

ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕОРИЯ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

В.Л.Бонч-Бруевич, И.П.Звягин, Р.Кайпер, А.Г.Миронов, Р.Эндерлайн, Б.-М.Эссер

Книга содержит изложение основных представлений современной теории неупорядоченных полупроводников. Подробно обсуждаются новые идеи, возникшие в связи с изучением движения частиц в случайных полях, характеристики которых заданы только статистически (идея о «самоусредняющихся» величинах, локализация электронов в случайных потенциальных ямах и другие). Выясняется, какие представления стандартной зонной теории сохраняют силу и в применении к неупорядоченным полупроводникам. Рассматриваются развитые в последнее десятилетие методы расчета энергетических, электрических и оптических характеристик неупорядоченных систем (в частности, метод оптимальной флуктуации, квазиклассическое приближение и теория протекания). Рассматриваются также приложения этих представлений для решения ряда задач кинетики и оптики неупорядоченных материалов (электропроводность и термоэдс в области прыжковой проводимости, междузонное поглощение света, комбинационное рассеяние света на электронах).

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	6
Глава I. Введение	9
§ 1. Определение неупорядоченной системы. Примеры	9
§ 2. Случайная сетка атомов	15
§ 3. Сводка некоторых экспериментальных данных	17
§ 4. Общие особенности неупорядоченных систем	24
§ 5. Плотность состояний (предварительные соображения)	28
§ 6*. Плотность состояний (строгое рассмотрение)	34
§ 7*. Самоусредняющиеся величины	41
Глава II. Энергетический спектр неупорядоченного полупроводника	44
§ 1. Спектр электронов (качественные соображения)	44
§ 2*. «Подводные камни»	53
§ 3. Андерсеновская локализация	57
§ 4. Спектр фононов (качественные соображения)	61
§ 5. Химические связи в неупорядоченных полупроводниках и модели плотности состояний	65
§ 6*. Неупорядоченный полупроводник без случайного поля	70
§ 7. Статистические характеристики случайного поля	73
§ 8. Собственное случайное поле в неупорядоченных полупроводниках	87
§ 9*. Теорема существования дискретных флуктуационных уровней в запрещенной зоне неупорядоченного полупроводника	98
§ 10*. Оценка концентрации флуктуационных уровней	109
§ 11. Радиус локализации. Степенная локализация	113
§ 12. Плавное искривление зон	116

§ 13*. Квазиоднородные системы	120
§ 14. Корреляционные эффекты	123
§ 15. Экситон в неупорядоченном полупроводнике	124
§ 16*. Кулоновская щель	129
§ 17*. Экранирование локализованными носителями заряда при наличии мягкой щели	136
§ 18*. Низкотемпературная термодинамика носителей заряда при наличии мягкой щели	140
§ 19. Термодинамика локализованных носителей заряда при наличии двухэлектронных уровней	145
Глава III. Плотность состояний и двухуровневая функция корреляции	152
§ 1. Введение	152
§ 2. Метод оптимальной флуктуации	154
§ 3. Функция корреляции уровней	160
§ 4*. Функция корреляции уровней электрона в гауссовом случайном поле	163
§ 5*. Представление функции Грина в виде континуального интеграла	169
§ 6*. Качественное исследование усредненной одночастичной функции Грина	173
§ 7*. Вычисление континуального интеграла для $G_T(t)$. Плотность состояний	180
Глава IV. Явления переноса	190
§ 1. Основные механизмы переноса	190
§ 2. Гамильтониан в λ -представлении	195
§ 3. Кинетическое уравнение	200
§ 4. Отклик системы на внешнее электрическое поле и градиент температуры	206
§ 5*. Плотность тока в λ -представлении	213
§ 6*. Метод функций Грина в теории прыжковой проводимости	220
§ 7*. Многофононные перескоки	223
§ 8. Общее обсуждение методов решения кинетического уравнения для локализованных электронов	228
§ 9*. Критерий связей	234
§ 10. Температурная зависимость прыжковой проводимости	240
§ 11. Бесфононная проводимость	245
§ 12. Температурная зависимость прыжковой термоэдс	249
§ 13*. Кинетическое уравнение при учете электрон-электронного взаимодействия	256
§ 14*. Учет динамической корреляции между электронами при расчете проводимости и термоэдс	267
§ 15. Проводимость неоднородных полупроводников с крупномасштабными флуктуациями потенциала	272

§ 16*. Критическое поведение в задачах протекания	278
Глава V. Междузонные оптические переходы в неупорядоченных полупроводниках	282
§ 1. Общие соотношения. Роль случайного поля	282
§ 2. Поглощение света в гладком гауссовом случайном поле	289
§ 3. Электропоглощение в гладком поле	297
§ 4. Поглощение в примесном случайном поле	305
§ 5*. Экситонное поглощение света в слабом случайном поле	310
§ 6*. Влияние экситонных эффектов на хвост коэффициента поглощения	314
Глава VI. Резонансное комбинационное рассеяние света в неупорядоченных полупроводниках	319
§ 1. Введение. Общее выражение для сечения рассеяния и конфигурационное усреднение	319
§ 2*. Влияние гладкого случайного поля на комбинационное рассеяние света при $l_c \ll \xi_0$	323
§ 3*. Влияние гладкого поля на комбинационное рассеяние в случае $l_c \gg \xi_0$	336
Приложения	344
I*. Теоремы о корреляции	344
II*. Поле упругих деформаций	350
III*. Характеристический функционал гауссова случайного поля	354
IV*. Непосредственный расчет бинарной корреляционной функции пуассоновского случайного поля	354
V*. Характеристический функционал лоренцева случайного поля	355
VI*. Вычисление интеграла, фигурирующего в формуле (II. 9.31)	356
VII*. Функции Грина в задаче с гамильтонианом (II.16.1') при $T = 0$	356
VIII*. Диагонализация формы $\delta^2 Q_p$	358
IX*. Вычисление величин $\Pi_{\perp}(\kappa)$ и $\Pi_{\parallel}(\kappa)$	361
X*. Поведение решения кинетического уравнения в области малых частот	364
XI. Некоторые результаты стандартной теории протекания	366
XII*. Квазиклассический расчет функции Грина для электрона в гладком гауссовом случайном поле	369
XIII*. Вычисление интеграла по ω' в формуле для $\varepsilon_2(\omega)$ (V.2.1)	374
XIV*. Квазиклассический расчет функции Грина для электрона в примесном случайном поле	375
XV*. Преобразование выражения (VI. 2.23)	378
Литература	381

В последние пятнадцать лет исследование электронных явлений в неупорядоченных системах — жидких и аморфных полупроводниках, сильно легированных полупроводниках, жидких металлах и т. д. — заняло одно из центральных мест в физике конденсированной среды. Оно обусловлено как возросшей практической важностью таких систем, так и внутренней логикой развития физики. Практическая сторона дела связана с рядом обстоятельств. Так, в стеклообразных и жидких полупроводниках наблюдается «эффект переключения» — резкий (за время $\sim 10^{-10}$ с) переход между состояниями сравнительно высокой и очень малой проводимости. Этот эффект привлекает к себе внимание в связи с рядом очевидных приложений. Сильно легированные полупроводники используются в качестве материалов для лазеров и для термоэлектрических устройств. Фотоэлектрические свойства неупорядоченных полупроводников (в частности, халькогенидных стекол) оказываются весьма нетривиальными и открывают довольно заманчивые перспективы приложений. Привлекательным кажется использование аморфного кремния в качестве материала для солнечных батарей. Кроме того, любые полупроводники, подвергнутые действию облучения, неизбежно становятся в какой-то мере разупорядоченными. Следовательно, физика радиационных повреждений в этом смысле составляет часть физики неупорядоченных систем.

С чисто принципиальной точки зрения исследование неупорядоченных полупроводников и металлов составляет логически неизбежное звено в цепочке «идеальный газ — идеальный кристалл — аморфное вещество или жидкость».

К настоящему времени, видимо, уже сложились некоторые представления об основных особенностях электронных процессов в неупорядоченных конденсированных системах, о структуре их энергетического спектра, о поглощении (и испускании) электромагнитных волн неупорядоченными полупроводниками и об основных закономерностях некоторых явлений переноса. Накопленный в этой области большой экспериментальный материал в известной мере удастся последовательно интерпретировать с единой точки зрения.

Переход от кристаллических веществ к материалам, в атомных структурах которых отсутствует дальний порядок, потребо-

вал отказа от использования ряда привычных представлений стандартной зонной теории твердого тела. Действительно, в отсутствие пространственной периодичности в расположении атомов вещества состояния с заданным квазимпульсом оказываются нестационарными, а такие понятия, как зона Бриллюэна, вообще лишаются точного смысла. Это потребовало довольно радикальной перестройки всего аппарата теории. Возникли, в сущности, совсем новые разделы теории конденсированной среды, связанные с необходимостью изучать поведение квазичастиц в системе, характеристики которой заданы только статистически. До сих пор эти вопросы рассматривались лишь в оригинальных статьях и обзорах, рассчитанных в основном на специалистов. Вместе с тем знакомство с ними сейчас представляется уже столь же необходимым, сколь и знакомство со стандартной зонной теорией кристаллов.

Цель этой книги состоит в изложении современной электронной теории неупорядоченных материалов на двух уровнях. Во-первых, имеются в виду студенты старших курсов физических, физико-технических и инженерно-физических специальностей, а также аспиранты, преподаватели и научные сотрудники — теоретики и экспериментаторы, знакомые с квантовой механикой и статистической физикой в объеме обычных университетских курсов. На них рассчитан основной материал книги. Во-вторых, имеются в виду лица, специализирующиеся по теории конденсированной среды и знакомые с аппаратом современной теории многих тел. Им в первую очередь адресованы параграфы и приложения, отмеченные звездочками.

Имея в виду учебные цели, мы ставили себе задачу изложить главным образом основные представления, идеи и методы теории, владея которыми можно самостоятельно изучать современную научную литературу. При этом, поскольку объем учебного пособия не должен быть чрезмерно велик, мы сочли целесообразным отказаться от рассмотрения многих достаточно интересных, но все же частных задач. Разумеется, при отборе материала, включенного в книгу, известную роль сыграли и научные взгляды и интересы авторов. Экспериментальные данные также привлекаются лишь в той мере, в какой они необходимы для постановки теоретических проблем и для проверки правильности выводов теории.

Лиц, желающих более подробно ознакомиться как с экспериментальными данными, так и с теоретической трактовкой многих конкретных вопросов, мы отсылаем к превосходной монографии лауреата Нобелевской премии Н. Мотта и Э. Дэвиса «Электронные процессы в некристаллических веществах» (пер. с англ. под ред. Б. Т. Коломийца, Мир, М., 1974).

Как правило, мы пользуемся гауссовой системой единиц. Температура выражается в энергетических единицах, а через e обозначена абсолютная величина заряда электрона. Компоненты векторов обозначаются латинскими или греческими индексами. Формулы нумеруются отдельно в пределах каждого параграфа. Ссылки в пределах данной главы даются без указания ее номера, в ссылках на формулы других глав римской цифрой указывается номер главы, ссылки в основном тексте на формулы приложений содержат в начале букву П.

Первая и вторая главы написаны В. Л. Бонч-Бруевичем, третья — А. Г. Мироновым, четвертая — И. П. Звягиным и Р. Кайпером, пятая — В. Л. Бонч-Бруевичем и Б. Эссером, шестая — Р. Эндерлайном и Б. Эссером. Весь текст, однако, обсуждался всеми авторами, и все они несут ответственность за книгу в целом. Окончательная редакция русского текста была выполнена В. Л. Бонч-Бруевичем, И. П. Звягиным и А. Г. Мироновым.

Эта книга возникла на основе лекций, в разное время читанных некоторыми из авторов в Московском университете, Берлинском университете им. Гумбольдта, Гёттингенском, Софийском, Гаванском, Вильнюсском, Киевском, Тбилисском и Ужгородском университетах, а также в Уральской зимней школе физиков-теоретиков («Коуровка») и в школе молодых ученых Института физики полупроводников ЛитССР (Биркстонас). Мы весьма признательны указанным университетам и организаторам школ за гостеприимство.

Как во время работы над книгой, так и ранее мы неоднократно имели возможность обсуждать проблемы теории неупорядоченных систем с рядом наших коллег. Нам особенно приятно вспомнить исключительно полезные и интересные дискуссии с И. М. Лифшицем, Н. Ф. Моттом и Л. А. Пастуром. Мы очень признательны М. А. Кривоглазу, прочитавшему книгу в рукописи и сделавшему ряд важных замечаний. Мы благодарны нашим сотрудникам Ф. Бехштедту, Е. В. Бурцеву, П. Г. Жуматию, В. Д. Искре, П. Кляйнерту, Э. О. Манучарянц, К. Пойкеру, В. А. Федирко, Е. Г. Цицишвили, Р. Шухардту. Они были авторами и соавторами ряда работ, использованных при написании книги.

Мы также благодарны А. К. Куприяновой за большую помощь при подготовке рукописи к печати.

Май 1978 г.

Авторы

ВВЕДЕНИЕ

§ 1. Определение неупорядоченной системы. Примеры

Макроскопическая система частиц называется неупорядоченной, если в расположении частиц отсутствует дальний порядок (ближний порядок может сохраняться). Тривиальным примером такой системы служит газ. Нас, однако, будут интересовать конденсированные тела (в дальнейшем эта оговорка всегда будет подразумеваться).

Как известно, при наличии дальнего порядка (периодичности) в расположении атомов потенциальная энергия носителя заряда в суммарном поле атомов оказывается периодической функцией координат. Нарушения дальнего порядка приводят к нарушению этой периодичности. Можем сказать, таким образом, что неупорядоченными называются конденсированные макроскопические системы, в которых потенциальная энергия носителя заряда есть непериодическая функция координат.

Отметим, что системы указанного типа, как правило, не находятся в термодинамическом равновесии: минимуму свободной энергии при $T \rightarrow 0$ отвечало бы упорядоченное распределение атомов (исключение составляет только жидкий гелий при не слишком высоких давлениях). Однако соответствующие времена установления равновесия могут измеряться многими годами. По этой причине имеет смысл рассматривать состояния неполного равновесия, в которых атомная структура метастабильна, а о равновесии говорят лишь применительно к элементарным возбуждениям того или иного типа — электронам проводимости и дыркам, фононам и т. д.

