

УДК 539.2
© 1992ПЕРЕСТРОЙКА ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА
МАЛОМЕРНЫХ СИСТЕМ
С ПРИМЕСНЫМИ УРОВНЯМИ ВБЛИЗИ КРАЯ ЗОНЫ*М. А. Иванов, Ю. В. Скрипник*

В рамках одноузельной модели диагонального беспорядка исследовано влияние малой концентрации примесей на характер спектра электронных состояний в маломерных кристаллических системах, т. е. системах, у которых показатель степени в законе дисперсии больше размерности пространства. С помощью кластерных разложений одночастичных функций Грина, для которых определяются области их расходимости, оценены, в частности, концентрационное уширение примесного уровня, плотность состояний, отвечающая парам примесей, а также ширины переходных областей между флуктуационными состояниями и слабозатухающими состояниями блоховского типа.

В работах [1-3] на примере неупорядоченных трехмерных систем с квадратичным законом дисперсии было показано, что в случае, когда примесный уровень расположен вблизи края зоны, уже при относительно малой концентрации примесных центров происходит полная перестройка спектра кристалла в окрестности этого края. Аналогичное рассмотрение [4, 5] колебательного спектра маломерных систем, т. е. таких, у которых размерность пространства меньше, чем показатель степени в разложении квадрата частоты по волновому вектору, показало, что характер перестройки спектра при наличии слабосвязанных или тяжелых примесных атомов имеет существенные отличия по сравнению со случаем «нормального» трехмерного кристалла. В настоящей работе исследуется перестройка электронного спектра маломерных систем при наличии примесных уровней вблизи края зоны. При этом, как и в предыдущих работах, проводится анализ сходимости разложения одночастичной функции Грина в ряд по кластерам взаимодействующих примесных центров, что позволяет выделить слабозатухающие состояния блоховского типа.

Гамильтониан электронной подсистемы кристалла с примесями запишем, как обычно, в следующем виде:

$$H = H_0 + H_i,$$
$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}, \quad (1)$$

где H_0 — исходный гамильтониан невозмущенного кристалла, причем для простоты считается, что имеется лишь одна зона с законом дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$; $a_{\mathbf{k}}^+$ и $a_{\mathbf{k}}$ — фермиевские операторы зонных состояний с волновым вектором \mathbf{k} в пространстве размерности d ; H_i — примесная часть гамильтониана. Будем полагать, что закон дисперсии вблизи края невозмущенного спектра имеет изотропный характер

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = E(ka)^m, \quad \varepsilon(\mathbf{k}) \ll E, \quad (2)$$

где a — постоянная решетки; E — параметр порядка ширины невозмущенной зоны, который выберем в качестве единицы измерения энергии (т. е. $E=1$). Показатель степени m в (2) будем считать большим, чем размерность d рассматриваемой системы.

Значение диагонального, в узельном представлении, элемента одночастичной функции Грина исходного кристалла

$$g_{00}(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}), \quad g(\mathbf{k}) = (\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k}))^{-1}, \quad (3)$$

где N — число узлов в решетке, нетрудно найти, используя (2) и величину телесного угла в пространстве произвольной размерности

$$g_{00}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{\beta} (\operatorname{ctg}(\alpha\pi) + i) \varepsilon^{\alpha-1}, & \varepsilon > 0, \\ -\frac{1}{\beta \sin(\alpha\pi)} (-\varepsilon)^{\alpha-1}, & \varepsilon < 0, \end{cases} \quad (4)$$

$$\alpha = \frac{d}{m} < 1, \quad \beta = m \Gamma\left(\frac{d}{2}\right) \pi^{\frac{d}{2}-1} 2^{d-1}, \quad |\varepsilon| \leq 1.$$

Здесь считается, что значение α не слишком близко к единице, и оставлены лишь слагаемые, имеющие особенность при $\varepsilon \rightarrow 0$.

