

УДК 537.311.322
 © 1991

О ВОЗМУЩЕНИИ ЗОННОЙ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ ТОЧЕЧНЫМИ ДЕФЕКТАМИ С КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

И. И. Тальянский

Рассмотрена точно решаемая модель кристалла с точечным потенциалом дефекта и исследовано влияние этого потенциала на энергетическую плотность состояний зонных электронов. Особое внимание при этом уделено случаю, когда уровень локализованного около дефекта электрона попадает в область энергии разрешенной зоны. Такая ситуация обычно интерпретируется как возникновение резонансного уровня на фоне сплошного спектра. В рамках рассмотренной модели получено точное выражение для изменения зонной плотности состояний, обусловленного возмущающим потенциалом дефекта. Найдено условие, при котором от зоны отщепляется уровень и образуется дискретный примесный уровень в запрещенной зоне. Показано, что изменение зонной плотности состояний описывается кривой, которая существенно отличается от лоренцевой и имеет сингулярность на краю зоны.

1. Общие соотношения и возможные приближения. Модель Костера — Слэтера. Полуэллиптическая зона

Ситуация, когда донорный или акцепторный уровень попадает в область энергий разрешенных зон, довольно часто встречается в полупроводниках, особенно в случае узкой запрещенной зоны. При этом возникает резонансное рассеяние носителей тока, для описания которого необходимо знать параметры соответствующего резонансного уровня. Такой уровень проявляется как изменение плотности состояний в зоне $\delta\rho$, которое в некотором приближении описывается пиком лоренцевой формы.

В данной работе на примере точно решаемой модели показано, что такое описание резонансного уровня является очень упрощенным и точное $\delta\rho$ существенно отличается от лоренцева пика, имея сингулярность на границе зоны [1, 2].

Изменение зонной плотности состояний под влиянием потенциала U определяется следующим выражением [3]:

$$\delta\rho = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{d}{dE} \ln \det(1 - G^0 U), \quad (1)$$

где G^0 — операторная функция Грина идеального кристалла. Обозначим

$$Q = \det(1 - G^0 U) = R + iI, \quad (2)$$

где R — действительная, I — мнимая части Q . Тогда (1) можно переписать в виде

$$\delta\rho = \frac{1}{\pi} \frac{R'I - I'R}{R^2 + I^2}, \quad (3)$$

где штрих означает производную по E .

Отметим, что выражение (3) является точным и не зависит от выбора модели невозмущенной зоны и возмущения.

Положение E_0 и ширина Γ резонансного уровня определяются в данной методике следующим образом. Пусть ε_0 — значение энергии, при котором R обращается в нуль, т. е. $R(\varepsilon_0)=0$. Разложим R и I в ряд Тейлора по энергиям вокруг точки ε_0 , сохранив только линейные члены

$$R \approx R'_0(E - \varepsilon_0), \quad I \approx I_0 + I'_0(E - \varepsilon_0), \quad (4)$$

где R'_0 и I'_0 — значения производных в точке ε_0 , а $I_0 = I(\varepsilon_0)$. Приближение, основанное на применении формул (4), мы будем называть «приближением разложения в ряд». Далее в этих формулах E заменяется на комплексную величину $\tilde{E}_0 - i\Gamma/2$ и величины E_0 и Γ находятся из условия $R + iI = 0$. В результате получаются следующие формулы [3]:

$$E_0^{\text{разл}} = \varepsilon_0 - \frac{I_0 I'_0}{R_0'^2 + I_0'^2}, \quad (5)$$

$$\Gamma^{\text{разл}} = \frac{2I_0 R'_0}{R_0'^2 + I_0'^2}. \quad (6)$$

Ясно, что формулы (5), (6) уже не являются точными, так как при их выводе были использованы разложения (4).

Однако и в таком виде формулы (5), (6) обычно не используются и заменяются еще более простыми, приводящими к кривой для $\delta\rho$ в форме распределения Лоренца с максимумом в точке ε_0 . Соответствующее приближение мы будем называть для краткости лоренцевым. В этом приближении

$$E_0^{\text{лор}} = \varepsilon_0, \quad (7)$$

$$\Gamma_{\text{лор}} = 2I_0/R'_0. \quad (8)$$

Эти формулы используются, в частности, в работе [4]. (Заметим, что там через Γ обозначена полуширина кривой, поэтому в формуле для Γ двойка отсутствует).