Данное выше определение — очень емкое. В сущности, оно охватывает все объекты, кроме идеальных кристаллов. В ряде случаев, однако, роль нарушений дальнего порядка довольно мала. Так обстоит дело в полупроводниках со сравнительно небольшой концентрацией примеси и в большинстве металлов. Необходимый критерий «малости» состоит в том, что изменение средней энергии носителя заряда ΔE , связанное с нарушениями дальнего порядка, должно быть мало по сравнению с самой этой энергией. В металлах последняя — порядка энергии Ферми F , в невырожденных полупроводниках — порядка T (T — абсолютная

температура в энергетических единицах). С другой стороны, значение ΔE , обусловленное взаимодействием электронов с атомами заряженной примеси, убывает с уменьшением ее концентрации. Следовательно, заведомо существует область, в которой

$$\Delta E \ll F \quad (1.1a)$$

или

$$\Delta E \ll T. \quad (1.1b)$$

При выполнении неравенств (1.1a) и (1.1b) влиянием нарушений дальнего порядка на энергетический спектр свободных электронов и дырок можно пренебречь. Роль нарушений дальнего порядка сводится при этом только: а) к рассеянию свободно движущихся носителей заряда (т. е. к созданию конечного электрического сопротивления вещества), б) к возможному образованию «примесной» области спектра — локальных электронных (дырочных) уровней, связанных с атомами примеси, или примесных зон.

Удобно несколько сузить данное выше определение, не включая указанные только что системы в число неупорядоченных. Тем не менее типы последних оказываются довольно разнообразными. Отметим основные из них.

1) *Жидкости*. Нарушения дальнего порядка здесь обусловлены тепловым движением атомов и молекул. Заметим, что эти отклонения, будучи связаны со случайностями теплового движения, носят нерегулярный характер. Как обычно в теории жидкостей, их удобно описывать статистическим путем.

2) *Аморфные и стеклообразные вещества*. Нарушения дальнего порядка здесь носят в основном «биографический» характер: они могут быть обусловлены как специальным типом структуры (см. ниже, § 2), так и пространственными флуктуациями в расположении атомов, возникшими в процессе приготовления материала. Заметим, что эти нарушения могут быть различны — и притом статистически различны — в разных частях образца. Как и в случае жидкости, их следует описывать статистическим путем.

3) *Сильно легированные полупроводники*. Нарушения дальнего порядка обусловлены хаотическим расположением примесных атомов, причем критерий (1.1a) (или (1.1b)) не выполняется. Заметим, что разность между полной потенциальной энергией носителя заряда и ее значением в беспримесном кристалле определяется здесь координатами всех атомов примеси. Очевидно, эта величина, по сути дела, случайная, и описывать ее можно только статистически.

4) *Поверхность полупроводника* (даже близкого к идеальному в объеме). Нарушения дальнего порядка связаны здесь как с возможными структурными дефектами самой поверхности,

так и с беспорядочно расположенными на ней адсорбированными атомами или молекулами. В известном смысле это есть двумерный аналог сильно легированного полупроводника. Замечание о случайном характере потенциальной энергии носителя заряда в полной мере справедливо и здесь.

5) *Неупорядоченные сплавы — металлические и полупроводниковые.* В этом случае нарушения дальнего порядка обусловлены тем, что с конечной вероятностью в данном узле решетки окажется атом любой из компонент сплава. По самой сути дела этот эффект можно описывать только статистическим путем.

6) *Кристаллы, в элементарных ячейках которых имеется больше мест, нежели атомов* (например, бор). Нарушения дальнего порядка связаны с вероятностным характером распределения атомов по узлам ячейки. По этой причине потенциальная энергия носителя заряда здесь, как и в предыдущих примерах, оказывается случайной функцией координат.

7) *Кристаллы с большими значениями максвелловского времени релаксации.* Нарушения дальнего порядка в этих веществах обусловлены электрическим полем флуктуационного происхождения. Как известно, в условиях термодинамического равновесия длинноволновые флуктуации объемной плотности заряда и напряженности электрического поля экспоненциально затухают со временем, причем характерная константа затухания (максвелловское время релаксации) дается выражением

$$\tau_M = \frac{\epsilon}{4\pi\sigma_1}. \quad (1.2)$$

Здесь ϵ и σ_1 суть, соответственно, вещественные части диэлектрической проницаемости и электропроводности образца на частоте $\sim \tau_M^{-1}$ (мы ограничиваемся для простоты кубическими кристаллами, когда величины ϵ и σ_1 суть скаляры). Может случиться, что время τ_M значительно превосходит характерное время, фигурирующее в той или иной задаче (так, при изучении движения свободных носителей заряда это есть время свободного пробега). Тогда флуктуационное поле можно рассматривать как статическое, и мы приходим к системе, неупорядоченной в указанном выше смысле. Заметим, что — по самой сути дела — вид потенциальной энергии носителя заряда во флуктуационном поле задается только статистическим путем.

8) *Кристаллы, в которых происходит усиление низкочастотных звуковых волн с беспорядочными амплитудами и фазами.* Нарушения дальнего порядка здесь обусловлены взаимодействием носителей заряда со звуком. В гомеоплярных кристаллах, равно как и в ряде не вполне полярных соединений (типа $A^{III}B^V$ и др.), энергия взаимодействия электронов с фононами в условиях, близких к термодинамическому равновесию, в среднем

невелика [1]. Хорошо известно, однако [2], что при пропускании через образец достаточно сильного электрического тока может иметь место усиление звука электронным потоком. Это относится не только к звуковому сигналу, введенному извне, но и к «шуму» — набору звуковых волн с беспорядочными амплитудами и фазами, — существующему во всяком образце даже в условиях равновесия. Коэффициент усиления оказывается различным для волн различной частоты; при заданной дрейфовой скорости электронов он достигает максимума на частоте

$$\omega_{\max} \approx s/r_0, \quad (1.3)$$

где s — скорость звука, $r_0 = (\epsilon T/4\pi n e^2)^{1/2}$ — дебаевский радиус, n — концентрация носителей заряда, образующих невырожденный газ. В дальнейшем нас будут интересовать условия, когда частота ω_{\max} и соответствующее волновое число q_{\max} удовлетворяют неравенствам

$$\omega_{\max}\tau \ll 1, \quad q_{\max}l \ll 1, \quad (1.4)$$

где τ и l суть время и длина свободного пробега носителей заряда соответственно.

Тогда ширина максимума оказывается порядка самой частоты ω_{\max} , т. е. (с учетом (1.4)) максимум следует рассматривать как довольно острый. В указанных условиях электроны эффективно взаимодействуют лишь со звуковыми колебаниями, волновые числа которых лежат в пределах

$$q_{\max} - \frac{\Delta q}{2} \ll q \ll q_{\max} + \frac{\Delta q}{2}, \quad (1.5)$$

где $\Delta q \sim \omega_{\max}/s$.

В силу (1.4) энергию этого взаимодействия можно рассматривать как потенциальную энергию носителей заряда в классическом внешнем поле, зависящем от координат \mathbf{r} и времени t :

$$U(\mathbf{r}, t) = \sum_q c_q \cos(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega t + \varphi_q). \quad (1.6)$$

Здесь амплитуды c_q и фазы φ_q суть случайные величины.

По определению $l = v_T\tau$, где v_T — тепловая скорость носителя заряда. Соответственно второе из условий (1.4) можно переписать в виде

$$\frac{v_T}{s} \omega_{\max}\tau \ll 1. \quad (1.4')$$

Обычно $v_T \gg s$. По этой причине в ряде задач можно пренебречь слагаемым ωt в аргументе косинуса в формуле (1.6), сохраняя вместе с тем слагаемое $\mathbf{q}\mathbf{r}$. При этом функция U перестает зависеть от времени t , и мы вновь приходим к данному выше опреде-

лению неупорядоченной системы. Вновь, как и в предыдущих примерах, функцию $U(\mathbf{r})$ можно характеризовать только статистическим путем — на сей раз из-за случайного характера амплитуд c_q и фаз φ_q .

Таким образом, в ряде физически интересных неупорядоченных систем отклонения силового поля от периодического оказываются различными — и притом случайно различными — в разных точках образца: потенциальная энергия электронов содержит слагаемое, хаотически изменяющееся в пространстве. Иначе говоря, она представляет собой случайную функцию координат. Соответственно мы приходим к представлению о силовом поле, характеристики которого можно задавать только статистически. Такое поле называется случайным. Наличие его составляет едва ли не самую характерную черту многих неупорядоченных систем.

Подчеркнем, однако, что случайные вариации в расположении атомов вещества не обязательно влекут за собой появление заметного случайного слагаемого в потенциальной энергии носителя заряда. Суть дела проще всего понять на примере материала, содержащего некоторые хаотически расположенные в пространстве точечные дефекты структуры (в частности, это могут быть и атомы примеси) [3]. Потенциальную энергию электрона V в поле, созданном такими дефектами, можно записать в виде

$$V(\mathbf{r}) = \sum_i v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i).$$

Здесь $v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ есть потенциальная энергия электрона в поле отдельного точечного дефекта, расположенного в точке \mathbf{R}_i ; индекс i нумерует дефекты. В силу случайности координат дефектов \mathbf{R}_i величина $V(\mathbf{r})$ есть формально случайная функция. На поведении электронов это, однако, не всегда сказывается. В самом деле, обозначим концентрацию дефектов через n_i , а радиус действия связанных с ними сил — через r_0 (в случае заряженных примесей это есть обычный радиус экранирования). Пусть, далее, характерная длина волны де Бройля свободных электронов (или других квазичастиц) есть λ , а радиус локализации электрона, занимающего дискретный примесный уровень, — γ^{-1} . Как видно из рис. 1, ситуация оказывается существенно разной в зависимости от соотношения между наибольшей из величин λ , γ^{-1} и r_0 и средним расстоянием между дефектами $n_i^{-1/3}$. Именно, предположим сначала, что

$$n_i^{-1/3} \gg \max \{r_0, \gamma^{-1}, \lambda\}. \quad (1.7a)$$

Тогда (см. рис. 1, *a*) при вычислении электронных характеристик системы в сумме по i фактически остается только одно

слагаемое — электрон в каждый данный момент эффективно взаимодействует с одним, ближайшим к нему, дефектом. По этой причине энергия электрона вблизи данного дефекта никак не зависит от пространственного расположения (конфигурации) всех остальных — потенциальная энергия электрона фактически оказывается не случайной, несмотря на наличие случайных элементов структуры.

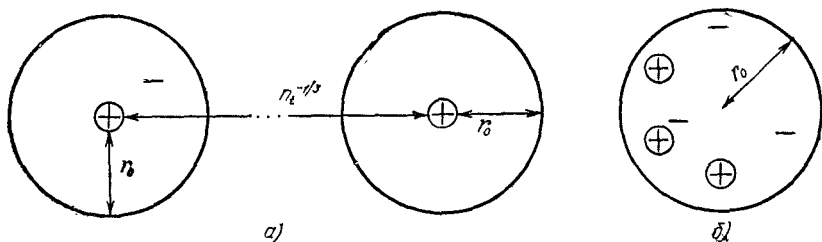


Рис. 1. К классификации случайных полей в неупорядоченных материалах: а) $n_i^{-1/3} \gg \max\{r_0, \gamma^{-1}, \lambda\}$; б) $n_i^{-1/3} \leq \max\{r_0, \gamma^{-1}, \lambda\}$.

Пусть теперь выполняется неравенство, обратное (1.7а):

$$n_i^{-1/3} \leq \max\{r_0, \gamma^{-1}, \lambda\}. \quad (1.7б)$$

Тогда (см. рис. 1, б) электрон взаимодействует одновременно сразу с несколькими дефектами структуры и потенциальная энергия его зависит от конфигурации всех дефектов. Тем самым она оказывается случайной функцией координат.

О неравенстве (1.7б) иногда говорят как об условии «перекрывания» полей, создаваемых отдельными случайными элементами структуры, причем эти поля сами по себе не случайны (все атомы примеси одинаковы). Очевидно, термин «перекрывание» имеет буквальный смысл, лишь если $r_0 > \lambda$. Все же его — ввиду наглядности — удобно употреблять.

Условие (1.7б), по сути дела, не связано с рассмотренной выше конкретной системой, а носит общий характер: если потенциальная энергия носителя заряда в поле отдельного элемента структуры не случайна, то случайное поле возникает лишь при «перекрывании» (в указанном выше смысле) силовых полей, создаваемых отдельными случайно расположенными элементами структуры.

В связи с этим важно заметить, что в гомеоплярном веществе силы взаимодействия электронов с атомами — короткодействующие. По этой причине главную роль в определении потенциальной энергии электрона играет локальная конфигурация

атомов*). Если еще при этом структура вещества такова, что в расположении атомов имеется ближний порядок, то случайный элемент в потенциальной энергии будет обусловлен лишь сравнительно слабыми далекими взаимодействиями. О таких объектах мы будем говорить как о материалах без случайного поля.

Во избежание недоразумений подчеркнем еще раз, что, строго говоря, случайное поле в неупорядоченной системе атомов присутствует всегда. Его роль, однако, может оказаться существенной или несущественной в зависимости как от природы вещества, так и от рассматриваемой задачи. В дальнейшем мы будем интересоваться в основном задачами первого типа.

§ 2. Случайная сетка атомов

Сведения об атомной структуре жидких и аморфных веществ обычно извлекают из опытов по дифракции рентгеновских лучей и электронов, а также из оптических данных, относящихся к поглощению инфракрасного излучения и к комбинационному рассеянию света.

Основной объект исследования здесь составляет радиальная функция распределения атомов $g(r)$ [4]. Она пропорциональна вероятности найти какой-либо атом на расстоянии r от данного (естественно, функция g зависит и от сорта атомов). Резкие пики функции $g(r)$ отвечают координационным сферам.