При записи примесного гамильтониана H_i выберем простейшую одноузельную модель диагонального беспорядка, когда наличие примеси меняет потенциал на одном узле, но не меняет интегралов перекрытия. Тогда

$$H_i = v \sum_s a_s^+ a_s,$$

$$a_s = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_s}, \quad (5)$$

где \mathbf{r}_s — радиус-вектор узла решетки s , занятого примесью. В рассматриваемой модели перенормированное представление для усредненной одночастичной функции Грина $G(\mathbf{k})$ имеет вид [1-3]

$$G(\mathbf{k}) = (\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(\mathbf{k}))^{-1}, \quad (6)$$

$$\Sigma(\mathbf{k}) = c\tau \left(1 - cA_{00} - cA_{00}^2 + c \sum_{l \neq 0} \frac{A_{0l}^3 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_l} + A_{0l}^1}{1 - A_{0l}^2} + \dots \right), \quad (7)$$

$$\tau = v(1 - vG_{00})^{-1}, \quad A_{0l} = \tau G_{0l}, \quad G_{0l} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_l}, \quad (8)$$

а перенормированное представление

$$G(\mathbf{k}) = g(\mathbf{k}) + g(\mathbf{k}) T(\mathbf{k}) g(\mathbf{k}), \quad (9)$$

$$T(\mathbf{k}) = c\tau^0 \left(1 + c \sum_{l \neq 0} \frac{A_{0l}^3 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_l} + A_{0l}^1}{1 - A_{0l}^2} + \dots \right), \quad (10)$$

$$\tau^0 = v(1 - v g_{00})^{-1}, \quad A_{0l}^0 = \tau^0 g_{0l}, \quad g_{0l} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_l}, \quad (11)$$

где c — концентрация примесей, а l пробегает по всем узлам решетки. В (7) и (10) учтены вклады от изолированных примесных центров и кластеров из двух

таких центров, расположенных на произвольных расстояниях друг от друга, и отброшены члены, отвечающие кластерам из трех и большего числа примесей.

В маломерных системах, когда возмущение имеет форму (6), всегда возникает локальный примесный уровень, лежащий ниже исходной зоны при $v < 0$. Положение этого уровня определяется решением уравнения

$$1 - v g_{00}(\varepsilon_x) = 0. \quad (12)$$

В случае слабых возмущений, когда $v < 0$ и $|v| \ll \beta \sin(\alpha\pi)$, воспользовавшись (4), получим

$$\varepsilon_x = - \left(\frac{|v|}{\beta \sin(\alpha\pi)} \right)^{\frac{1}{1-\alpha}}, \quad |\varepsilon_x| \ll 1, \quad (13)$$

что справедливо, когда $1-\alpha \gg |v|$.

При этом нетрудно показать, что радиус спадающей волновой функции примесного состояния на далеких расстояниях равен $r_0 = a/(-\varepsilon_x)^{1/m}$.

Хорошо известно [1-3], что при некоторой концентрации $c \sim (r_0/a)^{-d}$, когда радиус волновой функции становится порядка среднего расстояния между примесями, происходит существенная перестройка спектра как вблизи примесного уровня, так и в окрестности края зоны. Начнем рассмотрение со случая малых концентраций примесей, когда $c < c_n$, где

$$c_n = (-\varepsilon_x)^\alpha / \beta = \left(\frac{r_0}{a} \right)^{-d} / \beta = \left(\frac{|v|}{\beta^{1/\alpha} \sin(\alpha\pi)} \right)^{\frac{\alpha}{1-\alpha}}. \quad (14)$$

При таких концентрациях в окрестности локального уровня спектр состоит из примесных уровней, соответствующих парам и большим группам примесных центров. Анализ, аналогичный проведенному в [1-3], показывает, что для описания такого участка спектра наиболее подходящим является неперенормированное представление (9) — (11).