Замена формул (5) и (6) соответственно на (7) и (8) оправдана только тогда, когда $I'_0 \ll R'_0$. Как будет показано ниже, последнее неравенство может не только не выполняться, но и даже иметь место противоположное неравенство. Выражение для $\delta\rho$ также обычно рассматривают в том же приближении, что и (7) и (8).

Более точное выражение для $\delta\rho$, которое следует из (3), (4), имеет вид

$$\delta\rho^{\text{разл}} = \frac{1}{\pi} \frac{R'_0 I_0}{(R_0'^2 + I_0'^2)(E - \varepsilon_0)^2 + 2I_0 I'_0(E - \varepsilon_0) + I_0'^2}. \quad (9)$$

Если отбросить в этой формуле члены, содержащие I_0' , то получим известную лоренцеву форму кривой

$$\delta\rho^{\text{лор}} = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma^{\text{лор}}/2}{(E - \varepsilon_0)^2 + (\Gamma^{\text{лор}})^2/4}, \quad (10)$$

где $\Gamma^{\text{лор}} = 2I_0/R'_0$, в согласии с (8). Заметим, что формулу (9) можно переписать в другом виде

$$\delta\rho^{\text{разл}} = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma^{\text{разл}}/2}{(E - E_0^{\text{разл}})^2 + (\Gamma^{\text{разл}})^2/4}. \quad (11)$$

Эта формула так же имеет вид лоренцевой кривой, но с максимумом, смещенным в точку $E_0^{\text{разл}}$, и с более точным, чем в (10), выражением для Γ . Как будет показано в разделе 2, точная формула для $\delta\rho$ вообще не сводится к лоренцевой кривой.

Чтобы найти явный вид Q , необходимо задать возмущение U и определенную модель зоны идеального кристалла. Простейшей моделью воз-

мущения, которая часто используется и достаточно хорошо описывает короткодействующие точечные дефекты, является модель Костера—Слэтера [5]. В ней считается, что матричный элемент оператора U на функциях Ванье отличен от нуля и равен U_0 только на том узле, в котором находится дефект, а сами функции Ванье образуются из блоховских функций одной зоны, т. е. это однозонная, одноузельная модель. В этой модели Q имеет вид

$$Q = 1 - G_0 U_0, \quad (12)$$

где G_0 — матричный элемент оператора Грина идеального кристалла на функциях Ванье. Для действительной и мнимой частей при этом получают выражения

$$R(E) = 1 - U_0 \operatorname{Re} G_0(E) = 1 - U_0 P \int \frac{\rho_0(E')}{E - E'} dE', \quad (13)$$

$$I(E) = -U_0 \operatorname{Im} G_0(E) = \pi U_0 \rho_0(E), \quad (14)$$

где P — главное значение интеграла, а $\rho_0(E)$ — плотность состояний в зоне идеального кристалла на один атом, т. е.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_0(E) dE = 1.$$

Для дальнейших расчетов необходимо задать величину $\rho_0(E)$. Мы воспользуемся полуэллиптической моделью плотности состояний [6], которая имеет преимущество, что, совпадая вблизи краев зоны с плотностью состояний стандартной зоны, она в то же время дает правильный качественный ход $\rho_0(E)$ по всей зоне. В этой модели ρ_0 записывается в виде

$$\rho_0(E) = \begin{cases} \frac{2}{\pi w^2} \sqrt{w^2 - E^2}, & |E| \leq w, \\ 0, & |E| > w. \end{cases} \quad (15)$$

Параметр w , как видно из (15), равен полуширине зоны. Начало отсчета энергии выбрано в центре зоны.

При таком выборе $\rho_0(E)$ получим после вычисления интеграла в (13)

$$\operatorname{Re} G_0(E) = \begin{cases} \frac{2}{w^2} (E + \sqrt{E^2 - w^2}), & E < -w, \\ \frac{2}{w^2} E, & -w \leq E \leq w, \\ \frac{2}{w^2} (E - \sqrt{E^2 - w^2}), & E > w. \end{cases} \quad (16)$$

$$\operatorname{Im} G_0(E) = \begin{cases} -\frac{2}{w^2} \sqrt{w^2 - E^2}, & |E| < w, \\ 0, & |E| > w. \end{cases} \quad (17)$$

Как видно из (16), (17), когда ε_0 находится вблизи краев зоны, выполняется неравенство $|I_0'| \gg |R_0'|$.