Характер получающихся результатов удобно иллюстрировать на примере аморфного кремния. В табл. I (С. К. Мосс и Дж. Ф. Грачик, 1970) приведены результаты исследования радиальной функции распределения в кремнии (методом дифракции электронов). Индекс $i = 1, 2$ там нумерует первую и вторую координационные сферы, z_i суть числа атомов в данной сфере, т. е. координационные числа (определяемые по площади пика), r_i — среднее расстояние между данным и центральным атомами в ангстремах («радиус» i -й координационной сферы),

Таблица I

Аморфный кремний				Кристаллический кремний		
i	z_i	r_i	μ_i^2	z_i	r_i	μ_i^2
1	$4,0 \pm 0,1$	2,35	0,014	4	2,35	0,010
2	$11,6 \pm 0,5$	3,86	0,051	12	3,85	0,020

*) В сущности, эта идея давно уже высказывалась А. Ф. Иоффе и А. Р. Регелем.

μ_i^2 — средний квадрат отклонения атома i -й координационной сферы от среднего его положения.

Видим, что первая координационная сфера в аморфном кремнии остается практически такой же как и в кристаллическом. Вторая координационная сфера определена менее четко: значения μ_2^2 в аморфном материале заметно больше, чем в кристаллическом.

Третьей координационной сферы в аморфном кремнии практически не видно: там, где у кристаллического материала имеется соответствующий пик функции $g(r)$, у аморфного наблюдается небольшой провал, сопровождаемый очень слабо выраженным максимумом. Иначе говоря, структура аморфного кремния характеризуется строгим ближним порядком, который, однако, ограничен минимально возможной областью пространства — первой координационной сферой.

Отсутствие дальнего порядка может быть обусловлено рядом факторов.

Прежде всего, при сохранении всех насыщенных связей возможны случайные искажения их длин и углов между ними, которые, постепенно накапливаясь, приводят к исчезновению дальнего порядка и к возникновению трехмерной случайной сетки атомов*). При этом, например, в тетраэдрической структуре каждый атом по-прежнему расположен в центре тетраэдра, деформированного случайным образом. Топология такой структуры совпадает с топологией идеального кристалла, а отсутствие дальнего порядка связано с непрерывной деформацией связей.

В структурах с тетраэдрической координацией, где плотность упаковки не слишком велика, отсутствие дальнего порядка может быть связано со случайностью относительного расположения тетраэдров, отличающегося от правильного их расположения в кристаллах. Дальний порядок в такой сетке отсутствует, и его нельзя восстановить никаким изменением длин связей или углов между ними. По этой причине такой тип беспорядка называют топологическим (Дж. М. Займан, 1970). Случайными оказываются здесь свойства связности структуры.

Наличие топологического беспорядка расширяет возможности возникновения различных элементов структуры. Так, в кристаллической решетке типа алмаза замкнутые кольца связей можно составить не менее чем из шести звеньев. В то же время при топологическом ее разупорядочении становится возможным и появление пятичленных колец.

Далее, исчезновение дальнего порядка может быть связано с разрывами связей, а также с нарушениями порядка, обуслов-

*) Представление о случайной сетке было введено У. Х. Захариасеном еще в 1932 г. в связи с исследованием структуры стекол.

ленными случайными флуктуациями состава (композиционный беспорядок) и структуры. Это особенно существенно для аморфных соединений. Однако и здесь, видимо, имеет место сохранение ближнего порядка при полном отсутствии дальнего. При этом, как и в случае аморфного германия и кремния, образуются случайные сетки атомов, но не обязательно трехмерные: для элементов шестой группы характерны одномерные сетки (цепочки), для соединений элементов пятой и шестой групп — двумерные.

Экспериментально, по-видимому, не всегда легко определить, с каким именно фактором связано отсутствие дальнего порядка, поскольку радиальные функции распределения для всех указанных выше случаев могут быть близкими. Однако можно ожидать, что в этих случаях электронные свойства будут заметно различаться. Действительно, факт сохранения ближнего порядка позволяет думать, что в основе построения энергетически наиболее выгодных неупорядоченных структур лежит некоторый общий принцип. Он состоит в условии полного локального насыщения валентных связей (Н. Ф. Мотт, 1969). Принцип этот, однако, не универсален (см. ниже, § II. 5).

Материал, в котором он удовлетворяется, часто называют идеальным стеклом. Заметим, однако, что получить идеальное стекло, вероятно, немногим легче, чем идеальный кристалл. Фактически в зависимости от условий приготовления образца структура его более или менее отличается от идеальной, содержа дефекты разного рода — до макроскопических полостей включительно. Со многими дефектами может быть связано появление ненасыщенных («болтающихся») валентных связей.

Для халькогенидных стекол характерна цепочно-слоистая структура, иллюстрируемая рис. 2. По этой причине указанные материалы часто называют неорганическими полимерами.

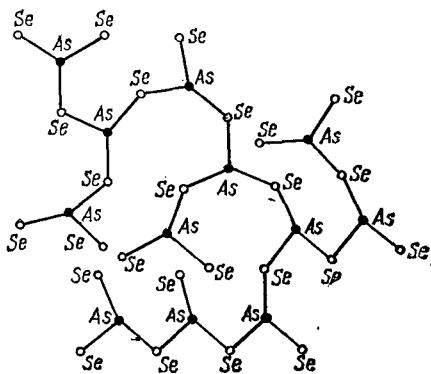


Рис. 2. Двумерный полимерный каркас As_2Se_3 (схематически).

§ 3. Сводка некоторых экспериментальных данных

Число экспериментальных работ, посвященных измерению электрических, оптических и других характеристик неупорядоченных полупроводников, в настоящее время измеряется сот-

ниями. Мы ограничимся лишь сводкой некоторых важнейших результатов, необходимых для дальнейшего. Использованный в тексте материал взят главным образом из книги [5], обзоров [6—12] и цитированных там статей. При этом мы будем интересоваться в основном качественными закономерностями, справедливыми для ряда веществ.

I. Оптические свойства. Рассматривая спектры поглощения аморфных полупроводников, удобно сравнивать их со спектрами тех же материалов в кристаллическом состоянии (это возможно, например, в случаях германия, соединений типа $A^{III}B^V$, селена и теллура). При этом четко выделяются следующие группы фактов.

1) Стандартное в физике кристаллических полупроводников представление о междузонных переходах и о запрещенной энергетической зоне в известной мере остается в силе и здесь: коэффициент поглощения $\alpha(\omega)$ заметно падает при некоторой пороговой частоте ω_0 , близкой к красной границе междузонного поглощения света в чистом материале. При этом в зависимости от способа приготовления материала (например, пленки) наблюдаются, видимо, два типа поведения:

А) Коэффициент поглощения резко обрывается на пороге, обращаясь практически в нуль при $\omega < \omega_0$ (резкий край зоны).

Б) Коэффициент поглощения лишь уменьшается при $\omega < \omega_0$, оставаясь все же конечным и в области меньших частот (оптический «хвост»).

В кремнии в результате достаточно длительной термообработки тип Б) сменяется типом А) (Д. Т. Пирс, У. Э. Спайсер, 1972). Того же можно добиться, легируя кремний (или германий) водородом; при этом, однако, появляется поглощение в далекой инфракрасной области.

2) Частотная зависимость коэффициента поглощения в области хвоста ($\omega < \omega_0$) хорошо описывается формулой

$$\alpha(\omega) \sim \exp \left\{ - \frac{\hbar(\omega_0 - \omega)}{\bar{E}} \right\}, \quad (3.1)$$

где \bar{E} — некоторая характерная энергия.

Зависимость вида (3.1) давно уже наблюдалась в ионных кристаллах (Ф. Урбах, 1953) и получила наименование правила Урбаха. Энергия \bar{E} в них пропорциональна температуре:

$$\bar{E} = cT, \quad (3.2)$$

где c — постоянная.

Аналогичная зависимость наблюдается и в сильно легированных полупроводниках, однако соотношение (3.2) остается там справедливым лишь при достаточно высоких температурах (в легированном арсениде галлия — при $T \gtrsim 100$ К). При более

низких температурах величина \bar{E} перестает зависеть от T , но зависит от концентрации примеси n_i , возрастая вместе с ней. Обработка экспериментальных данных для соединений типа $A^{III}B^V$ (Х. Р. Виттман, 1969) привела к эмпирической формуле

$$\bar{E} \sim n_i^{0,39}. \quad (3.3)$$

Степень точности, с какой выполняется эта формула, не вполне ясна. Мы увидим, однако (гл. V), что ей может быть дана известная теоретическая интерпретация.

Зависимость, близкая к (3.1) (с характерной энергией (3.2)), была объяснена в рамках представления о многофононных переходах, сопровождающих акт поглощения фотона (А. С. Давыдов, 1968). При этом недостаток энергии фотона (при $\omega < \omega_0$) покрывается за счет энергии фононов, а явный вид функции $\alpha(\omega)$ оказывается связанным просто с вероятностью одновременного поглощения должного числа фононов*). Очевидно, однако, что при низких температурах этот эффект должен исчезнуть, что и наблюдается фактически: температурная зависимость \bar{E} исчезает. В дальнейшем мы будем интересоваться лишь случаем низких температур, когда соотношение (3.2) уже не имеет места. Видимо, именно этот случай представляет интерес для многих неупорядоченных полупроводников.

3) При наложении однородного электрического поля напряженности \mathcal{E} относительное изменение коэффициента поглощения имеет вид (Т. Ф. Мазец, С. И. Павлов, 1976; Р. С. Зусман, Дж. Дж. Остин, Г. М. Сирл, 1976)

$$\frac{\Delta\alpha}{\alpha} = \gamma \mathcal{E}^2 f(\omega_0 - \omega). \quad (3.4)$$

Здесь γ — постоянная, а функция $f(\omega_0 - \omega)$ положительна и отлична от нуля в области оптического хвоста (3.1). Функция $f(\omega_0 - \omega)$ при увеличении разности $\omega_0 - \omega$ сперва растет по степенному закону $f(\omega_0 - \omega) \sim (\omega_0 - \omega)^n$ (в случае As_2Se_3 получено $0,4 \leq n \leq 1,3$ в зависимости от содержания добавок сурьмы или теллура), а глубже в запрещенной зоне приближается к постоянной или уменьшается ($n < 0$).

4) В области частот, превышающих пороговую, частотная зависимость коэффициента поглощения часто укладывается в простую формулу (Я. Тауц, К. Григоровичи, А. Ванку, 1966):

$$\alpha(\omega) \sim \frac{(\omega - \omega_0)^2}{\omega}. \quad (3.5)$$

*) Строго говоря, соответствующий расчет дает зависимость вида $\alpha \sim \exp \left\{ - \frac{\hbar(\omega - \omega_0)}{c_1 T} \left| \ln \left(\frac{\omega_0 - \omega}{c_2 T} \right) \right| \right\}$; c_1 и c_2 — постоянные. Это различие, однако, представляется малоощутимым.

При этом пики, отвечающие особым точкам Ван Хова, обычно «размываются», иногда полностью исчезая. Степень размытия оказывается различной для различных кристаллографических направлений.

5) Исследование энергетического распределения фотоэлектронов, эмиттированных при внешнем фотоэффекте из аморфных пленок, привело к тем же качественным выводам, что и в случае спектров поглощения: здесь также наблюдаются два отмеченных выше типа поведения, т. е. в зависимости от способа приготовления образца имеется либо резкая граница, разделяющая области разрешенных и запрещенных значений энергии, либо сравнительно плавный переход от области с большим к области с малым числом дозволенных состояний («хвост»).

6) Экситонные линии поглощения в аморфных полупроводниках, как правило, непосредственно не наблюдаются. С другой стороны, анализ спектральной зависимости квантового выхода внутреннего фотоэффекта в аморфном аналоге моноклинного селена (Ю. А. Черкасов, 1976) приводит к выводу об экситонном характере поглощения света в этом материале. Далее, в спектре фотолюминесценции аморфного селена наблюдалась довольно широкая (0,23 эВ) полоса, интерпретируемая как результат излучения при аннигиляции экситонов Френкеля. При этом энергия связи электрона и дырки в экситоне (энергия ионизации) была порядка 0,3 эВ. Гипотеза о существовании экситонов Френкеля в аморфном селене высказывалась также Г. Вайзером и И. Штуке (1969).

II. Электрические свойства. Здесь выделяются следующие группы фактов.

1) Температурная зависимость статической электропроводности неупорядоченных полупроводников в довольно широком интервале температур описывается стандартным выражением

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-\epsilon/T). \quad (3.6)$$

Здесь σ_0 — сравнительно медленно изменяющаяся функция температуры, ϵ — практически постоянная энергия активации. Зависимость (3.6) остается в силе при температурах значительно более низких, чем можно было бы ожидать, судя по значениям энергии активации. Так, в аморфном германии соответствующая температурная область простирается примерно до 250 К ($2\epsilon = 1,1$ эВ), в аморфном As_2Se_3 — примерно до 270 К ($2\epsilon = 2,0$ эВ).

Измерения дрейфовой подвижности показывают, что, как и в собственных кристаллических полупроводниках, зависимость (3.6) следует отнести на счет концентрации носителей заряда.

2) В ряде неупорядоченных материалов (аморфные германий и кремний, сильно легированный компенсированный анти-

монид индия, n -CdTe и др.) зависимость (3.6) при понижении температуры сменяется не степенным законом (характерным для кристаллических полупроводников в области истощения примесей), а принимает более сложный вид. Довольно часто она удовлетворительно описывается формулой Мотта (1969)*

$$\sigma = B \exp[-(T_0/T)^{1/4}], \quad (3.7)$$

где B — величина, сравнительно слабо зависящая от температуры, T_0 — постоянная (в температурных единицах это есть величина порядка 10^8 К (в Ge) или 10^6 К (в InSb)).

Зависимость (3.7), однако, не носит универсального характера. Так, в халькогенидных стеклах она, как правило, не наблюдается.

При дальнейшем понижении температуры (до гелиевой области) зависимость (3.7) в сильно легированном компенсированном антимиониде индия заметно ослабляется, сменяясь линейной (примерно до 1,2 К) и, при еще более низких температурах, функцией вида $\sigma \sim T^n$ с $n \sim 2 \div 3$. При наложении магнитного поля вновь восстанавливается зависимость (3.7) (Е. М. Гершензон и др., 1975).

3) Измерения вещественной части проводимости на переменном токе показывают, что в области температур, где справедлива формула (3.7), $\sigma_1 = \text{Re} \sigma(\omega)$ возрастает с увеличением частоты ω . Именно, экспериментальные данные часто описываются формулой

$$\sigma_1 \sim \omega^s; \quad (3.8)$$

параметр s часто близок к 0,8.