Поскольку среднее расстояние между примесями в рассматриваемом случае много больше, чем r_0 , то величина A_{0l}^0 на характерных расстояниях ведет себя как $\sim \exp(-r/r_0)$ и быстро спадает с ростом расстояния. При этом на относительно малых расстояниях $|A_{0l}^0| > 1$, а на больших $|A_{0l}^0| < 1$.

В результате условие сходимости ряда (10) в окрестности примесного уровня принимает вид

$$c \Omega(d) \frac{1}{d} \left(\frac{r(\varepsilon)}{a} \right)^d < \xi, \quad \Omega(d) = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}, \quad (15)$$

где $\Omega(d)$ — телесный угол в пространстве размерности d , ξ — параметр порядка единицы, а $r(\varepsilon)$ есть корень уравнения

$$|A_{0l}^0| = 1 \quad (16)$$

при заданной энергии ε . Учитывая экспоненциальную зависимость величины A_{0l}^0 от расстояния, из (15) получим следующее условие сходимости ряда (10) вблизи ε_x :¹

¹ Перенормированное представление (6) — (8) сходится в этой области частот, если $c \left| \sum_l A_{0l}^0 \right| \ll 1$ или иначе $|\varepsilon - \varepsilon_x| \gg |\varepsilon_x| (c/\bar{\varepsilon}_n)^{1/2}$, т. е. область расходимости оказывается значительно шире, чем в (17), что и определяет преимущество здесь неперенормированного представления.

$$|\varepsilon - \varepsilon_x| \gg \Gamma_x,$$

$$\Gamma_x = |\varepsilon_x| (c/c_n)^{\frac{d-1}{2d}} \exp(-\eta (c/c_n)^{1/d}),$$

$$\eta = \left(\xi \frac{2^{d-2} \Gamma(d/2) m d}{\pi} \right)^{1/d}, \quad (17)$$

где Γ_x — концентрационное уширение примесного уровня, имеющее порядок энергии взаимодействия примесей на средних расстояниях. Во всей области сходимости $r(\varepsilon) \ll r$ (r — среднее расстояние между примесями $\sim c^{-1/d}$), и только при $|\varepsilon - \varepsilon_x| \sim \Gamma_x$ $r(\varepsilon)$ становится $\sim r$. В области концентрационного уширения становятся существенными взаимодействия примесных центров на средних расстояниях, т. е. необходимо учитывать большие кластеры, и эта область не может быть описана в рамках использованных здесь методов. Отметим также, что условие (17) не ограничено случаем маломерных систем.

Найдем теперь плотность состояний в окрестности примесного уровня, когда $|\varepsilon - \varepsilon_x| \ll |\varepsilon_x|$ и выполняется условие (17). В указанной области значений энергии главный вклад в плотность состояний вносят кластеры, отвечающие парам примесей. Используя выражения (9)–(11) и значение величины $r(\varepsilon)$ в логарифмическом приближении

$$r(\varepsilon) = (a/(-\varepsilon)^{1/m}) \ln |1 - (\varepsilon_x/\varepsilon)^{\alpha-1}|^{-1}, \quad (18)$$

получим

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{\pi N} \ln G_{00} = \frac{\pi^{d/2} (1-\alpha) c^2 \ln^{d-1} |1 - (\varepsilon_x/\varepsilon)^{\alpha-1}|^{-1}}{\Gamma(d/2) \varepsilon^2 |(-\varepsilon_x)^{\alpha-1} - (-\varepsilon)^{\alpha-1}|}. \quad (19)$$

Как и следовало ожидать, плотность состояний расходится при $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_x$, причем в рассматриваемой области энергий $|\varepsilon - \varepsilon_x| \ll |\varepsilon_x|$ оказывается симметричной функцией относительно ε_x . Асимметрия в плотности состояний, связанная в основном со слагаемым

$$c \sum_l A_{0l}^0 \exp(ikr_l) (1 - A_{0l}^{02})^{-1}$$

в (10), будет проявляться, когда $|\varepsilon - \varepsilon_x|$ окажется порядка $|\varepsilon_x|$.