График функции $\operatorname{Re} G_0(E)$ показан схематически на рис. 1. На нем же изображены различные случаи соотношения между U_0 и w , которые будут обсуждаться в разделе 3.

Обозначим далее через ε_0 следующую величину:

$$\varepsilon_0 = w^2 / 2U_0. \quad (18)$$

Эта величина при $1/U_0 < 2/w$ ($\varepsilon_0 < w$) совпадает с решением уравнения

$$R = 1 - \operatorname{Re} G_0(E) U_0 = 0, \quad |E| < w. \quad (19)$$

При $\epsilon_0 > \omega$ можно рассматривать ϵ_0 просто как некоторый параметр, характеризующий величину возмущения U_0 .

Точное уравнение для определения положения E_0 и ширины Γ резонансного уровня в данной модели имеет вид

$$Q\left(E_0 - i\frac{\Gamma}{2}\right) = 1 - \frac{2}{w^2} U_0 \left(E_0 - i\frac{\Gamma}{2}\right) + i \frac{2U_0}{w^2} \sqrt{w^2 - \left(E_0 - i\frac{\Gamma}{2}\right)^2} = 0. \quad (20)$$

Заметим, что здесь не использовано приближение (4). С учетом (18) последнее равенство можно записать

$$E_0 - i\frac{\Gamma}{2} - \epsilon_0 - i\sqrt{w^2 - \left(E_0 - i\frac{\Gamma}{2}\right)^2} = 0. \quad (21)$$

Из этого уравнения E_0 и Γ определяются приравнованием к нулю действительной и мнимой частей.

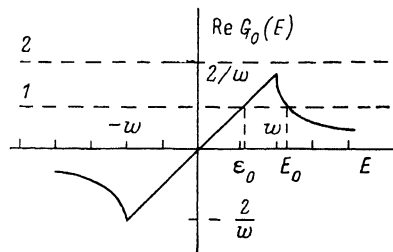


Рис. 1. Действительная часть функции Грина невозмущенного кристалла $1/U_0 < 2/w$ (1), $1/U_0 > 2/w$ (2).

2. Параметры резонансного уровня и изменение плотности состояний

В приближении, которое мы назвали лоренцевым, пренебрегают в (21) величиной $i\Gamma/2$ под знаком радикала. В этом случае сразу получается из (21)

$$E_0^{\text{лор}} = \epsilon_0, \quad (22)$$

$$\Gamma^{\text{лор}} = -2\sqrt{w^2 - \epsilon_0^2}. \quad (23)$$

Формула (22) совпадает с (7), а (23) с тем результатом, который получается из (8) и (16), (17)

Для плотности состояний $\delta\rho$ в данном случае справедлива формула (10) с $\Gamma^{\text{лор}}$, имеющим вид (23). Если вместо (7) и (8) воспользоваться более точными формулами (5) и (6), то получим следующие выражения для положения и ширины уровня:

$$E_0^{\text{разл}} = \epsilon_0 \left(1 + \frac{w^2 - \epsilon_0^2}{w^2}\right), \quad (24)$$

$$\Gamma^{\text{разл}} = -\frac{2}{w^2} (w^2 - \epsilon_0^2)^{3/2}. \quad (25)$$

Анализ этих формул и сравнение их с точными значениями и лоренцевым приближением будут произведены ниже.

Выражение для $\delta\rho$ в рассматриваемом здесь приближении, согласно (11), (24) и (25), имеет вид

$$\delta\rho^{\text{разл}} = -\frac{1}{\pi} \frac{(w^2 - \epsilon_0^2)^{3/2} w^2}{\left(E - \epsilon_0 - \frac{2w^2 - \epsilon_0^2}{w^2}\right)^2 w^4 + (w^2 - \epsilon_0^2)^3}. \quad (26)$$

Обратимся теперь к точному решению уравнения (20). Как нетрудно убедиться, эти решения существуют только в области действительных