В ряде неупорядоченных полупроводников энергия активации ϵ в известной мере управляется примесями. Так, в стеклообразных селениде и сульфиде мышьяка величина ϵ уменьшается при введении примесей серебра и (в As_2Se_3) меди, индия, таллия. При этом относительное изменение ϵ составляет, в зависимости от природы материала и примеси, от 16 до 51% при изменении концентрации примеси от 0,5 до 25 ат. процентов. Эти вариации ϵ существенно меньше, нежели в обычных кристаллических полупроводниках, но все же они ощутимы. С другой стороны, аморфный кремний в присутствии водорода удается легировать бором и/или фосфором в привычных для физики полупроводников концентрациях, получая, как и в случае кристаллического кремния, материал соответственно p - и n -типа. Роль водорода выяснится позднее, в § II. 3.

*) Следует заметить, однако, что зависимость (3.7) экспериментально установлена, видимо, менее надежно, чем (3.6).

Величины B и T_0 , фигурирующие в формуле (3.7), по-видимому, также зависят от состава и концентрации примеси. В ряде материалов (InSb, Ge, Te, Se, As_2Se_3) величина σ_0 , измеряемая при достаточно высоких температурах ($\epsilon/T < 1$), не сильно зависит от состава; более того, она оказывается примерно одинаковой ($10^3 \div 10^4 \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$) для всех этих веществ. Эта ситуация, однако, не универсальна. Так, в аморфном кремнии дело обстоит иначе (У. Э. Спир, П. Дж. Ле Комбер, 1976).

4) В области применимости соотношения (3.6) термоэдс многих материалов (As_2Se_3 , Se, Te и др.) уменьшается с повышением температуры; знак ее в указанных материалах положителен. При этом постоянная Холла, как правило, отрицательна, но возможна и обратная ситуация; в аморфном As постоянная Холла положительна, а термоэдс отрицательна. Как известно, в обычных кристаллических полупроводниках знаки термоэдс и постоянной Холла одинаковы и однозначно определяют знак заряда основных носителей. Отмеченная для некристаллических твердых тел аномалия знаков термоэдс и постоянной Холла свидетельствует о недопустимости автоматического перенесения на неупорядоченные системы представлений, заимствованных из классической зонной теории. Заметим, что названная аномалия знаков до сих пор не нашла окончательного теоретического объяснения, хотя отдельные работы в этом направлении имеются (Л. Фридман, 1971).

5) Поверхностный потенциал неупорядоченного полупроводника лишь с большим трудом удается слегка изменять с помощью эффекта поля или путем вариации состава и концентрации адсорбированных атомов. Не удается также сколько-нибудь заметно изменять барьерную емкость на контакте, меняя изгиб зон (Г. Фриче, 1970).

6) Имеет место явление фотопроводимости. Спад ее со временем в халькогенидных стеклах характеризуется наличием весьма длинных «хвостов»; при этом характерное время спада фотопроводимости заметно зависит от длины волны возбуждающего света.

Результаты, изложенные в п. 1), в сочетании с оптическими данными приводят к выводу о существовании в неупорядоченных полупроводниках разрешенных и запрещенных участков энергетического спектра — разрешенных и запрещенных зон. Однако наличие большого числа материалов типа Б) (стр. 18) означает, что это деление еще не исчерпывает всей картины энергетического спектра: приходится сделать вывод о существовании каких-то дозволённых состояний в запрещенной зоне. В известном смысле они должны быть подобны обычным локальным уровням в кристаллических полупроводниках: и те и другие влияют на положение уровня Ферми и участвуют в опти-

ческих переходах. Однако, в отличие от случая хороших кристаллических полупроводников, уровни, расположенные в запрещенной зоне неупорядоченного материала, могут быть обусловлены не только атомами посторонней примеси, но и другими факторами, связанными со структурой самого материала. В противном случае положение уровня Ферми, а с ним и значение энергии активации ϵ , было бы значительно более чувствительно к легированию образца микропримесями. Экспериментальные данные пп. 3) — 5) заставляют считать, что уровень Ферми в рассматриваемых материалах располагается где-то вблизи середины запрещенной зоны и смещается при указанных выше внешних воздействиях заметно слабее, нежели в хороших полупроводниковых монокристаллах. Соответственно проводимость, температурная зависимость которой изображается формулой (3.6), следует, видимо, интерпретировать как собственную. По этой причине о рассмотренной только что картине энергетического спектра говорят как о модели «собственного полупроводника» *).

С представлением о разрешенных уровнях рассмотренного выше типа согласуются и данные п. 3). Действительно, указанный там характер частотной зависимости $\text{Re}\sigma(\omega)$ (см. (3.8)) наводит на мысль, что мы имеем дело с прыжковой проводимостью того же типа, что и проводимость по примесным уровням, наблюдаемая при низких температурах в кристаллических полупроводниках **).

Изучение спектра и концентрации уровней, расположенных в запрещенной зоне неупорядоченного полупроводника, составило в последние годы предмет многих экспериментальных исследований. Отметим здесь следующие группы фактов.

7) Исследование кинетики фотопроводимости и токов, ограниченных пространственным зарядом, показывает, что уровни в запрещенной зоне неупорядоченного полупроводника распределены в довольно широком интервале энергий.

8) Опыты, указанные в п. 7), а также измерения термостимулированной проводимости и прыжковой проводимости на переменном токе позволяют оценить концентрацию уровней в запрещенной зоне. Меняясь от материала к материалу и от образца к образцу, она часто оказывается довольно большой — порядка 10^{19} см⁻³ и выше. По-видимому, так обстоит дело во многих материалах типа Б).

9) Концентрацию электронов с неспаренными спинами в запрещенной зоне можно оценить по интенсивности сигналов ЭПР

*) Название «полностью компенсированный полупроводник» было бы, вероятно, более точным.

**) Температурная зависимость (3.7) объясняется как раз в рамках представления о спектре дискретных уровней в запрещенной зоне (гл. IV).

и по величине статической спиновой парамагнитной восприимчивости. Соответствующие опыты выполнялись с рядом веществ (халькогенидные стекла, аморфные германий, кремний и селен). В халькогенидных стеклах сигналы ЭПР практически не обнаруживались (концентрация неспаренных спинов $n_s \leq 10^{14} \text{ см}^{-3}$) — даже в материалах типа Б). Не виден и соответствующий вклад в парамагнитную восприимчивость. Сигналы ЭПР в ряде халькогенидных стекол появляются, однако, при освещении образца светом с частотой $\omega < \omega_0$ при температурах 6—15 К. Видимо, так же обстоит дело и в аморфном мышьяке.

Эти данные на первый взгляд резко расходятся с выводами п. 8). Заметим однако, что концентрация неспаренных электронных спинов, вообще говоря, не обязана совпадать с концентрацией локальных уровней. (Этот вопрос подробнее обсуждается в §§ II. 10, II. 19.)

В аморфных германии и кремнии сигналы ЭПР наблюдаются и без подсветки. При этом концентрация неспаренных спинов, определяемая по величине сигнала ЭПР и по статической магнитной восприимчивости, меняется от образца к образцу, завися от условий легирования *).

10) Измерения сдвига Найта и времени ядерной релаксации в твердом и жидком Ga_2Te_3 приводят к выводу о том, что состояния электронов, отвечающие разрешенным уровням в запрещенной зоне, локализованы в пространстве.

11) Спектр локальных уровней в халькогенидных полупроводниках в известной мере коррелирует с параметрами полимерной их структуры: при изменении последней в результате, например, разбухания материала (погруженного в диметиамин) меняется и набор ловушек в запрещенной зоне (В. М. Любин).

§ 4. Общие особенности неупорядоченных систем

Материалы, перечисленные в § 1, обладают весьма различными физическими свойствами. Тем не менее, рассматривая поведение электронов и других элементарных возбуждений в таких веществах, мы встречаемся с некоторыми особенностями, присущими всем неупорядоченным системам. Эти особенности обусловлены двумя общими для всех указанных систем чертами силового поля: отсутствием пространственной периодичности

*) В некоторых аморфных пленках германия, кремния и карбида кремния концентрация свободных спинов на дискретных уровнях оказалась очень большой — около $2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Видно, это связано с наличием в рассматриваемых образцах макроскопических структурных дефектов — полостей. На внутренних их поверхностях могут возникать поверхностные уровни в указанном выше количестве. Эта точка зрения в известной мере подтверждается быстрым уменьшением концентрации таких уровней при отжиге пленок.

потенциальной энергии носителя заряда и наличием в ней случайного слагаемого. Для описания последнего надо задать вероятность $\mathcal{P}[V]$ реализации того или иного вида потенциальной энергии носителя заряда $V(\mathbf{r})$ как функции координат \mathbf{r} *).

Функционал $\mathcal{P}[V]$ представляет собой новую по сравнению с теорией идеального кристалла характеристику системы. Для определения явного его вида надо ввести те или иные специальные предположения, относящиеся либо к относительной величине пространственных флуктуаций $V(\mathbf{r})$, либо к физической модели рассматриваемой системы.

Основные особенности неупорядоченных систем были отмечены еще в теории сильно легированных полупроводников [13]; они вытекают, в сущности, из самого определения понятия «случайное поле» в сочетании с отсутствием пространственной периодичности $V(\mathbf{r})$.

Во-первых, в макроскопическом опыте мы, как правило, имеем дело со всем образцом или с макроскопически большей его частью. Это означает, что наблюдаемые на опыте величины получаются в результате усреднения по объему образца. Однако макроскопически большой образец можно представлять себе как совокупность большого числа макроскопических же подобразцов. Из физических соображений ясно (см. также § II.7), что значения потенциальной энергии электрона в случайном поле, взятые в достаточно удаленных друг от друга точках, никак не будут связаны друг с другом. Иначе говоря, в каждом таком «подобразце» будет иметь место своя реализация случайного поля (например, в задаче о сильно легированном полупроводнике — свое расположение атомов примеси). Естественно ожидать поэтому, что усреднение по объему сведется к усреднению по различным реализациям случайного поля (для краткости часто говорят просто об усреднении по случайному полю **). В задаче о легированном полупроводнике это означает усреднение по всем возможным расположениям («конфигурациям») атомов примеси. Задача состоит в том, чтобы отразить это обстоятельство в аппарате теории. Заметим, что процедура усреднения не имеет себе аналога в обычной зонной теории идеального кристалла.

Существенно, что по смыслу дела усреднению указанного типа должны подвергаться выражения, описывающие те или иные наблюдаемые величины. Это может сделать неудобным использование аппарата волновых функций, содержащих ненаблю-

*) Представление о случайном поле довольно уже используется в гидродинамике и статистической физике.

**) О совпадении измеряемых на опыте физических величин с результатами усреднения по случайному полю иногда говорят как о репрезентативности («представительности») соответствующих средних значений.

даемые фазы. По-видимому, более удобен аппарат функций Грина (или матрицы плотности), которым мы в случае необходимости и будем пользоваться (для чтения соответствующих разделов необходимо знакомство с первыми тремя главами книги [14]; все определения и нормировка в дальнейшем соответствуют этой книге).

Во-вторых, случайный характер потенциальной энергии носителя заряда означает, что и сама постановка задачи об энергетическом спектре системы должна носить вероятностный характер. Так, нет смысла спрашивать, дозволено ли то или иное значение энергии носителя заряда, — можно говорить лишь о вероятности этого, о вероятности принадлежности того или иного дозволенного значения энергии дискретному или непрерывному спектру и т. д. При этом приходится вводить статистическую гипотезу, типичную, в сущности, для всех приложений вероятностных методов к физическим задачам. Именно, будем рассматривать «макроскопически большую» систему объема Ω , содержащую N частиц. Слова «макроскопически большая» означают, что объем Ω сколь угодно велик по сравнению с любой физической величиной той же размерности, так что формально можно выполнить предельный переход $\Omega \rightarrow \infty$. Будем считать, что при этом возрастает и полное число частиц в системе, причем так, что

$$\lim_{\substack{\Omega \rightarrow \infty \\ N \rightarrow \infty}} \frac{N}{\Omega} = c < \infty, \quad (4.1)$$

где c — величина, не зависящая от Ω (предельный переход такого типа называется термодинамическим). Гипотеза состоит в том, что в рассматриваемой системе происходят все события, вероятности которых отличны от нуля, причем частота наступления данного события пропорциональна его вероятности. Во избежание недоразумений подчеркнем, что слово «частота» здесь не обязательно следует понимать буквально, как характеристику последовательности событий во времени. Так, рассматриваемое «событие» может состоять в возникновении дискретных локальных уровней в случайных потенциальных ямах (§ II.9). Под «частотой» при этом следует понимать просто концентрацию таких уровней.

Заметим, что в рамках обычной зонной теории вероятностная постановка задачи об энергетическом спектре, по сути дела, лишена реального содержания.

При использовании вероятностных представлений возникает вопрос о достоверности получаемых таким образом результатов. В самом деле, такие величины, как, например, электрическое сопротивление данного макроскопического образца, должны получаться однозначно. Этот весьма тонкий вопрос, равно как

и вопрос о совпадении средних по объему и по случайному полю, рассматривается в § 7 настоящей главы.

В-третьих, в силу отсутствия дальнего порядка компоненты квазиимпульса не являются в рассматриваемых системах хорошими квантовыми числами; состояния же с заданными значениями квазиимпульса не стационарны. Это замечание справедливо в применении к любым неупорядоченным системам, в том числе и не содержащим случайного поля. В сущности, оно означает лишь, что в условиях, когда неравенства типа (1.1) не выполняются, рассеяние носителей заряда в непериодическом поле столь интенсивно, что квазиимпульс не сохраняется даже приближенно. Тем самым лишается смысла представление о законе дисперсии как функциональной связи между энергией и квазиимпульсом. Это означает, что в применении к неупорядоченным системам нельзя ввести понятия поверхности Ферми, единого тензора эффективных масс, через компоненты которого выражаются как равновесные, так и кинетические характеристики вещества, и т. д. Для некоторых систем, указанных в § 1, нельзя ввести даже понятие зоны Бриллюэна, ибо нет соответствующей кристаллической решетки. Естественно, в выражения для многих непосредственно измеряемых на опыте характеристик системы — концентрации электронов, электропроводности и т. д. — будут входить какие-то величины размерности массы. Однако они не обязаны совпадать друг с другом. Соответственно можно говорить об эффективной массе для плотности состояний, для электропроводности и т. д. Вопрос о взаимосвязи между ними можно решить, только рассматривая какую-либо конкретную систему.