Приведем плотность состояний более подробно для физически интересного случая одномерного кристалла с квадратичным законом дисперсии ($m=2$, $d=1$, $\alpha=1/2$). Тогда выражение (18) окажется справедливым во всей допустимой области энергий вплоть до некоторой окрестности невозмущенного края зоны, а плотность состояний с учетом указанного выше слагаемого, описывающего асимметрию, принимает вид

$$\rho(\varepsilon) = \frac{c^2}{2(-\varepsilon_x)^{3/2}} \frac{1 - (1-z)(1 - \ln|1-z|)}{|1-z|z^3},$$

$$z = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_x}}, \quad 0 < z < 2, \quad |1-z| \gg \Gamma_x/\varepsilon_x. \quad (20)$$

В отличие от результатов, приведенных в [6], здесь величина $\rho(\varepsilon)$, во-первых, оказывается симметричной функцией относительно ε_x при $|\varepsilon - \varepsilon_x| \ll \ll |\varepsilon_x|$, а во-вторых, $\rho(\varepsilon)$ при приближении к краю невозмущенной зоны оказывается равной $c^2/(4(-\varepsilon_x)^{3/2}z)$, т. е. расходится при $z \rightarrow 0$.

Перейдем теперь к рассмотрению окрестности нижнего края невозмущенного спектра. Неперенормированное представление перестает сходиться при приближении к краю со стороны отрицательных энергий, когда $|\varepsilon| \sim |\varepsilon_x|$. Как было показано в работах [1-3], для трехмерного кристалла указанная

окрестность лучше описывается с помощью перенормированного представления (6)–(8). Вдали от края зоны для рассматриваемых маломерных систем состояния имеют квазиблоховский характер с малым затуханием на длине волны (хотя, вообще говоря, могут быть и локализованными в строгом понимании [7]) и описываются законом дисперсии

$$\operatorname{Re} \bar{\varepsilon} = \varepsilon(\mathbf{k}), \quad \bar{\varepsilon} = \varepsilon - \sigma\tau, \quad (21)$$

где выражение для τ имеет тот же вид, что и τ^0 , если заменить ε на $\bar{\varepsilon}$.

Анализ перенормированного представления (6)–(8) показывает, что условие его сходимости можно представить в виде

$$c \left| \sum_l A_{0l}^2 \right| \ll 1. \quad (22)$$

Условие (22) с учетом выражений (4) и (8) преобразуется к форме

$$\begin{aligned} c \left| \sum_l A_{0l}^2 \right| &= c \left| \tau^2 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\bar{\varepsilon} - \varepsilon(\mathbf{k}))^{-2} \right| = c \left| \tau^2 \left(-\frac{\partial}{\partial \bar{\varepsilon}} \right) G_{00} \right| = \\ &= \left| \frac{c\beta(1-a) \sin(a\pi) (-\bar{\varepsilon})^{\alpha-2}}{((- \bar{\varepsilon})^{\alpha-1} - (-\varepsilon_x)^{\alpha-1})^2} \right| \ll 1. \end{aligned} \quad (23)$$

В результате получим следующую оценку области, где состояния имеют квазиблоховский характер:

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} &\gg \Gamma_1, \quad \Gamma_1 = \left(\frac{c\beta f}{f_1^2} \right)^{1/\alpha} = |e_x| \left(\frac{c}{\bar{c}_n} \right)^{1/\alpha} \frac{1}{f_1^{2/\alpha}}, \\ f &= \frac{\sin(a\pi)}{1-a}, \quad f_1 = \frac{1}{1-a} \left(1 - \left(\frac{c}{\bar{c}_n} \right)^{\frac{1-a}{\alpha}} \right), \quad \bar{c}_n = \frac{c_n}{f}. \end{aligned} \quad (24)$$

Та же оценка области расходимости возникает и для так называемого полуперенормированного представления [1], в котором в отличие от неперенормированного представления учтен сдвиг края основной зоны.

