуузельным ионом примеси:

$$U_n = -\frac{1}{2} q \sum_i^n \sum_{G_i} \frac{\mu_i}{R_i^2} - \frac{q^2}{2R_{n+1}} \left(1 - \frac{1}{\epsilon}\right), \quad (3)$$

где q — заряд иона примеси, ϵ — диэлектрическая проницаемость кремния, R_i — расстояние от иона примеси до атомов кремния, расположенных в i -сфере, n — количество рассматриваемых сфер. Суммирование проводится по всем G_i -атомам решетки, расположенным в i -сфере, в пределах n -сфер вокруг примесного атома.

Во втором слагаемом в выражении (3) учитывается вклад в энергию поляризации от атомов кремния, расположенных за n -сферой. В общем виде для n -сферного приближения система уравнений для дипольных моментов представлялась как

$$\sum_{i=1}^n \mu_i \left(E_{ij} - \delta_{ij} \frac{1}{\alpha_h} \right) = -\frac{q}{R_i^2}, \quad (4)$$

где E_{ij} — элемент матрицы, зависящий от геометрии структуры, δ_{ij} — символ Кронекера, α_h — поляризуемость атомов решетки кремния. При нахождении U_n мы использовали трехсферное приближение, поскольку сходимость значений U_n^H наблюдалась начиная с приближения третьего порядка. Вычисленные значения $U_n^H = 4.54$, $U_n^T = 5.32$, $\Delta U_n = 0.78$ эВ для однократно ионизованных междуузельных примесей в кремнии хорошо согласуются с расчетами Вайзера [8] и Пеннетты [7]. Для примесей, мигрирующих в нейтральном состоянии в кремнии, энергия поляризации равна нулю.

Внутренний кристаллический потенциал по своей природе является дальнедействующим, зависящим от периодической функции координат атомов, и определяется пространственным распределением электронов в кристалле. Однако точное значение электронной плотности в H - и T -междуузлиях неизвестно. Неизвестно также, каким образом она будет изменяться при внедрении различных d -атомов в междуузлия кристаллической решетки. Поэтому в первом приближении мы выбрали значения $U_{кр}^H$ и $U_{кр}^T$ постоянными, воспользовавшись результатами работы [8], где $U_{кр}^H = 5.67$, $U_{кр}^T = 5.97$ и $\Delta U_{кр} = -0.30$ эВ.

Для нахождения энергии отталкивания мы воспользовались квантово-химическим методом Малликена [9], что позволило избежать недостатков, присущих двухпараметрическому потенциалу Борна—Майера.

Энергия электрон-электронного отталкивания описывалась выражением

$$U_{от} = \beta v \sum_{kl} I_{kl} S_{kl}^2, \quad (5)$$

где S_{kl} — интеграл перекрытия k -электрона химической связи атомов кремния и l -электрона примесного атома, I_{kl} — средний потенциал ионизации атомов кремния и примеси, определяемый с помощью орбитальных потенциалов ионизации валентных состояний d -атомов и атомов кремния, значения которых

табулированы в работе [10]. Коэффициент β представляет собой калибровочный параметр, подбираемый по лучшему соответствию теоретического и экспериментального барьеров миграции хорошо изученной (модельной) примеси. Коэффициент ν учитывает искажения кристаллической решетки. Выбор параметров β и ν будет подробно рассмотрен далее.

Для определения величин S_{kl} и I_{kl} , входящих в (5), необходимо знание электронного состояния d -примесей в T - и H -междоузлиях кремния. Ввиду того что точечная группа симметрии тетраэдрического междоузлия — T_2 , а гексагонального — D_{3d} , действие кристаллического поля на d -орбитали примесного атома в обоих междоузлиях различно. За основу состояний d -примесей в тетраэдрическом междоузлии нами принята модель, предложенная Людвигом и Вудбери [11], обоснованная в рамках теории кристаллического поля Ройциным и Фирштейном [12] и неоднократно проверенная на опыте [13].