значений энергии $\delta\rho$, т. е. при $\Gamma=0$. Для E_0 при этом получается следующая формула:

$$E_0^{\text{точ}} = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_0 + \frac{w^2}{\varepsilon_0} \right). \quad (27)$$

Плотность состояний $\delta\rho$ находится из точной формулы (3) и в рассматриваемой модели имеет вид

$$\delta\rho^{\text{точ}} = -\frac{1}{\pi} \frac{\sqrt{w^2 - E^2} + (E/\sqrt{w^2 - E^2})(E - \varepsilon_0)}{(E - \varepsilon_0)^2 + (w^2 - E^2)}. \quad (28)$$

Это выражение можно упростить

$$\delta\rho^{\text{точ}} = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{w^2 - E^2}} \frac{w^2 - \varepsilon_0 E}{w^2 - 2\varepsilon_0 E + \varepsilon_0^2}. \quad (29)$$

Ясно, что в последних формулах $|E| < w$.

3. Анализ выражений для $\delta\rho$

Сравнение результатов, полученных в различных приближениях, между собой и с точным решением наиболее информативно можно провести, анализируя $\delta\rho$.

Введем для удобства безразмерные переменные

$$z = E/w, \quad z_0 = \varepsilon_0/w. \quad (30)$$

Тогда выражения для $\delta\rho$ (10), (26) и (29) запишутся в виде

$$\delta\rho^i = -\frac{1}{\pi w} F^i(z), \quad (31)$$

где индекс i принимает значения «лор», «разл», «точ». При этом

$$F^{\text{лор}}(z) = \frac{\sqrt{1 - z_0^2}}{(z - z_0)^2 + (1 - z_0^2)}, \quad (32)$$

$$F^{\text{разл}}(z) = \frac{(1 - z_0^2)^{3/2}}{(z - z_0(2 - z_0^2))^2 + (1 - z_0^2)^3}, \quad (33)$$

$$F^{\text{точ}}(z) = \frac{1 - z_0 z}{\sqrt{1 - z^2} (1 - 2z_0 z + z_0^2)}. \quad (34)$$

Начнем с рассмотрения точного выражения (34). Характер его поведения определяется в основном функцией

$$f(z, z_0) = \frac{1 - z_0 z}{1 - 2z_0 z + z_0^2}. \quad (35)$$

Эта функция резко меняет характер зависимости от z в точке $z_0=1$, как это видно из рис. 2. Такой ход зависимости от z приводит к тому, что функция $F^{\text{точ}}(z) = (1/\sqrt{1-z^2}) f(z, z_0)$ является монотонно возрастающей при $z_0 < 1$ и имеет максимум при $z_0 > 1$.

Графики функций $\delta\rho^{\text{точ}}$ представлены на рис. 3, где изображено поведение $\delta\rho$ в верхней половине зоны ($0 \leq z \leq 1$). В нижней половине ($-1 \leq z \leq 0$) получим зеркально-симметричную картину, если заметить также $z_0 \rightarrow -z_0$.

Характер зависимости $\delta\rho$ от z (рис. 3) легко объяснить. Рассмотрим сначала случай $z_0 < 1$, т. е. $\varepsilon_0 < w$. В этом случае возмущающий потенциал $U_0 > w/2$, согласно (18), что соответствует штриховой прямой I на рис. 1. При этом, кроме возмущения плотности состояний в зоне $\delta\rho$, возникает еще дискретный уровень в точке E_0 , определяемой формулой (27), с δ -образной плотностью состояний. Обычно считается, что точка ε_0 при этом является центром резонансного уровня. Это справедливо, как

показано выше, только в лоренцевом приближении. В случае точного решения, как видно из рис. 3, а, особенность возникает только на границе зоны и никаких пиков плотности состояний внутри зоны вообще нет.