Заметим, что все указанные понятия принадлежат к числу важнейших в обычной зонной теории твердого тела.

В-четвертых, в неупорядоченной системе возрастает, по сравнению с идеальным кристаллом, роль некоторых многоэлектронных эффектов (это замечание справедливо для любых неупорядоченных систем, в том числе и не содержащих случайного поля). Речь идет о затухании одночастичных возбуждений за счет межэлектронного взаимодействия в вырожденном газе. Действительно, хорошо известно [15], что в идеальном кристалле это затухание стремится к нулю вблизи поверхности Ферми (что, собственно, и оправдывает представление о ней с точки зрения многоэлектронного подхода). Это обусловлено совместным действием принципа Паули и законов сохранения энергии и квазиимпульса. В рассматриваемом случае второй из указанных законов отпадает и затухание отнюдь не подавляется. Соответственно обычная картина квазичастиц может потерять смысл, коль скоро речь идет о материалах с не слишком малой концентрацией свободных электронов (дырок).

Заметим, что именно представление о квазичастицах позволило обосновать обычную зонную схему с позиций многоэлектронной теории твердого тела.

Таким образом, на первый взгляд использование обычной зонной схемы в теории неупорядоченных систем представляется необоснованным. С другой стороны, опыт (§ 3) вполне определенно свидетельствует, что хотя бы отдельные черты зонной схемы сохраняют смысл и в рассматриваемых материалах. Таким образом, возникает теоретическая задача: выяснить, существуют ли какие-либо представления зонной теории, которые сохраняли бы смысл и в применении к неупорядоченным системам. В частности, надо понять, можно ли придать смысл (и какой) самому понятию «зона».

Для решения этих задач удобно указать сначала точные понятия, пригодные для описания любых — в том числе и неупорядоченных — систем.

§ 5. Плотность состояний (предварительные соображения)

Интересующие нас точные понятия должны быть, с одной стороны, достаточно общими — чтобы их можно было использовать применительно к любой системе частиц — и, с другой стороны, достаточно простыми — чтобы их можно было применять эффективно*). Вопрос о разыскании таких эффективных и точных характеристик системы был в свое время поставлен и решен в общей теории многих тел (В. Л. Бонч-Бруевич и А. Г. Миронов, 1961; В. Л. Бонч-Бруевич, 1965).

Одно из таких понятий — плотность состояний. Оно естественно возникает еще в элементарной теории идеального газа и широко используется в физике твердого тела. Напомним элементарное определение этого понятия, справедливое в применении к носителям заряда в идеальном кристалле (или просто к частицам идеального газа). Пусть рассматриваемые частицы (или квазичастицы) образуют фермиевский газ и характеризуются импульсами (или квазиимпульсами) \mathbf{p} , проекциями спина σ и энергиями $E(\mathbf{p}, \sigma)$ **). Как известно [1], концентрация частиц n дается выражением

$$n = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{p} n_F [E(\mathbf{p}, \sigma)], \quad (5.1)$$

*) Так, понятие волновой функции всей системы принадлежит, разумеется, к числу точных. Однако волновая функция сложной системы обычно содержит слишком много информации — больше, чем фактически требуется для интерпретации большинства экспериментальных данных.

**) Мы сохраняем индекс σ у энергии, имея в виду систему во внешнем магнитном поле \mathcal{H} . Учет спин-орбитального взаимодействия требует лишь иной интерпретации величины σ — ее надо рассматривать в этом случае как проекцию полного момента количества движения.

где

$$n_F(E) = \left[\exp\left(\frac{E - F}{T}\right) + 1 \right]^{-1} \quad (5.2)$$

есть функция Ферми.

Введем в (5.1) новые переменные интегрирования: $E(\mathbf{p}, \sigma) = E$, ν , ν' , где ν и ν' — две какие-нибудь подходящие величины (это могут быть, например, полярные углы вектора \mathbf{p}). Якобиан перехода от переменных p_x, p_y, p_z к переменным E, ν, ν' обозначим через $Z_\sigma(E, \nu, \nu')$ и введем обозначение

$$\rho_\sigma(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\nu d\nu' Z_\sigma(E, \nu, \nu'). \quad (5.3)$$

Получим

$$n = \sum_\sigma \int \rho_\sigma(E) n_F(E) dE. \quad (5.4)$$

Величина $\rho_\sigma(E)$ называется плотностью состояний. Смысл названия ясен из формулы (5.4): $\rho_\sigma(E) dE$ есть, очевидно, число дозволенных электронных состояний (с данным спином) в интервале энергии dE (*). В дальнейшем мы будем для краткости всюду, где возможно, опускать спиновые индексы. Вычисление $\rho(E)$ не представляет труда, коль скоро известен закон дисперсии, $E = E(\mathbf{p})$. Так, например, для электронов проводимости в простой зоне мы имеем

$$E(\mathbf{p}) = E_c + p^2/2m, \quad (5.5)$$

где E_c — нижняя граница зоны проводимости, m — эффективная масса. В качестве ν и ν' здесь удобно выбрать полярные углы θ, φ ; при этом для якобиана Z мы получаем (при $E \geq E_c$):

$$Z(E, \theta, \varphi) = \sqrt{2m^3} \sqrt{E - E_c} \sin \theta. \quad (5.6)$$

Согласно (5.5) область $E < E_c$ при вещественных значениях p не дозволена (запрещенная зона). Формулы (5.3) и (5.6) дают теперь

$$\rho(E) = \begin{cases} \frac{m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 \sqrt{2}} \sqrt{E - E_c}, & E \geq E_c, \\ 0, & E < E_c. \end{cases} \quad (5.3')$$

Как видно из формулы (5.4), зная плотность состояний $\rho(E)$, мы можем найти явное выражение для концентрации частиц как функции уровня Ферми, температуры, напряженности маг-

*) Часто определяют плотность состояний как $\sum_\sigma \rho_\sigma(E)$. Это бывает удобно, когда эффекты, связанные с наличием спина, не играют роли.

нитного поля и других аналогичных величин. После этого все равновесные характеристики системы (теплоемкость, магнитную восприимчивость и т. д.) можно найти уже чисто термодинамическим путем. Иначе говоря, вся конкретная информация, необходимая для вычисления термодинамических характеристик системы, содержится в виде функции $\rho(E)$.

Легко обобщить определение плотности состояний на случай, когда в энергетическом спектре системы имеются и дискретные уровни (например, локальные уровни в запрещенной зоне, связанные с наличием примесных атомов или иных структурных дефектов кристаллической решетки). Действительно, концентрация электронов на локальных уровнях дается выражением [3]

$$n(E_i) = N_i \left[g_i \exp\left(\frac{E_i - F}{T}\right) + 1 \right]^{-1}. \quad (5.7)$$

Здесь через N_i , g_i и E_i обозначены, соответственно, концентрация уровней, фактор вырождения и энергия уровня. Введем «эффективную энергию»

$$E_i^* = E_i + T \ln g_i. \quad (5.8)$$

Тогда концентрацию электронов на локальных уровнях можно представить в виде такого же интеграла, как и в (5.4). Надо лишь определить плотность состояний, связанных с локальными уровнями, равенством

$$\rho(E) = N_i \delta(E - E_i^*). \quad (5.9)$$

Таким образом, при наличии дискретных энергетических уровней плотность состояний имеет дельтообразные особенности при $E = E_i^*$.

Из формул (5.3), (5.3') и (5.9) явствует, что вид плотности состояний как функции энергии отражает характер энергетического спектра системы. Именно, функция $\rho(E)$ отлична от нуля и непрерывна в области непрерывного спектра, имеет особенности в точках дискретного спектра и обращается в нуль в области запрещенных значений энергии.

Существует также определенная корреляция между видом функции $\rho(E)$ и кинетическими характеристиками рассматриваемой простейшей физической системы. Для определенности будем говорить об электропроводности вещества, хотя все дальнейшее в равной мере относится и к другим аналогичным кинетическим коэффициентам.

Рассмотрим сначала электропроводность на постоянном токе σ . Электроны и дырки, в равновесных условиях занимающие дискретные уровни в запрещенной зоне, могут участвовать в переносе заряда только путем перескоков (более подробно см. гл. IV); при понижении температуры вероятность последних

уменьшается, стремясь к нулю при $T \rightarrow 0$. Следовательно, при $T \rightarrow 0$ электропроводность может быть отлична от нуля, лишь если в зоне проводимости (или дырочной) остается конечное число носителей заряда. Газ последних при этом будет, разумеется, вырожденным. Иначе говоря, в применении к рассматриваемой системе тривиально справедлива

Теорема 1: статическая электропроводность при $T = 0$ отлична от нуля тогда и только тогда, когда уровень Ферми попадает в область энергий, где плотность состояний отлична от нуля и непрерывна *).

Переходя к переносу заряда при конечной температуре, ограничимся случаем не прыжковой, а обычной проводимости. Тогда тривиально справедлива

Теорема 2: если уровень Ферми попадает в область энергий, где плотность состояний равна нулю, то при достаточно низких температурах (T много меньше характерной энергии, на которой заметно изменяется плотность состояний в непрерывном спектре)

$$\sigma \sim \exp\left(-\frac{|F - E_0|}{T}\right). \quad (5.10)$$

Здесь E_0 — ближайшая к F граница области, где функция $\rho(E)$ отлична от нуля и непрерывна. Правая часть (5.10) может, естественно, содержать и экспоненциальное слагаемое с большим показателем степени, отвечающее неосновным носителям. Нас здесь интересует, однако, лишь слагаемое с наименьшим температурным коэффициентом, доминирующее при не слишком высоких температурах.

Обратимся теперь к электропроводности при конечной частоте электрического поля ω , т. е. к поглощению электромагнитных волн. Очевидно, последний процесс может иметь место лишь при наличии электронов в начальном состоянии и свободных мест — в конечном. Иначе говоря, в применении к рассматриваемой системе тривиально справедлива

Теорема 3: коэффициент поглощения (испускания) электромагнитных или звуковых волн может быть отличен от нуля, лишь если

$$\sum_i \hbar\omega_i = E_2 - E_1. \quad (5.11)$$

Здесь ω_i — частоты фотонов (фононов), нумеруемых индексом i ; E_2 и E_1 — два значения энергии, при которых плотность состояний отлична от нуля: $\rho(E_2) \neq 0$, $\rho(E_1) \neq 0$ (условие непре-

*) Понятие «уровень Ферми», будучи чисто термодинамическим, остается в силе для любых равновесных систем.

ривности $\rho(E)$ при этом не обязательно*). В частности, для однофотонных (однофононных) процессов мы имеем

$$\hbar\omega = E_2 - E_1. \quad (5.11')$$

Видим, таким образом, что, определив каким-либо способом плотность состояний как функцию энергии, мы получаем довольно полную информацию о термодинамических и кинетических характеристиках вещества. В случае рассматриваемой простейшей системы связь между $\rho(E)$ и кинетическими характеристиками оказывается даже более тесной, чем следует только из указанных теорем. Действительно, вероятности переходов, ответственных за поглощение любого излучения, связаны с плотностью состояний по стандартным формулам квантовой механики, а статическая электропроводность, вычисленная с помощью кинетического уравнения Больцмана, пропорциональна

$$\int \rho(E) \tau(E) v^2(E) \frac{dn_F}{dE} dE,$$

где $\tau(E)$ — время релаксации импульса, $\mathbf{v} = \nabla_p E(\mathbf{p})$ — групповая скорость электронных волн. Однако, в отличие от указанных выше теорем, эти простые соотношения не допускают непосредственного переноса на более сложный случай произвольной неупорядоченной системы. В частности, с такой ситуацией мы встречаемся при изучении оптических переходов и явлений переноса с участием локализованных носителей заряда (гл. IV, V).

С другой стороны, плотность состояний оказывается менее содержательной (и более простой) величиной, нежели, например, волновая функция. Чтобы убедиться в этом, достаточно заметить, что при любом параболическом законе дисперсии функция $\rho(E)$, как и в случае (5.3'), пропорциональна $(E - E_c)^{1/2}$: анизотропия тензора эффективной массы не сказывается на виде плотности состояний, влияя лишь на коэффициент пропорциональности в формуле типа (5.3').

Естественно, возникает вопрос: не относится ли плотность состояний как раз к числу тех величин, которые мы ищем? Иными словами, нельзя ли перенести представление о плотности состояний на случай произвольной системы многих частиц, отказавшись, вообще говоря, от определения (5.3) и заменив его более общим, но сохранив соотношение (5.4) и теоремы 1—3? (В дальнейшем мы будем называть их теоремами о корреляции.)

*) Разумеется, условие (5.11) необходимо, но, вообще говоря, не достаточно: могут быть правила отбора, не связанные с законом сохранения энергии и не имеющие прямого отношения к виду функции $\rho(E)$.

Ответ на поставленный вопрос оказывается положительным: всегда — для любой системы как угодно взаимодействующих частиц — можно ввести понятие плотности состояний и дать точный рецепт ее вычисления, сохранив в силе как связь ее с термодинамическими величинами, так и теоремы о корреляции (при этом последние носят уже менее тривиальный характер). Это обстоятельство позволяет дать точное определение понятия «разрешенная зона», справедливое в применении к любой макроскопической системе частиц. Действительно, эксперименты, интерпретируемые на основе представления о разрешенных и запрещенных зонах, относятся прежде всего к электрическим и оптическим характеристикам вещества. В силу теорем о корреляции все экспериментальное содержание этих представлений укладывается в следующие определения: разрешенной зоной называется область энергий, в которой плотность состояний отлична от нуля и непрерывна; запрещенной зоной называется область энергий, в которой плотность состояний либо равна нулю, либо отлична от нуля лишь в отдельных точках, где она имеет дельтообразные особенности. Этим точкам отвечают дискретные уровни, т. е. локализованные состояния электронов. Запрещенную зону, определяемую таким путем, часто называют также щелью для подвижности (подробнее см. гл. IV*).