	Sc ⁺	Ti ⁺	V ⁺	Cr ⁺	Mn ⁺	Fe ⁺	Co ⁺	Ni ⁺	Cu ⁺	
	Sc ⁰	Ti ⁰	V ⁰	Cr ⁰	Mn ⁰	Fe ⁰	Co ⁰	Ni ⁰		
a	e	e	e	e	e	e	e	e	e	$d_{z^2}, d_{x^2-y^2}$
	t_2	t_2	t_2	t_2	t_2	t_2	t_2	t_2	t_2	d_{xy}, d_{yz}, d_{xz}
	e''_g	e''_g	e''_g	e''_g	e''_g	e''_g	e''_g	e''_g	e''_g	d_{xz}, d_{yz}
b	e'_g	e'_g	e'_g	e'_g	e'_g	e'_g	e'_g	e'_g	e'_g	$d_{x^2-y^2}, d_{xy}$
	a_{1g}	a_{1g}	a_{1g}	a_{1g}	a_{1g}	a_{1g}	a_{1g}	a_{1g}	a_{1g}	d_{z^2}
	d^2	d^3	d^4	d^5	d^6	d^7	d^8	d^9	d^{10}	

Рис. 1. Состояния $3d$ -примесей в междоузлиях решетки кремния.

a — T -междоузлие, b — H -междоузлие.

Согласно данной модели, внутрискристаллическое поле тетраэдрической симметрии частично снимает пятикратное орбитальное вырождение d -оболочки. При этом в T -междоузлии двукратно вырожденные t_2 -состояния оказываются по энергии выше трижды вырожденных e -состояний (рис. 1, a).

Под действием кристаллического поля электроны с внешней s -оболочки переходят на d -оболочку: примесные атомы с электронной конфигурацией d^s приобретают конфигурацию d^{s+m} . Октаэдрический характер расщепления d -уровней в случае T -междоузлия объясняется наиболее сильным влиянием второго по близости окружения, являющегося октаэдром, по сравнению с влиянием первого ближайшего окружения [12].

Электронное состояние d -примесей в гексагональном междоузлии нами подробно рассмотрено в работе [1]. Характер расщепления d -уровней в H -междоузлии показан на рис. 1, b , 2, b . Заполнение t_2 -, e -состояний (T -междоузлие) и a_{1g} -, e'_g -, e''_g -состояний (H -междоузлие) электронами, как обычно, осуществляется исходя из принципа Паули и правила Гунда. При этом, согласно теории кристаллического поля [14], в случае электронных конфигураций $d^4 \div d^7$ (T -междоузлие) и $d^2 \div d^7$ (H -междоузлие) для примесей $3d$ -элементов будут реализованы высокоспиновые состояния (рис. 1, a , b), а для примесей $4d$ - и $5d$ -элементов — низкоспиновые (рис. 2, a , b).

При вычислении интегралов перекрытия S_{kl} волновые функции электронов химической связи кремния выбирались в виде ЛКАО, каждая из которых является sp^3 -гибридом, построенным на слэтеровских волновых функциях, а волновые функции внешних электронов примесного атома выбирались, согласно состояниям d -атомов в междоузлиях кремния, в виде слэтеровских d -функций. Интегралы перекрытия d -орбиталей междуатомного атома с sp^3 -гибридными АО кремния сведены к двухатомным [15] с соответствующими коэффициентами, полученными с помощью матриц преобразования d -функций примесного атома, s - и p -функций атомов кремния. Суммирование в выражении

(5) проводилось по всем внешним электронам примесного атома и электронам химической связи атомов кремния в пределах двух координационных сфер. Использование приближения при вычислении энергии отталкивания связано с тем, что d -электроны примесного атома локализованы в основном в двух сферах [12]. Вклад третьей сферы в величину $U_{от}$, по нашим оценкам, составляет менее 1% и в дальнейших расчетах не учитывается. Аналитический вид интегралов перекрытия d -орбиталей примесного атома с sp^3 -гибридными АО кремния для первых двух ближайших окружений для T - и H -междоузлий приведен в нашей работе [16].

Энергия экстростабилизации, как и энергия отталкивания, зависит от электронной конфигурации d -примеси в H - и T -междоузлиях и определяется величиной расщепления d -уровней кристаллическим полем. Поскольку сами

	La ⁺	Hf ⁺	Ta ⁺	W ⁺	Re ⁺	Os ⁺	Ir ⁺	Pt ⁺	Au ⁺	
	La ⁰	Hf ⁰	Ta ⁰	W ⁰	Re ⁰	Os ⁰	Ir ⁰	Pt ⁰		
	Y ⁺	Zr ⁺	Nb ⁺	Mo ⁺	Tc ⁺	Ru ⁺	Rh ⁺	Pd ⁺	Ag ⁺	
	Y ⁰	Zr ⁰	Nb ⁰	Mo ⁰	Tc ⁰	Ru ⁰	Rh ⁰	Pd ⁰		
ϵ	==	==	==	==	==	==	==	==	==	$d_{z^2}, d_{x^2-y^2}$
a	t_{2g}	t_{2g}	t_{2g}	t_{2g}	t_{2g}	t_{2g}	t_{2g}	t_{2g}	t_{2g}	d_{xy}, d_{yz}, d_{zx}
b	e_g''	e_g''	e_g''	e_g''	e_g''	e_g''	e_g''	e_g''	e_g''	d_{xz}, d_{yz}
	e_g'	e_g'	e_g'	e_g'	e_g'	e_g'	e_g'	e_g'	e_g'	$d_{x^2-y^2}, d_{xy}$
	a_{1g}	a_{1g}	a_{1g}	a_{1g}	a_{1g}	a_{1g}	a_{1g}	a_{1g}	a_{1g}	d_{z^2}
	d^2	d^3	d^4	d^5	d^6	d^7	d^8	d^9	d^{10}	