Соответственно минимальное значение волнового вектора, определяемое условием $\varepsilon(k_{\min}) \sim \Gamma_1$,

$$k_{\min} \sim \frac{1}{a} \left(\frac{c\beta f}{f_1^2} \right)^{1/d}. \quad (25)$$

Поскольку в области сходимости перенормированного представления выполняется условие $d\varepsilon/d\bar{\varepsilon} = 1 + O(\Gamma_1/\bar{\varepsilon})$, то закон дисперсии состояний блоховского типа (21) может быть представлен в виде

$$\varepsilon = \bar{\varepsilon}(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) + \operatorname{Re} \frac{c\nu}{1 - \nu g_{00}(\varepsilon(\mathbf{k}))}, \quad (26)$$

а их затухание

$$\Gamma_{\mathbf{k}} = \Gamma(\bar{\varepsilon}(\mathbf{k})) = \operatorname{Im} \frac{c\nu}{1 - \nu g_{00}(\varepsilon(\mathbf{k}))}. \quad (27)$$

Условие малости затухания на длине волны (критерий Иоффе—Регеля—Мотта) принимает вид

$$k \gg \frac{1}{l}, \quad \frac{1}{l} = \frac{\Gamma_{\mathbf{k}}}{v\bar{\varepsilon}(k)/\partial k} \approx \frac{\Gamma_{\mathbf{k}}}{v\varepsilon(k)/\partial k} \quad (28a)$$

или иначе

$$\operatorname{Re} \bar{\varepsilon} \gg \operatorname{Im}(\sigma\tau). \quad (28б)$$

Нетрудно видеть, что условие малости затухания (28) совпадает с условием сходимости перенормированного представления (22).

Таким образом, можно сделать вывод, что на масштабе $\varepsilon \sim \Gamma_1$ происходит переход от состояний квазиблоховского типа к хорошо локализованным состояниям вне зоны непрерывного спектра.

Определим, какой величине энергии ε отвечает значение $\varepsilon \sim \Gamma_1$, т. е. ширины области расходимости. Подставляя значение k_{\min} (25) в закон дисперсии (26), получим (при $1-\alpha \ll 1$)

$$\Delta_1 = \left(\frac{c\beta f}{f_1^{2-\alpha}} \right)^{1/\alpha} = |\varepsilon_x| (c/\bar{c}_n)^{1/\alpha} \frac{1}{f_1^\alpha} = \Gamma_1 f_1. \quad (29)$$

Величина Δ_1 играет роль сдвига края зоны состояний блоховского типа.

Найденный сдвиг края зоны Δ_1 при $c \ll \bar{c}_n$ происходит в сторону положительных значений энергии. В случае, когда параметр α не близок к единице, $f_1 \sim 1$ и величина сдвига (29) оказывается того же порядка, что и область расходимости Γ_1 , т. е. понятие сдвига края зоны теряет свой смысл. Это связано с тем, что действительная и мнимая части в выражении для g_{00} сравнимы между собой. При этом величина Γ_1 , как видно из (24), не зависит от параметра ν , характеризующего величину возмущения, вносимого дефектом.

Если же $1-\alpha \ll 1$, то выражение для f_1 имеет следующие асимптотические значения:

$$f_1 = \begin{cases} \frac{1}{1-\alpha}, & (1-\alpha) \ln\left(\frac{\bar{c}_n}{c}\right) \gg 1, \\ \ln\left(\frac{\bar{c}_n}{c}\right), & (1-\alpha) \ln\left(\frac{\bar{c}_n}{c}\right) \ll 1. \end{cases} \quad (30)$$

Таким образом, если концентрация значительно меньше характерного значения \bar{c}_n , то $f_1 \gg 1$, когда $1-\alpha \ll 1$, и в этом случае можно говорить о сдвиге края зоны. Отметим, что то же значение сдвига края зоны Δ_1 может быть получено также из условия $\varepsilon - c\tau^0 = 0$. При приближении концентрации к значению \bar{c}_n , функция f_1 становится порядка единицы, так что сдвиг края зоны оказывается, как и при $1-\alpha \sim 1$, порядка области расходимости Γ_1 .