Подчеркнем, что термин «энергия» в этом определении относится, вообще говоря, не к отдельным частицам или квазичастицам, а ко всей системе взаимодействующих частиц (более подробно этот вопрос рассматривается в следующем параграфе).

Заметим также, что, оставляя в силе понятие «зона» в применении к определенной области энергий, мы отнюдь не сохраняем представления о зоне Бриллюэна. Как уже отмечалось в § 4, в неупорядоченной системе компоненты квазиимпульса вовсе не характеризуют стационарные состояния. Соответственно отпадают правила отбора, связанные с их сохранением, равно как и выводы, основанные на представлении об энергии электрона как периодической функции квазиимпульса. Последнее означает, в частности, что особенности Ван Хофа не обязаны наблюдаться в спектре поглощения (или испускания) неупорядоченных полупроводников. При аморфизации кристаллического полупроводника пики коэффициента поглощения, обусловленные этими особенностями, должны «размазаться», что и наблюдается в действительности (§ 3).

* В применении к системам со случайным полем эти определения, оставаясь правильными, нуждаются в некоторых разъяснениях (см. следующий параграф).

§ 6*. Плотность состояний (строгое рассмотрение)

Явный ответ на вопрос, как строго ввести представление о плотности состояний, мы получим, воспользовавшись общим выражением для концентрации частиц и приведя его к виду (5.4). При этом получится и общая формула для функции $\rho(E)$.

Как известно, в любой системе частиц локальная концентрация $n(\mathbf{x})$ дается выражением

$$n(\mathbf{x}) = 2 \sum_s \int dE \frac{\text{Im } G_r(\mathbf{x}, s; \mathbf{x}, s; E)}{\exp\left(\frac{E - F}{T}\right) + 1}. \quad (6.1)$$

Здесь $G_r(E)$ есть фурье-образ по времени от запаздывающей антикоммутирующей одночастичной функции Грина (для краткости мы будем в дальнейшем называть эту величину просто функцией Грина), s — спиновая переменная, переменная E имеет размерность энергии*). Интегрирование по E производится формально по всей вещественной оси; фактически, однако, подынтегральное выражение может обрываться при каких-то конечных значениях E , и удобнее говорить, что интеграл берется по всей области, в которой подынтегральное выражение отлично от нуля.

Среднее значение концентрации по объему Ω есть

$$n = \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{x} n(\mathbf{x}). \quad (6.2)$$

Объем Ω может совпадать или не совпадать с полным объемом рассматриваемой системы. В случае, когда данный объем составляет лишь часть полного объема системы, средняя концентрация (6.2) в принципе могла бы зависеть от положения его в образце. Мы, однако, ограничимся случаем макроскопически однородной системы, когда такая зависимость отсутствует. (Более подробное обсуждение понятия «макроскопически однородная система» содержится ниже, в § II. 7.)

Рассматривая функцию Грина $G_r(\mathbf{x}, s; \mathbf{x}', s'; E)$ как матрицу с индексами $\mathbf{x}, s; \mathbf{x}', s'$, можем написать

$$\int d\mathbf{x} \sum_s \text{Im } G_r(\mathbf{x}, s; \mathbf{x}, s; E) = \text{Sp } \text{Im } G_r(E). \quad (6.3)$$

Таким образом,

$$n = \frac{2}{\Omega} \int \text{Sp } \text{Im } G_r(E) n_F(E) dE. \quad (6.4)$$

*) В книге [14] переменная E отсчитывается от уровня Ферми, соответственно чему величина F не входит явно в формулу, аналогичную (6.1). Нам удобнее пока не фиксировать начало отсчета E .

Сравнивая это с формулой (5.4), видим, что плотность состояний (с обоими значениями проекции спина) следует определить равенством

$$\rho(E) = \frac{2}{\Omega} \text{Sp Im } G_r(E). \quad (6.5)$$

При достаточно большом значении объема Ω правая часть (6.5) перестает зависеть от Ω .

Заметим, что в принятых нами условиях результат интегрирования в (6.3) автоматически получается усредненным и по случайному полю. Действительно, по смыслу понятия «макроскопическая система» объем ее таков, что в разных его участках происходит перебор всех возможных конфигураций поля*). Технически, однако, может оказаться удобнее вычислять функцию Грина при каком-то одном виде потенциальной энергии носителя заряда, а потом уже явно выполнять усреднение по случайному полю. Последнюю операцию мы будем обозначать символом $\langle \dots \rangle$, где точки обозначают усредняемое выражение. Таким образом, вместо (6.5) можем написать также

$$\rho(E) = \frac{2}{\Omega} \langle \text{Sp Im } G_r(E) \rangle. \quad (6.5')$$

В макроскопически однородной системе величина

$$\langle \text{Im } G_r(\mathbf{x}, s; \mathbf{x}, s; E) \rangle$$

не зависит от \mathbf{x} , и, следовательно, интегрирование по \mathbf{x} в (6.3) сводится просто к умножению на Ω . Независимость n и $\rho(E)$ от выбора объема Ω (при условии его макроскопичности) здесь видна непосредственно.

Мы ввели определение (6.5) чисто формальным путем. Легко убедиться, однако, что в частном случае, когда можно говорить об одночастичном энергетическом спектре, формула (6.5) действительно дает число уровней в единичном интервале энергии, отнесенное к единице объема. В самом деле, пусть мы имеем одноэлектронную задачу с гамильтонианом

$$H(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\mathbf{x}), \quad (6.6)$$

где $V(\mathbf{x})$ — потенциальная энергия электрона, а m_0 — масса свободного электрона. Функция Грина $G_r(E)$ определяется

*) Это утверждение, кажущееся почти очевидным, на самом деле представляет собой гипотезу — такую же, как гипотеза об эргодичности в классической статистической механике (см. § 7).

уравнениями *)

$$[E - H(\mathbf{x})] G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = -\frac{1}{2\pi} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (6.7a)$$

$$[E - H(\mathbf{x}')] G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = -\frac{1}{2\pi} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (6.7b)$$

При этом функция $G_r(E)$ должна быть аналитичной в верхней полуплоскости комплексной переменной E .

Обозначим через λ совокупность квантовых чисел, характеризующих собственные значения E_λ и собственные функции ψ_λ оператора H :

$$H\psi_\lambda = E_\lambda\psi_\lambda. \quad (6.8)$$

В частности, при $V = 0$ под λ следует понимать совокупность трех компонент импульса и спинового квантового числа; если V — периодическая функция, то λ есть совокупность трех компонент квазиимпульса, спинового квантового числа и номера энергетической зоны и т. д. В общем случае системы сколь угодно больших, но конечных размеров все квантовые состояния электрона, отвечающие одночастичному гамильтониану, также можно пронумеровать с помощью дискретного индекса λ . Он включает спинового квантовое число σ и число m , нумерующее пространственные волновые функции электрона; m может включать в себя и зонный индекс l . В области дискретного спектра пространственные волновые функции локализованы: они убывают при удалении от некоторых точек \mathbf{R}_λ (или \mathbf{R}_m), называемых центрами локализации (иногда говорят об узлах, около которых локализованы электроны).

При наличии случайного поля $U(\mathbf{x})$ произвольного вида система с подавляющей вероятностью никакой пространственной симметрией не обладает. Отсюда следует, что роль квантовых чисел в областях как дискретного, так и непрерывного спектра в данном случае выполняют только сама энергия E_λ и спинового квантовое число σ . В области дискретного спектра к этому набору может добавиться еще радиус-вектор центра локализации \mathbf{R}_m (m — номер центра). Действительно, состояния с данной энергией могут оказаться локализованными в разных точках системы. В этом смысле говорят о вырождении по отношению к величине \mathbf{R}_m , которая тогда также может рассматриваться как «квантовое число» **). Заметим, что условная вероятность лока-

*) Мы не выписываем явно спиновые аргументы, понимая G_r как соответствующую матрицу (при $\mathcal{H} = 0$ и в пренебрежении спин-орбитальной связи эта матрица кратна единичной).

**) Заметим, однако, что в данном случае термин «квантовое число» следует понимать в несколько условном смысле; компоненты вектора \mathbf{R}_m не являются собственными значениями какого-либо оператора, действующего на «электронные» переменные. Строго говоря, это — параметры, возникающие

лизации состояния с энергией E_λ в точке \mathbf{R}_m , если имеется другое состояние с энергией $E_{\lambda'}$ в точке $\mathbf{R}_{m'}$, не обязательно есть константа: она может зависеть от E_λ , $E_{\lambda'}$ и $\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_{m'}$. Эту условную вероятность называют двухуровневой корреляционной функцией. Она определяется статистическими свойствами случайного поля (см. § III.3).

В силу (6.7a), (6.7b) и (6.8) мы имеем

$$G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = -\frac{1}{2\pi} \sum_{\lambda} \frac{\psi_{\lambda}(\mathbf{x}) \psi_{\lambda}^*(\mathbf{x}')}{E - E_{\lambda}}, \quad (6.9)$$

причем — в зависимости от природы чисел λ — сумма по λ может обозначать и интеграл. В силу указанного выше свойства аналитичности G_r мнимую часть (6.9) следует вычислять, приписывая переменной E малую мнимую часть $i\varepsilon$ ($\varepsilon > 0$), с последующим предельным переходом $\varepsilon \rightarrow 0$. Следовательно,

$$\text{Im } G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E) = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} |\psi_{\lambda}(\mathbf{x})|^2 \delta(E - E_{\lambda}). \quad (6.10)$$

Нормируя волновые функции ψ_{λ} в объеме Ω , получаем отсюда

$$\rho(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\lambda} \delta(E - E_{\lambda}), \quad (6.11)$$

что и делает очевидным сделанное выше утверждение о смысле функции $\rho(E)$. Действительно, в правой части (6.11) берется сумма по всем вырожденным уровням, принадлежащим одному и тому же собственному значению энергии E_{λ} . В отсутствие вырождения индекс λ можно отождествить с самой энергией E_{λ} , и в сумме остается только одно слагаемое.

В случае, когда уровни E_{λ} образуют дискретную совокупность, правая часть (6.11) представляет собой сумму дельтообразных слагаемых типа (5.9)*). Если же энергетический спектр

благодаря использованию стандартного адиабатического приближения, в котором тяжелые частицы считаются неподвижными. Отметим также, что представление о вырождении по \mathbf{R}_m имеет только вероятностный смысл, — см. ниже (текст после формулы (6.11'') и гл. II).

*) Следует иметь в виду, что представление о спектре такого типа есть некоторая идеализация. Дело в том, что фактически всегда имеет место взаимодействие электрона, например, с колебаниями решетки (не учтенное в гамилльтонiane (6.6)). Это взаимодействие приводит (при $T \neq 0$) к «размытию» уровней — каждый уровень приобретает конечную ширину, и вместо δ -функций в (6.11) появляются регулярные выражения, характеризующиеся, однако, более или менее резкими пиками около значений $E = E_{\lambda}$. При достаточно слабом взаимодействии электронов с фононами связанное с ним уширение уровней, однако, невелико, и в дальнейшем мы его рассматривать не будем.

непрерывен, то сумма по λ фактически представляет собой интеграл и дельтаобразные особенности «замазываются»: функция $\rho(E)$ оказывается непрерывной (производные от нее могут иметь особенности того или иного характера).

Определение (6.11) справедливо, в частности, и в задаче о поведении одного электрона в идеальной решетке. При этом λ есть совокупность трех компонент квазимпульса \mathbf{p} , спинового квантового числа σ и номера зоны l .

Пусть разрешенные энергетические зоны не перекрываются. Тогда при каждом данном значении E суммирование в правой части (6.11) относится лишь к одной какой-нибудь зоне, и мы можем ввести представление о плотности состояний в данной зоне:

$$\rho_l(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\lambda \in l} \delta(E - E_\lambda), \quad (6.11')$$

где символ $\lambda \in l$ означает, что суммирование производится по квантовым числам λ при заданном (равном l) значении номера зоны.

Подчиняя блоховские функции ψ_λ обычному условию периодичности в объеме Ω , имеем предельное соотношение

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{p}} (\dots) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} (\dots),$$

где точками обозначено выражение, не зависящее от объема Ω . Соответственно формула (6.11') принимает вид

$$\rho_l(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \delta(E - E_{\mathbf{p}l}).$$

По правилу вычисления интегралов с δ -функцией надо ввести новые переменные $E_{\mathbf{p}l\sigma} = E, \mathbf{v}, \mathbf{v}'$, где \mathbf{v} и \mathbf{v}' имеют тот же смысл, что и в § 5. После этого написанная выше формула превращается в (5.3) (если, ограничиваясь одной зоной, опустить ненужный индекс l). Величина E здесь имеет смысл энергии отдельной частицы.

В неупорядоченной системе уровни E могут быть случайными. При этом случайными будут, вообще говоря, как сами значения E_λ , так и наборы квантовых чисел λ , т. е. $E_\lambda = E_\lambda[V]$, $\lambda = \lambda[V]$. Соответственно, усредняя правую часть (6.11) по всем возможным конфигурациям поля, мы получим

$$\frac{1}{\Omega} \int dV \mathcal{P}[V] \sum_{\lambda[V]} \delta(E - E_\lambda[V]). \quad (6.11'')$$

Как мы увидим в дальнейшем (§ 7), операция усреднения по случайному полю эквивалентна определению некоторого ан-

самбля «существенных» его реализаций, которые в большой системе осуществляются с подавляющей вероятностью. Соответствующий набор «квантовых чисел» λ был выше указан. Значения этих чисел в разных существенных реализациях, разумеется, могут быть различны, но состав их при заданном — непрерывном или дискретном — участке энергетического спектра остается одним и тем же. Это позволяет перейти от усреднения по V к усреднению по λ .

Положим по определению

$$\int \delta V \mathcal{P}[V] \sum_{\lambda[V]} \delta(E - E_{\lambda}[V]) = \sum_{\lambda} \mathcal{P}(\lambda) \Delta E_{\lambda} \delta(E - E_{\lambda}),$$

где ΔE_{λ} — характерная разность двух соседних уровней. Тогда

$$\rho(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\lambda} \mathcal{P}(\lambda) \delta(E - E_{\lambda}) \Delta E_{\lambda}. \quad (6.11''')$$

Как и в случае (6.11), в зависимости от природы чисел λ правая часть (6.11''') представляет собой либо набор δ -функций, либо некоторую непрерывную функцию аргумента E .