Случай $z_0 > 1$, т. е. $U_0 < w/2$ (прямая 2 на рис. 1), интересен тем, что при этом возникают возмущения плотности состояний в зоне, которые

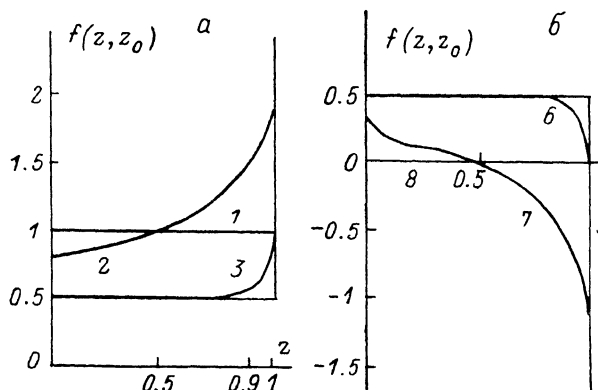


Рис. 2. Графики функций $f(z, z_0)$ при $z_0 < 1$ (а) и $z_0 > 1$ (б). $z_0=0$ (1), 0.5 (2), 0.99 (3) (1- η) (4), (1+ η) (5), 1.01 (6), 2 (7), ∞ (8); $\eta \rightarrow +0$.

нельзя отнести к резонансам ($\delta\rho > 0$) или антирезонансам ($\delta\rho < 0$), поскольку $\delta\rho$ в данном случае меняет знак (рис. 3, б). Фактически здесь происходит просто перераспределение плотности состояний внутри зоны. Дискретный уровень при этом не образуется, так как величина возмущения для этого недостаточна. Если возмущение сосредоточено в узкой области, что имеет место при z_0 , близких к единице, то можно эту область

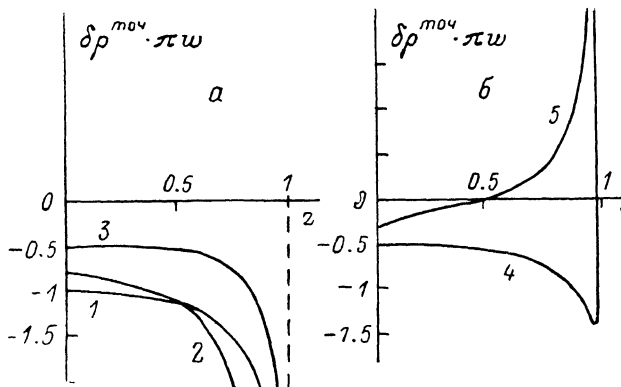


Рис. 3. Изменение зонной плотности состояний при $z_0 < 1$ (а) и $z_0 > 1$ (б). $z_0=0$ (1), 0.5 (2), 0.99 (3), 1.01 (4), 2 (5).

назвать резонансным или виртуальным уровнем. Мы будем называть этот уровень виртуальным, чтобы отличить от того резонансного уровня, который образуется одновременно с дискретным уровнем (рис. 3, а). Центр виртуального уровня можно отождествить с положением минимума $\delta\rho^{\text{loch}}$.

Преимуществом точного выражения для $\delta\rho$ является также то, что для него выполняется теорема Левинсона

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta\rho(E) dE = 0, \quad (36)$$

выражающая сохранение числа состояний. Для виртуального уровня лоренцевой формы эта теорема не выполняется, так как $\delta\rho^{\text{loch}}(E)$ не меняет знака.

Отметим, что $\delta\rho$ в формуле (36) представляет собой полное изменение плотности состояний как в пределах разрешенной зоны, так и вне ее. Для изменения числа состояний внутри зоны из (31), (34) следует

$$\int_{-w}^w \delta\rho^{\text{точ}}(E) dE = \begin{cases} -1, & z_0 < 1, \\ 0, & z_0 > 1. \end{cases} \quad (37)$$

Верхнее равенство (37) соответствует уровню антирезонанса, который вместе с дискретным уровнем, дающим вклад в (36), равный единице, обеспечивает выполнение теоремы Левинсона. В случае нижнего равенства (37) дискретный уровень отсутствует и выполнение (36) обеспечивается самим виртуальным уровнем.

4. Модель корневой плотности состояний $\rho_0(E)$

Выбор плотности состояний невозмущенной зоны в виде (15) не является принципиальным моментом. Аналогичные результаты получаются и для плотности состояний $\rho_0(E) = \alpha\sqrt{E}$, которая соответствует стандартной зоне с квадратичным законом дисперсии у края зоны. Константа α может быть определена из условия нормировки

$$\int_2^{2w} \rho_0(E) dE = 1,$$

где $2w$ — ширина зоны. Это дает значение $\alpha = 3/2(2w)^{3/2}$. Аналогом уравнения (20) при этом является равенство, которое вблизи края зоны имеет вид

$$E_0 - i\frac{\Gamma}{2} - \varepsilon_0 - i\kappa\sqrt{E_0 - i\frac{\Gamma}{2}} = 0, \quad (38)$$