Приведем также значение длины свободного пробега для квазиблоховских состояний, обусловленное рассеянием на примесях,

$$l = \frac{m}{c\beta} (ka)^{d-1} \left\{ \left(\frac{(kr_0)^{1-\alpha} a}{\sin(\alpha\pi)} + \text{ctg}(\alpha\pi) \right)^2 + 1 \right\}. \quad (31)$$

Видно, что в области $k \sim r_0^{-1}$ (т. е. $\varepsilon \sim |\varepsilon_x|$), если α не слишком близко к единице, происходит смена характера зависимости длины свободного пробега от волнового вектора k , сопровождающаяся увеличением показателя степени при k , когда $k \gg r_0^{-1}$.

При этом, если $\alpha \neq 1/2$, в выражении для затухания Γ_k в области энергии $\varepsilon(k) \sim |\varepsilon_x|$ имеется достаточно хорошо определенный максимум, а в законе дисперсии — изгиб. Оба этих факта можно рассматривать как проявление резонанса на энергии, зеркальной по отношению к локальному уровню.

Для одномерной системы с квадратичным законом дисперсии ($d=1$, $\alpha=1/2$) в области $k_{\min} \ll k \ll r_0^{-1}$ длина свободного пробега $l=c^{-1}$, т. е. не зависит от длины волны и равна среднему расстоянию между примесными атомами; в области же $k \gg r_0^{-1}$ значение l растет пропорционально квадрату волнового вектора $l=(kr_0)^2/c$.

В области $\varepsilon - \Delta_1 \gg \Gamma_1$ плотность состояний описывается выражением

$$\rho(\varepsilon) = \rho_0(\varepsilon) = \pi^{-1} \text{Im } g_{00}(\varepsilon).$$

Если $\Delta_1 \gg \Gamma_1$, то при $\varepsilon - \Delta_1 \sim \Gamma_1$ величина $\rho(\varepsilon) \sim \Gamma_1^{\alpha-1}$ и в $(\Delta_1/\Gamma_1)^{1-\alpha}$ раз превышает $\rho_0(\Delta_1)$ — плотность состояний невозмущенного кристалла на той же энергии ($\rho(\varepsilon)$ асимптотически приближается к $\rho_0(\varepsilon)$, когда $\varepsilon \gg \Delta_1$). В области энергий $\varepsilon - \Delta_1 \sim \Gamma_1$ величина $\rho(\varepsilon)$ выходит на максимум и далее в области энергий $\Delta_1 - \varepsilon \gg \Gamma_1$ плотность состояний резко падает и выходит на значение (19), отвечающее вкладам от пар примесных атомов.

Отметим, что аналогичная оценка для величины Γ_1 была получена также в [8] в рамках модели Ллойда—Фриша одномерной неупорядоченной системы с квадратичным законом дисперсии (т. е. в случае, когда $\alpha = 1/2$ и $\Delta_1 \sim \Gamma_1$) при рассмотрении области, где плотность состояний выходит на слабо возмущенное начальное значение.

С увеличением концентрации примесных центров растут ширины областей расходимости как в окрестности края зоны, так и вблизи локального уровня. При $c \sim \bar{c}_n$, как видно из (17) и (24), они становятся порядка расстояния от локального уровня до края зоны. В результате в этой области концентраций должен перестраиваться характер спектра в окрестности края зоны.