Величину $\mathcal{P}(\lambda) \Delta E_{\lambda}$ мы будем называть вероятностью того, что в данном случайном поле возникнет стационарное состояние с энергией в интервале ΔE_{λ} около точки E_{λ} . Следует, однако, помнить в виду, что она нормирована не на единицу, а на полное число состояний в единице объема. Действительно, интегрируя равенство (6.11''') по энергии, мы получаем

$$\int \rho(E) dE = \frac{1}{\Omega} \sum_{\lambda} \mathcal{P}(\lambda) \Delta E_{\lambda}. \quad (6.12)$$

Интеграл в левой части этого равенства может и разойтись. Сама функция $\mathcal{P}(\lambda)$, однако, всегда имеет точный смысл.

В общем случае системы взаимодействующих частиц величину E уже нельзя отождествлять с энергией отдельной частицы. Действительно, при учете взаимодействия это понятие вообще не имеет точного содержания. Тем не менее переменная E — энергетический аргумент функции Грина — имеет и в общем случае ясный физический смысл. Именно, будем рассматривать систему с переменным числом частиц и обозначим через $E_M^{(N)}$ и $E_M^{(N \pm 1)}$ точные собственные значения ее энергии при наличии, соответственно, N и $N \pm 1$ частиц; через M здесь обозначена совокупность квантовых чисел, характеризующих точные стационарные состояния системы. Тогда все значения аргумента E , при которых функция $\rho(E)$ отлична от нуля, суть разности вида

$$E = E_M^{(N \pm 1)} - E_M^{(N)}. \quad (6.13)$$

Иначе говоря, значения E суть возможные изменения полной энергии всей системы при изменении числа частиц в ней на единицу. Очевидно, в отсутствие взаимодействия между частицами $M = \lambda$, а правая часть (6.13) равна одному из введенных ранее собственных значений E_λ в согласии с (6.10) и (6.11).

При учете взаимодействия между частицами функция Грина уже не имеет простого вида (6.9). Соответственно и для плотности состояний получается более сложная формула, нежели (6.11). Тем не менее можно указать некоторые общие свойства функции $\rho(E)$, полезные как для конкретного ее вычисления, так и для рассуждений общего характера.

Заметим, прежде всего, что для вычисления плотности состояний можно воспользоваться функцией Грина, вычисленной в произвольном представлении: в формуле (6.5) фигурирует шпур, инвариантный относительно выбора представления.

Обозначим через ξ совокупность собственных значений каких-либо одночастичных операторов. Соответствующие собственные функции ψ_ξ могут описывать какие-либо стационарные состояния системы (как в случае (6.8)) или не описывать их — существенно лишь, чтобы ψ_ξ образовывали полную систему. Тогда в (произвольном) ξ -представлении формулу (6.5) можно переписать в виде

$$\rho(E) = \frac{2}{\Omega} \sum_{\xi} \text{Im } G_r(\xi, \xi; E). \quad (6.5'')$$

Функция $\text{Im } G_r(\xi, \xi; E)$ при этом отнюдь не обязана иметь дельтообразный вид *).

Как известно,

$$\text{Im } G_r(\xi, \xi; E) \geq 0. \quad (6.14)$$

Отсюда явствует, что

а) функция $\rho(E)$ не отрицательна:

$$\rho(E) \geq 0; \quad (6.15a)$$

б) плотность состояний обращается в нуль при каком-либо значении $E = E_0$ тогда и только тогда, когда при $E = E_0$ обращаются в нуль все диагональные элементы мнимой части функции Грина в любом представлении:

$$\text{Im } G_r(\xi, \xi; E_0) = 0, \quad \text{если } \rho(E_0) = 0, \quad (6.15b)$$

и $\rho(E_0) = 0$, если $\text{Im } G_r(\xi, \xi; E_0) = 0$ при всех ξ .

*) В частном случае (6.8), (6.9) мы имеем, очевидно,

$$G_r(\lambda, \lambda; E) = -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{E - E_\lambda}.$$

Далее, по определению концентрации частиц n интеграл в формуле (6.4) должен сходиться при любых значениях T и F . Следовательно, плотность состояний ограничена условиями

$$\rho(E) \exp(-E/T) \xrightarrow{E \rightarrow \infty} 0, \quad (6.16)$$

$$\rho(E) |E| \xrightarrow{E \rightarrow -\infty} 0. \quad (6.17)$$

Наконец, в задаче с аддитивным гамильтонианом (6.6) плотность состояний есть «чисто механическая» величина: согласно (6.11) она определяется только энергетическим спектром системы. При наличии взаимодействия между частицами функция $\rho(E)$ зависит, вообще говоря, от параметров T и F .

Плотность состояний (6.5), (6.5') можно использовать для характеристики энергетического спектра системы. Следует, однако, подчеркнуть, что простая связь между $\rho(E)$ и кинетическими коэффициентами (электропроводностью и т. д.), о которой говорилось в § 5, в общем случае уже не имеет места. Формально это видно из того, что, например, электропроводность выражается через двухчастичную функцию Грина, которая, вообще говоря, не расщепляется на произведение одночастичных. Суть дела состоит в том, что в кинетике существенны не только положения энергетических уровней, но и вероятности переходов между ними.

Тем не менее указанные в предыдущем параграфе теоремы о корреляции справедливы и в общем случае. Доказательство этого утверждения дано в Приложении I.

§ 7*. Самоусредняющиеся величины

Вернемся к поставленным в §§ 4, 6 вопросам о достоверности результатов, получаемых путем усреднения по всем возможным реализациям случайного поля, и об эквивалентности этого усреднения усреднению по объему образца. Центральную роль здесь играет понятие самоусредняющейся физической величины (И. М. Лифшиц, 1952).

Как и в § 6, обозначим через λ набор квантовых чисел, характеризующих стационарные состояния электронов в случайном поле, и рассмотрим какую-нибудь функцию вида

$$F(\lambda) = \frac{1}{\Omega} \sum_{E_{\lambda_1}, \dots, E_{\lambda_n} < E_\lambda} f(\lambda_1, \dots, \lambda_n); \quad (7.1)$$

при этом f , а потому и $F(\lambda)$, может зависеть еще от каких-либо неслучайных параметров. К числу функций вида (7.1) отно-

сится, например, интеграл $\int_{-\infty}^{E_\lambda} \rho(E) dE$, определяющий полное

число состояний с энергиями, меньшими E_λ , в единице объема системы с аддитивным случайным гамильтонианом (6.6). С функциями вида (7.1) можно связать и используемые ниже (в гл. IV, V) выражения для комплексной электропроводности вещества, а также и другие величины, непосредственно измеряемые на опыте. Каждое отдельное слагаемое в правой части (7.1) зависит, естественно, от явного вида фигурирующего в выражении (6.6) потенциала V . Иначе говоря, в разных реализациях случайного поля эти слагаемые различны. Однако, в соответствии со сказанным в § 4, статистический подход имеет смысл, если вся сумма (7.1) практически не испытывает флуктуаций, т. е. в термодинамическом пределе при $\Omega \rightarrow \infty$ оказывается одной и той же для всех реализаций рассматриваемого случайного поля (исключая, может быть, множество реализаций меры нуль). По определению функцию вида (7.1) называют самоусредняющейся, если при $\Omega \rightarrow \infty$ она стремится к некоторому неслучайному пределу. Этот предел, очевидно, есть не что иное, как значение физической величины, описываемой выражением (7.1), в подавляющем большинстве реализаций случайного поля. В соответствии со сказанным выше эти реализации образуют множество меры единица. Мы будем называть его ансамблем существенных реализаций. Отметим, что последнее понятие характеризует не только данное случайное поле, но и данную физическую величину, и данный набор чисел λ . Для разных величин и для разных значений аргументов λ ансамбли существенных реализаций, вообще говоря, различны.

Данное выше определение можно распространить и на случай систем с неаддитивными гамильтонианами. Надо лишь понимать под λ «квантовые числа», нумерующие какой-либо удобный полный набор ортонормированных одночастичных функций (не обязательно описывающих стационарные состояния системы), а под $f(\lambda_1, \dots, \lambda_n; V)$ — какой-либо функционал от случайного потенциала V , параметрически зависящий от $\lambda_1, \dots, \lambda_n$.

Из физических соображений ясно, что все измеряемые на опыте величины должны быть самоусредняющимися. Это требование есть не что иное, как выражение интуитивно несомненного физического представления о практической достоверности вероятностных суждений, относящихся к достаточно большой системе. Для систем с аддитивным гамильтонианом (6.6) свойство самоусредняемости величин вида (7.1) удастся строго доказать (Л. А. Пастур, 1971) в довольно общих предположениях о свойствах случайного поля $V(x)$. При этом доказываемся

и эквивалентность усреднений по объему системы и по всем реализациям случайного поля *).

Мы не будем здесь останавливаться на весьма тонких рассуждениях, содержащихся в цитированных работах, а отметим лишь, следуя Л. А. Пастуру, глубокую аналогию между рассматриваемой задачей и проблемой обоснования классической статистической механики. Указанная аналогия сразу видна из табл. II, в левом и правом столбцах которой указываются соответственные понятия и операции статистической механики и теории неупорядоченных систем.

Таблица II

Статистическая механика	Теория неупорядоченных систем
<p>Фазовое пространство — пространство точек (p, q), где p и q суть наборы обобщенных импульсов и координат</p> <p>Любая неусредненная физическая величина — функция $A = A(p, q)$</p> <p>Усреднение по времени дает физически достоверные величины</p> <p>Эргодическая гипотеза: среднее по времени совпадает с фазовым средним</p>	<p>Пространство функций $V(x)$</p> <p>Любая неусредненная физическая величина — функционал $A = A[V(x)]$</p> <p>Усреднение по объему дает физически достоверные величины</p> <p>Эргодическая гипотеза: среднее по объему совпадает со средним по всем реализациям случайного поля</p>

Из сказанного выше явствует, что в применении к самоусредняющимся величинам эргодическая гипотеза оправдана. Ясен также и хорошо изученный в статистической механике [16] «механизм», ответственный за обсуждавшуюся выше практическую достоверность результатов статистического подхода.

Таким образом, существуют два формально различных подхода к вычислению интересующих нас величин вида (7.1). Во-первых, можно, явно вычислив функционал $f(\lambda_1, \dots, \lambda_n; V)$ для всех реализаций $V(x)$, выполнить затем усреднение по формуле типа (6.11"). Во-вторых, можно определить хотя бы одну из существенных реализаций случайного поля V и найти лишь величину F . Первый способ аналогичен использованию канонического ансамбля в статистической механике, второй — использованию микроканонического ансамбля. Согласно сказанному выше, эти два подхода эквивалентны и выбор того или иного из них определяется лишь соображениями удобства в данной конкретной задаче.

*) Самоусредняемость электропроводности системы электронов в случайном поле хаотически распределенных атомов заряженной примеси была доказана В. Коном и Дж. М. Латтинджером (1957).

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР НЕУПОРЯДОЧЕННОГО ПОЛУПРОВОДНИКА

§ 1. Спектр электронов (качественные соображения)

Рассмотрим сначала структуру энергетического спектра электронов. В ряде задач физики неупорядоченных полупроводников оказывается достаточным одноэлектронное приближение. Действительно, в таких веществах, как легированные сильно компенсированные полупроводники, полупроводниковые стекла, аморфные полупроводники, концентрация свободных носителей заряда обычно невелика, так что средняя энергия взаимодействия между ними мала по сравнению с их средней кинетической энергией (последняя — порядка T). В сильно легированных вырожденных полупроводниках то же условие малости обеспечивается за счет большой концентрации носителей заряда n : средняя кинетическая энергия последних в этом случае есть энергия Ферми $F \sim n^{2/3}$, которая растет с увеличением n быстрее потенциальной [17]. Следует заметить, однако, что термин «одноэлектронное» не надо понимать буквально. Действительно, одно из проявлений взаимодействия между носителями заряда состоит в экранировании электрических полей, приложенных извне, а также созданных примесными атомами, иными структурными дефектами вещества и самими носителями заряда — как свободными, так и локализованными на дискретных уровнях. Учет этого эффекта, разумеется, необходим. При определенных условиях это можно сделать последовательно, сохраняя вместе с тем представление об одночастичном энергетическом спектре [14]. В дальнейшем мы всегда будем рассматривать электрические поля, созданные названными источниками, как экранированные по тому или иному закону, в зависимости от конкретных условий опыта и свойств образца. В настоящем параграфе мы ограничимся «одноэлектронной» постановкой задачи в указанном выше смысле. Роль корреляционных эффектов будет рассмотрена позднее (§§ 14—19, §§ IV. 13, IV. 14).

В рамках принятой постановки задачи мы приходим к уравнению Шредингера с гамильтонианом (I. 6.6). При этом функция $V(\mathbf{x})$ не периодическая; вообще говоря, она содержит и случайную часть.

Рассмотрим сначала картину, которая получается, если при определении энергетического спектра трехмерной системы случайная часть потенциальной энергии пренебречь (как указывалось в § 1.1, для этого могут быть известные основания). Мы приходим тогда к задаче о поведении электрона в заданном не периодическом поле, причем система, которой он принадлежит, имеет макроскопические размеры. В силу последнего обстоятельства очевидно, что — по крайней мере в некоторой области энергий — энергетический спектр носителей заряда будет непрерывным. При определенных соотношениях между параметрами системы в спектре могут возникнуть и запрещенные области. Если уровень Ферми попадет в одну из них, то система будет полупроводником.

В соответствии со сказанным в § 1.1, такая постановка задачи представляется особенно уместной в случае систем с преобладанием короткодействующих сил (гомеополярные материалы), коль скоро концентрация примесей и/или структурных дефектов в них достаточно мала*). При этом естественно воспользоваться одним из вариантов хорошо известного метода сильно связанных электронов [1, 3]. Расчеты такого типа были выполнены в ряде работ. Как и следовало ожидать (подробнее см. § 6), оказалось, что запрещенная зона (понимаемая так, как указывалось в §§ 1.5, 1.6) действительно может возникнуть; при этом условия ее возникновения и ширина ее определяются только свойствами атомных волновых функций и характером расположения атомов в пределах первой координационной сферы. Иначе говоря, оказалось, что решение вопроса о том, будет ли данное вещество полупроводником или металлом, определяется ближним порядком.