где

$$\varepsilon_0 = 2w + \frac{4}{3}\frac{w^2}{U_0}, \quad \kappa = \pi\sqrt{\frac{w}{2}}. \quad (39)$$

Величины E_0 и Γ в различных приближениях в этой модели равны

$$E_0^{\text{лор}} = \varepsilon_0, \quad E_0^{\text{разл}} = \varepsilon_0 \frac{4\varepsilon_0 - \kappa^2}{4\varepsilon_0 + \kappa^2}, \quad E_0^{\text{точ}} = \varepsilon_0 - \frac{\kappa^2}{2}, \quad (40)$$

$$\Gamma^{\text{лор}} = -2\kappa\sqrt{\varepsilon_0}, \quad \Gamma^{\text{разл}} = -\frac{8\kappa\varepsilon_0^{3/2}}{4\varepsilon_0 + \kappa^2}, \quad \Gamma^{\text{точ}} = -2\kappa\sqrt{\varepsilon_0 - \frac{\kappa^2}{4}}. \quad (41)$$

Из этих формул видно, что условие применимости лоренцевого приближения выполняется при $\kappa^2 \ll 4\varepsilon_0$. Именно это приближение рассмотрено в [7].

Точное выражение для $\delta\rho$ в данной модели имеет вид

$$\delta\rho^{\text{точ}}(E) = -\frac{1}{2\pi} \frac{\kappa}{\sqrt{E}} \frac{E + \varepsilon_0}{(E - E_0^{\text{точ}})^2 + (\Gamma^{\text{точ}})^2/4}, \quad (42)$$

где $E_0^{\text{точ}}$ и $\Gamma^{\text{точ}}$ определены в (40) и (41). Если заменить в последней формуле в числителе E на $E_0^{\text{точ}}$, то получим

$$\delta\rho(E) = -\frac{1}{\pi\kappa} \frac{1}{\sqrt{E}} \frac{(\Gamma^{\text{точ}})^2/4}{(E - E_0^{\text{точ}})^2 + (\Gamma^{\text{точ}})^2/4}. \quad (43)$$

В таком виде $\delta\rho$ использовалось в работе [8], в которой E_0 и Γ фигурировали как некоторые параметры.

Заметим в заключение, что полученные точные выражения для $\delta\rho$ справедливы во всей зоне, а не только вблизи резонанса. Эта величина содержит всю информацию об изменении плотности состояний под дей-

ствием возмущения, в то время как E_0 и Γ , строго говоря, имеют смысл только в лоренцевом приближении.

Тот результат, что точное $\delta\rho$ имеет особенность на границе зоны, а не внутри ее, представляется разумным с физической точки зрения, если учесть, что дискретный уровень возникает путем отщепления от зоны уровня, лежащего на границе. Резкое увеличение плотности состояний на границе зоны под воздействием потенциала точечных дефектов может сказаться на характере кинетических процессов.

Автор выражает благодарность Б. Л. Гельмонту и И. В. Стасюку за полезные обсуждения.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Тальянский И. И. // Препринт ИТФ-88-103Р. Киев, 1988. 29 с.
- [2] Тальянский И. И. // Тез. докл. XIV Всес. (Пекаровского) совещ. по теории полупроводников. Донецк, 1989. С. 219.
- [3] Socrates T. Pantelides // *Rev. Mod. Phys.* 1978. V. 50. N 4. P. 797—858.
- [4] Mauger A., Friedel T. // *Phys. Rev. B.* 1975. V. 12. N 6. 2412—2423.
- [5] Koster G. P., Slater J. C. // *Phys. Rev.* 1954. V. 95. N 5. P. 1167—1176.
- [6] Hubbard J. // *Proc. Roy. Soc. A.* 1954. N 281. P. 401—419.
- [7] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Квантовая механика*. М., 1974. 752 с.
- [8] Аронов А. Г., Кригель В. Г., Фарбштейн И. И. // *Письма в ЖЭТФ*. 1971. Т. 14. С. 307—310.

Львовский государственный университет
им. И. Франко

Поступило в Редакцию
24 июля 1990 г.