Выражение для концентрации, при которой происходит перестройка спектра элементарных возбуждений, может быть получено также из самосогласованного выражения для $\bar{\varepsilon}$ в линейном приближении по концентрации (21). При малых концентрациях решение данного уравнения приводит к наличию двух областей, где отлична от нуля $\text{Im } G_{00}$ (одна область отвечает слабовозмущенному исходному спектру, а другая расположена вблизи ε_n). При некоторой концентрации примесей обе эти области сливаются. Соответствующее значение концентрации \bar{c}_n (концентрации перестройки) имеет значение

$$\bar{c}_n = \bar{c}_n f_3(\alpha),$$

$$f_3(\alpha) = \frac{4\alpha^{\frac{\alpha}{1-\alpha}}}{(2-\alpha)^{\frac{2-\alpha}{1-\alpha}}}. \quad (32)$$

Отметим, что функция $f_3(\alpha)$ на всем интервале $0 < \alpha < 1$ не имеет особенностей и оказывается порядка единицы.

Анализ перенормированного представления показывает, что при $\bar{c}_n \ll c \ll 1$ условие сходимости ряда (22) принимает вид

$$\bar{\varepsilon} \gg \Gamma_2,$$

$$\Gamma_2 = |\varepsilon_n| \left(\frac{c}{\bar{c}_n} \right)^{\frac{1}{2-\alpha}} \frac{1}{f_2^{\frac{2-\alpha}{2}}}, \quad (33)$$

где

$$f_2 = \frac{1}{1-\alpha} \left(1 - \left(\frac{\bar{c}_n}{c} \right)^{\frac{1-\alpha}{2-\alpha}} \right). \quad (34)$$

Край состояний блоховского типа сдвигается на величину

$$\Delta_2 = -|\varepsilon_n| \frac{c}{\bar{c}_n f_2}. \quad (35)$$

Отметим, что этот сдвиг происходит в сторону отрицательных значений энергии, т. е. в обратную сторону по сравнению со случаем малых концентраций ($c < \bar{c}_n$). Как видно из (33) и (35), величины Δ_2 и Γ_2 при $c > \bar{c}_n$ значительно превышают энергию невозмущенного локального уровня $|\varepsilon_n|$. Асимптотические значения функции f_2 при $c \gg \bar{c}_n$ можно записать в виде

$$f_2 = \begin{cases} \frac{1}{1-\alpha}, & \frac{1-\alpha}{2-\alpha} \ln\left(\frac{c}{\bar{c}_n}\right) \gg 1, \\ \frac{\ln(c/\bar{c}_n)}{2-\alpha}, & \frac{1-\alpha}{2-\alpha} \ln\left(\frac{c}{\bar{c}_n}\right) \ll 1 \end{cases} \quad (36)$$

(при $1-\alpha \sim |v|$ всегда выполняется второе условие).

Таким образом, в области $c \gg \bar{c}_n$ величина сдвига Δ_2 всегда превосходит область расходимости Γ_2 (в случае, когда α не слишком близко к единице, указанное неравенство выполняется за счет более низкой степени в зависимости Γ_2 от (c/\bar{c}_n) по сравнению с Δ_2 , а при $1-\alpha \ll 1$ за счет большого значения функции f_2). При выполнении верхнего условия в выражении для f_2 (36) сдвиг края зоны и его уширение выходят на асимптотические значения

$$\Delta_2 = cv, \quad \Gamma_2 = \left(\frac{cv^2}{\beta f}\right)^{\frac{1}{2-\alpha}}, \quad (37)$$

и в области $\varepsilon - cv \gg \Gamma_2$ плотность состояний мало отличается от сдвинутой на величину cv исходной плотности состояний невозмущенного кристалла (в указанном здесь смысле значение Γ_2 для одномерного кристалла с квадратичным законом дисперсии было получено в [6]).