Рис. 2. Состояния $4d$ - и $5d$ -примесей в междоузлиях решетки кремния.

a — T -междоузлие, b — H -междоузлие.

величины $\delta_s^T(H)$ составляют доли величин расщепления (D_q) [17], а при этом D_q для различных d -примесей в междоузлиях кремния составляют 0.1—0.3 эВ, разность ($\Delta\delta_s$) таких малых величин будет лежать в пределах ошибки расчетов. Поэтому в первом приближении разностью энергий экстростабилизации мы пренебрегаем.

Учет искажений кристаллической решетки

Примесной атом при своем движении из одного междоузлия в другое вызывает смещение атомов окружения. Как показывает анализ, наиболее сильно искажения кристаллической решетки должны влиять на величину энергии отталкивания, поскольку ее расчет проводится для двух сфер вокруг примесного атома, которые наиболее сильно подвержены искажениям [6]. Локальные искажения решетки могут быть симметричными и несимметричными [18]. Нами рассмотрены только симметричные искажения, обусловленные электрон-фононным взаимодействием.

Абсолютные смещения θ описываются выражением [18]

$$\theta = \frac{1}{\Omega} \sqrt{\frac{2\Delta E}{M}}, \quad (6)$$

однако определить их невозможно из-за отсутствия знаний частот колебаний атомов рассматриваемого кластера (Ω). Но (6) позволяет определить изменение величины θ_x для рассматриваемой примеси относительно θ_m для примеси, выбранной в качестве модельной (при условии $\Omega \approx \text{const}$):

$$\chi = \theta_x / \theta_m = \sqrt{\Delta E_x M_m / \Delta E_m M_x}, \quad (7)$$

где M_m и M_x — атомные массы модельной и рассматриваемой примесей, ΔE_m^* , ΔE_x — соответственно разности энергий образования занятого примесным атомом и пустого междоузлия для модельной и рассчитываемой примесей, оцененные термодинамически.

Важным вопросом является выбор модельной примеси. В качестве модельной примеси, мигрирующей в нейтральном состоянии, выбрана примесь никеля, а в ионизованном — меди. Это связано с тем, что их поведение в кремнии достаточно хорошо изучено, и анализ экспериментальных работ позволяет сделать вывод, что примесь никеля мигрирует по междоузлиям преимущественно в нейтральном состоянии Ni^0 [$3d^{10}$], а меди — в ионизованном Cu^+ [$3d^{10}$]. Их экспериментальные значения энергии миграции равны соответственно 0.47 и 0.43 эВ.

Используя эти значения, мы подобрали калибровочный коэффициент β , входящий в (5), который оказался равным 0.500 для Ni^0 и 0.154 для Cu^+ . При этом для модельной примеси уже изначально учитываются искажения кристаллической решетки. Для остальных примесей (при $\beta=0.500$ для нейтральных и 0.154 для ионизованных примесей) введением коэффициента ν в (5) учитывались искажения решетки, но уже относительно искажений, вызываемых модельной примесью.