Ниже области расходимости вплоть до значений энергии v находятся флуктуационные состояния, отвечающие, как правило, большим скоплениям дефектов и имеющие, следовательно, экспоненциально малое значение плотности состояний (если α близко к единице, то при определенных условиях в некоторой окрестности края зоны могут располагаться состояния, отвечающие парам близколежащих примесных центров).

Выше области расходимости находятся состояния блоховского типа. Минимальное значение волнового вектора для них имеет порядок

$$k_{\min} \sim \frac{1}{r_0} \left(\frac{c}{\bar{c}_n f_2^2}\right)^{\frac{2}{2m-d}} \gg \frac{1}{r_0}. \quad (38)$$

Длина свободного пробега таких состояний описывается выражением (30) при $k \gg r_0^{-1}$, а закон дисперсии — выражением (26), которое, если выполняется верхнее условие в (36), принимает вид

$$\varepsilon = cv + \varepsilon(\mathbf{k}). \quad (39)$$

Общее число состояний во флуктуационной области спектра при учете экспоненциально спадающей части плотности состояний имеет тот же порядок величины, что и число состояний в области расходимости ряда вблизи края зоны (т. е. в области с полушириной Γ_2). Соответствующая оценка числа состояний, приходящихся на один атом матрицы, имеет вид

$$n_f = \pi^{-1} \int_0^{\Gamma_2} \text{Im } g_{00}(\bar{\varepsilon}) d\bar{\varepsilon} = \frac{\Gamma_2^3}{\pi\beta a} = \frac{cf}{\pi a} \left(\frac{\bar{c}_n}{c}\right)^{\frac{2(1-\alpha)}{2-\alpha}} \frac{1}{\frac{2\alpha}{f_2^{2-\alpha}}}. \quad (40)$$

Принимая во внимание, что $c \gg \bar{c}_n$ и $\alpha < 1$, получим, что $n_f \ll c$, т. е. общее число флуктуационных состояний меньше числа примесей в кристалле. В результате, если каждый примесный атом привносит в систему один дополнительный электрон (донорные центры), то результирующий уровень Ферми для маломерных систем окажется расположенным в области слабозатухающих состояний блоховского типа.

Если же параметр возмущения положителен, то локальный уровень ниже края исходного спектра не возникает. Описание же края зоны блоховских состояний с очевидными изменениями можно перенести и на данный случай. Основным отличием будет то, что после перестройки спектра, когда $s \gg \tilde{c}_n$, где c_n определяется (14), край зоны состояний блоховского типа будет, как и при $s \ll \tilde{c}_n$, смещаться в сторону положительных, а не отрицательных энергий, как это имело место при $\nu < 0$.

В заключение отметим, что приведенные выше результаты в основном сохраняются и в предельном случае $\alpha \rightarrow 1$, т. е., например, для двумерных систем с квадратичным законом дисперсии.

Список литературы

- [1] Иванов М. А., Погорелов Ю. Г. // ЖЭТФ. 1977. Т. 72. № 6. С. 2198—2209.
- [2] Иванов М. А., Погорелов Ю. Г. // ЖЭТФ. 1979. Т. 76. № 3. С. 1010—1022.
- [3] Иванов М. А., Погорелов Ю. Г. // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. № 5. С. 1738—1751.
- [4] Иванов М. А., Скрипник Ю. В. // ФНТ. 1990. Т. 16. № 9. С. 1171—1183.
- [5] Иванов М. А., Скрипник Ю. В. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 10. С. 2965—2970.
- [6] Гредескул С. А., Пастур Л. А. // ФНТ. 1975. Т. 1. № 3. С. 277—312.
- [7] Лифшиц И. М., Гредескул С. А., Пастур Л. А. Введение в теорию неупорядоченных систем. М., 1982. 360 с.
- [8] Гредескул С. А., Трифонов Н. Ю. // ФНТ. 1976. Т. 2. № 3. С. 362—365.

Институт металлофизики АН Украины
Киев

Поступило в Редакцию
25 февраля 1991 г.