Энергия отталкивания для примесей переходных металлов в междоузлиях кремния

Примесь	Нейтральное состояние			Ионизованное состояние		
	электронная конфигурация	$U_{от}^H$, эВ	$U_{от}^T$, эВ	электронная конфигурация	$U_{от}^H$, эВ	$U_{от}^T$, эВ
Sc	$3d^3$	4.83	3.90	$3d^2$	1.83	1.54
Ti	$3d^4$	5.57	4.95	$3d^3$	2.16	2.10
V	$3d^5$	4.82	4.64	$3d^4$	1.80	1.55
Cr	$3d^6$	2.51	3.08	$3d^5$	1.56	1.46
Mn	$3d^7$	2.88	2.52	$3d^6$	1.03	0.98
Fe	$3d^8$	2.20	1.89	$3d^7$	0.96	0.86
Co	$3d^9$	1.85	1.58	$3d^8$	0.82	0.65
Ni	$3d^{10}$	1.40	1.22	$3d^9$	0.66	0.57
Cu	$3d^{10}4s^1$	3.60	3.56	$3d^{10}$	0.48	0.42
Y	$4d^3$	6.82	7.67	$4d^2$	1.72	2.21
Zr	$4d^4$	6.42	7.74	$4d^3$	2.38	2.60
Nb	$4d^5$	8.25	7.40	$4d^4$	2.71	2.52
Mo	$4d^6$	6.73	5.56	$4d^5$	2.82	2.35
Tc	$4d^7$	6.04	5.25	$4d^6$	2.45	1.87
Ru	$4d^8$	5.04	4.58	$4d^7$	2.10	1.73
Rh	$4d^9$	4.24	3.90	$4d^8$	1.74	1.40
Pd	$4d^{10}$	3.44	3.27	$4d^8$	1.42	1.23
Ag	$4d^{10}5s^1$	2.66	2.52	$4d^{10}$	1.16	0.92
La	$5d^3$	6.70	8.60	$5d^2$	1.75	2.22
Hf	$5d^4$	16.75	15.81	$5d^3$	3.09	2.82
Ta	$5d^5$	15.39	13.49	$5d^4$	3.34	3.01
W	$5d^6$	12.04	10.60	$5d^5$	3.50	3.05
Re	$5d^7$	8.82	7.99	$5d^6$	2.84	2.22
Os	$5d^8$	6.81	6.57	$5d^7$	2.30	1.90
Ir	$5d^9$	3.66	3.82	$5d^8$	1.84	1.62
Pt	$5d^{10}$	2.55	3.19	$5d^9$	0.87	1.82
Au	$5d^{10}6s^1$	2.30	3.13	$5d^{10}$	0.92	0.97

В таблице представлены результаты расчетов энергии отталкивания для примесей переходных металлов в нейтральном и ионизованном состояниях в T - и H -междоузлиях кремния, полученные на основе разработанной модели. Эти значения $U_{от}^T$ и $U_{от}^H$ будут в дальнейшем использованы при нахождении энергии миграции и энтальпии растворения d -примесей в кремнии, о чем будет сообщено во II и III частях этой работы.

Л и т е р а т у р а

- [1] Фистуль В. И., Шмугуров В. А. // ФТП. 1987. Т. 21. В. 6. С. 1026—1029.
- [2] Swalin R. A. // J. Phys. Chem. Sol. 1962. V. 23. N 4. P. 154—155.
- [3] Weiser K. // Phys. Rev. 1962. V. 126. N 4. P. 1427—1436.

- [4] Millea M. F. // J. Phys. Chem. Sol. 1966. V. 27. N 4. P. 315—325.
[5] Махмудов А. Ш., Оксенгендлер Б. Л., Юнусов М. С. // ФТП. 1976. Т. 10. В. 2. С. 271—274.
[6] Lindenfelt U., Zunger A. // Phys. Rev. B. 1984. V. 30. N 2. P. 1102—1105.
[7] Pennetta C., Baldereshi A. // Sol. St. Commun. 1982. V. 44. N 9. P. 1397—1400.
[8] Ху С. // Атомная диффузия в полупроводниках. М., 1975. С. 248—405.
[9] Mulliken R. // J. Phys. Chem. 1952. V. 56. N 2. P. 295—311.
[10] Чаркин О. П., Дяткина М. Е. // Строение молекул и квантовая химия. Киев, 1970. С. 163—175.
[11] Ludwig G. W., Woodbury H. H. // Phys. Rev. Lett. 1960. V. 5. N 3. P. 98—103.
[12] Ройцин А. Б., Фирштейн Л. А. // Теор. и эксп. химия. 1966. Т. 2. В. 6. С. 747—766.
[13] Омеляновский Э. М., Фистуль В. И. Примеси переходных металлов в полупроводниках. М., 1983. 192 с.
[14] Марфунин А. С. Введение в физику минералов. М., 1974. 324 с.
[15] Бацанов С. С., Звягина Р. А. Интегралы перекрывания и проблема эффективных зарядов. Новосибирск, 1966. 386 с.
[16] Шмугуров В. А., Фистуль В. И. // Деп. в ОНИИТЭхим. Черкасы, 1986. № 1014-хп.
[17] Берсукер Б. И. Электронное строение и свойства координационных соединений. Л., 1986. 288 с.
[18] Фистуль В. И. // Глубокие уровни в полупроводниках. Ташкент, 1981. С. 87—98.

Московский институт
тонкой химической технологии
им. М. В. Ломоносова

Получена 24.10.1988
Принята к печати 20.12.1988