В качественной форме эти соображения высказывались уже давно (А. Ф. Иоффе и А. Р. Регель, 1960). Однако далеко не тривиальный вопрос о виде волновых функций электронов в неупорядоченных системах без случайного поля и о вычислении вероятностей различных процессов лишь сравнительно недавно стал предметом серьезного изучения.

Как ясно из предыдущего, в веществах рассматриваемого типа никаких «хвостов» в коэффициенте междузонного поглощения света быть не должно: ввиду исчезновения плотности состояний в запрещенной зоне вероятность междузонного оптического перехода (а с ней и коэффициент поглощения) должна обращаться в нуль при частоте ω_0 , отвечающей ширине запрещенной зоны. Иначе говоря, принятый выше приближенный

*) Роль случайного поля в материалах названного типа рассматривается в § 8. При этом получаются и количественные оценки, из которых видно, когда может быть оправдана принятая здесь аппроксимация.

подход может оказаться приемлемым лишь при рассмотрении материалов типа А) (§ I.3, п. 1), стр. 18).

Обсудим теперь, как меняется энергетический спектр системы при учете случайного поля. Здесь удобно рассматривать систему, получающуюся в результате «порчи» некоторого «идеального материала» при появлении случайного силового поля. В условиях, когда последнее создается примесными атомами, вводимыми в идеальный кристалл, эта операция имеет наглядный смысл — она состоит просто в легировании образца. В общем случае представление об идеальном материале, из которого получается рассматриваемая система, носит формальный вспомогательный характер*). При рассмотрении макроскопически однородных систем такое представление всегда можно ввести**).

Очевидно, случайный характер потенциальной энергии носителя заряда может привести к возникновению в образце беспорядочно разбросанных потенциальных ям и горбов случайной глубины (высоты) и ширины. Это особенно ясно видно в случае поля типа (I.1.6): хаотичность фаз φ_q приводит к тому, что при одних значениях Γ гармонические слагаемые в правой части (I.1.6) интерферируют с усилением, а при других — с ослаблением. В этом смысле всякое случайное поле аналогично полю, создаваемому беспорядочно распределенными атомами примеси. При достаточно большой глубине и ширине потенциальных ям в них могут образоваться локализованные электронные состояния, подобно тому как они возникают вблизи примесных атомов того или иного типа. Соответствующие уровни называют флуктуационными.

Сказанное, равно как и в дальнейшие соображения, излагаемые в этом параграфе, относится к трехмерным системам. В одномерном случае дело обстоит иначе: как известно ([19], § 45), в одномерной потенциальной яме общего вида всегда имеются дискретные уровни. Более того, можно ожидать, что в неупорядоченных одномерных материалах все дозволённые состояния квазичастиц будут локализованными. Действительно, допустим сначала, что в данном случайном поле могут возникать сколь угодно высокие и широкие горбы потенциальной энергии. Тогда электрон в одномерной системе неизбежно окажется «запертым» между двумя такими горбами и движение его будет финитным. Фактически сколь угодно широких и высоких потенциальных горбов, разумеется, не бывает. В макроскопической системе, однако, заведомо будет сколь угодно много горбов

*) Указанный подход вполне аналогичен принятому в теории поляронов [18]. Отметим, что эффекты, обусловленные непериодическим характером истинного силового поля, при этом отнюдь не обязаны быть малыми.

***) Представление о макроскопически однородной системе кажется интуитивно ясным. Точное определение дано в § 7.

конечной высоты и ширины. Здесь могут проявиться два квантовых эффекта — туннелирование сквозь барьеры и надбарьерное отражение. В материале с одинаковыми периодически расположенными барьерами первый из них обеспечил бы возможность инфинитного движения электрона по всей цепочке. В неупорядоченной системе, однако, энергетические уровни электронов в разных ямах, разделяющих потенциальные барьеры, случайно различны, благодаря чему изоэнергетическое туннелирование может оказаться невозможным (подробнее см. ниже). Зато очень важен второй эффект. Действительно, благодаря надбарьерному отражению вероятность преодоления любого из интересующих нас барьеров меньше единицы, и это ослабление постепенно накапливается. В результате рассматриваемая система в целом оказывается непреодолимой — инфинитное движение электронов невозможно*). В двумерных и трехмерных системах положение усложняется. Действительно, будем сначала рассуждать чисто классически. Тогда при достаточно большой энергии электрона найдутся «обходные пути» — все барьеры можно будет обойти, и движение будет инфинитным. Учет квантовых эффектов, однако, меняет ситуацию, ибо благодаря им понятие траектории, обходящей барьеры, строго говоря, теряет смысл. По этой причине эффект надбарьерного отражения имеет место и здесь. Можно думать лишь, что его влияние будет ослабляться с увеличением размерности системы. Классические соображения, приближенно справедливые, коль скоро мы рассматриваем электронные волновые пакеты, делают это почти очевидным: при большем числе измерений имеется больше возможностей обогнуть барьеры. В трехмерной системе имеются области как дискретного, так и непрерывного спектра, отвечающие, соответственно, локализованным и делокализованным состояниям. Картина энергетического спектра в двумерной системе пока не вполне ясна.

В соответствии со статистической гипотезой, сформулированной в § 1.4, концентрация флуктуационных уровней данной энергии пропорциональна вероятности их образования. Вычисление последней составляет весьма сложную задачу, решение которой требует тех или иных предположений модельного характера. Некоторые общие утверждения, однако, можно сделать, не производя никаких вычислений. Действительно, естественно ожидать, что вероятность возникновения флуктуационных уровней будет непрерывно зависеть от их глубины. Это означает, что

*) Для широкого класса случайных полей эти соображения могут быть оформлены в виде строгого доказательства (В. Л. Березинский, 1973; Л. А. Пастур, Э. П. Фельдман, 1974; И. Я. Гольдштейдт, С. А. Молчаног Л. А. Пастур, 1977).

в бесконечно большом образце сколь угодно близко по энергии от любого дискретного уровня окажутся и другие, дискретные же: мы имеем всюду плотный спектр дискретных уровней (локализованных состояний). Возникновение спектра такого типа составляет характерную особенность системы частиц в случайном поле (И. М. Лифшиц, 1964). По-видимому, так обстоит дело не только с носителями заряда в полупроводниках, но и с любыми другими квазичастицами [20, 21].

Подчеркнем, что близость уровней по энергии отнюдь не означает и пространственной близости соответствующих центров локализации. Действительно, в макроскопически однородной системе флуктуационная потенциальная яма, содержащая уровень с данной энергией, с равной вероятностью может возникнуть в любой точке образца. Уже по этой причине следует ожидать, что близость одновременно и в пространстве, и на оси энергии будет представлять собой весьма редкое событие. В дальнейшем (гл. III) мы увидим, что кроме чисто вероятностных соображений есть и динамические причины, не допускающие такой близости.

В зависимости от природы случайного поля и от ширины запрещенной зоны $E_c - E_v$ может реализоваться одна из двух возможностей:

а) существует точная нижняя граница спектра флуктуационных уровней: вероятность возникновения флуктуационного уровня с энергией ионизации, превышающей некоторую критическую, тождественно равна нулю;

б) точной нижней границы спектра не существует *).

Очевидно, в первом случае представление о запрещенной зоне сохраняет точный смысл: имеется область значений энергии, где плотность состояний тождественно равна нулю. Во втором случае вся энергетическая область $E_v < E < E_c$ оказывается заполненной дискретными уровнями, т. е. запрещенная зона в смысле, указанном в § 1.5, не существует вообще. Тем не менее указанная область принципиально отличается от разрешенных зон. Именно, электроны, локализованные на дискретных уровнях, могут участвовать в переносе заряда только путем перескоков: в соответствии с первой теоремой о корреляции (§ 1.5) их вклад в статическую электропроводность полностью исчезает при стремлении температуры к нулю. По этой причине область энергии, занятую дискретными уровнями, часто называют «щелью для подвижности». Для краткости и единообразия мы все же и в этом случае будем говорить о запрещенной зоне,

*) Как можно показать (И. М. Лифшиц, 1964), формально такая граница есть всегда. Фактически, однако, она может попасть за пределы запрещенной зоны. Тогда имеет смысл говорить, что реализуется случай б).

понимая ее как щель для подвижности, если не оговорено противное. При этом термины «зона проводимости» и «валентная зона» относятся только к областям непрерывного спектра электронов и дырок.

В области, занятой флуктуационными уровнями, плотность состояний имеет вид (I.6.11''') — это есть набор дельтообразных пиков. Однако весьма часто нас будет интересовать поведение функции $\rho(E)$ на интервалах энергии, больших по сравнению со средним расстоянием между соседними уровнями ΔE_λ . Действительно, как уже говорилось, при рассмотрении всего сколь угодно большого образца мы можем считать спектр уровней всюду плотным ($\Delta E_\lambda \rightarrow 0$). При этом равенство (I.6.11''') можно переписать в виде

$$\rho(E) = \sum_{\lambda} \frac{\mathcal{P}(\lambda)}{\Omega} \delta(E - E_\lambda) \Delta E_\lambda \approx \bar{\rho}(E). \quad (1.1)$$

«Огибающая» $\bar{\rho}(E)$ дается выражением

$$\bar{\rho}(E) = \sum_{\nu} \int \frac{\mathcal{P}(\nu, E_\lambda)}{\Omega} \delta(E - E_\lambda) dE_\lambda = \sum_{\nu} \frac{\mathcal{P}(\nu, E)}{\Omega}, \quad (1.2)$$

где ν содержит все квантовые числа, кроме E_λ . В отличие от точной плотности состояний, функция $\bar{\rho}(E)$ оказывается непрерывной. Разумеется, это есть следствие принятой нами аппроксимации, справедливой в указанных выше условиях.

Функция $\bar{\rho}(E)$ называется сглаженной плотностью состояний (в отличие от точной $\rho(E)$).

Процедура введения сглаженной плотности состояний, в сущности, не отличается от обычного определения плотности состояний в области непрерывного спектра в макроскопически большой системе. Различие между состояниями непрерывного и всюду плотного дискретного спектра, как и между $\rho(E)$ и $\bar{\rho}(E)$, связано со свойствами локализации волновых функций. Оно проявляется в задачах, в которых существенно рассмотрение областей конечных размеров. Такие задачи возникают, например, в теории переноса по локализованным состояниям (гл. IV); объем Ω в этом случае определяется характерной длиной прыжка, не зависящей от полного объема системы. Спектр состояний, центры локализации которых находятся в пределах областей указанного типа, уже нельзя считать всюду плотным. Соответственно точная плотность локализованных состояний в таких объемах не аппроксимируется, вообще говоря, сглаженной плотностью состояний. Так, например, обстоит дело при изучении прыжковой проводимости.

Отметим, что в теоремах о корреляции (§ I.5 и Приложение I) фигурирует именно точная плотность состояний $\rho(E)$, а не $\bar{\rho}(E)$. Последняя величина, в отличие от $\rho(E)$, не содержит информации о кинетических характеристиках системы. С другой стороны, при вычислении термодинамических величин роль Ω играет полный объем системы и (при $\Omega \rightarrow \infty$) сглаженная плотность состояний $\bar{\rho}(E)$ неотличима от $\rho(E)$. По этой причине мы часто будем опускать слово «сглаженная», делая необходимые оговорки лишь там, где могли бы возникнуть недоразумения.

Естественно ожидать, что вероятность $\mathcal{P}(\lambda)\Delta E_\lambda$ будет убывать с увеличением расстояния между уровнем E_λ и краем соответствующего непрерывного спектра. Действительно, указанное расстояние есть не что иное, как энергия ионизации уровня; большие ее значения требуют больших флуктуаций потенциальной энергии носителя заряда.

До сих пор мы говорили лишь о дискретных уровнях чисто флуктуационного происхождения. Однако потенциальные ямы достаточной глубины и ширины могут возникать не только за счет флуктуаций. Они могут быть связаны и с какими-то врожденными или искусственно введенными в образец дефектами, которым в отсутствие рассматриваемого случайного поля отвечали бы дискретные электронные (или дырочные) уровни и, следовательно, пики плотности состояний. При наличии случайного поля эти уровни размываются, приобретая конечную ширину. Соответствующие пики плотности состояний при этом могут как начисто исчезнуть, так и сохраниться; в последнем случае плотность состояний оказывается немонотонной функцией энергии.

Во избежание недоразумений здесь следует сделать два замечания.

Во-первых, поле, создаваемое совокупностью хаотически распределенных в пространстве структурных дефектов, тоже может оказаться случайным.

Во-вторых, уширение уровня, о котором здесь идет речь, не связано с хорошо известным эффектом образования примесных зон. Последний обусловлен перекрытием волновых функций электронов, которые в отсутствие перекрытия были бы локализованы вблизи отдельных ям, занимая в них одинаковые уровни. Иначе говоря, это есть чисто квантовый эффект. В данном же случае речь идет о классическом уширении, обусловленном пространственными флуктуациями потенциальной энергии носителя заряда: в разных участках образца дискретному уровню одного и того же происхождения отвечают разные значения энергии. О совокупности дискретных примесных уровней, расположенных

очень близко друг к другу (заполняющих некоторую полосу в запрещенной зоне), часто также говорят как о примесной зоне. Следует, однако, ясно представлять себе различие между двумя этими определениями. Примесная зона в первом — квантовом — смысле слова содержит состояния непрерывного спектра. Электроны, их заполняющие, могут перемещаться по образцу без активации и, следовательно, участвуют в переносе постоянного тока при сколь угодно низких температурах. Примесная зона во втором — классическом — смысле слова образована состояниями дискретного спектра*). Для перемещения электронов, их заполняющих, по всему образцу требуется некоторая энергия активации.

Представление о всюду плотно расположенных дискретных флуктуационных уровнях могло бы объяснить ряд фактов, обсуждавшихся в § 1.3. Так, например, хвост поглощения естественно было бы приписать (хотя бы частично) оптическим переходам между этими уровнями. Вместе с тем само это представление нуждается в теоретическом обосновании. Действительно, сказанное выше еще не позволяет полностью понять, почему рассматриваемые уровни остаются дискретными, а носители заряда на них — локализованными, несмотря на неизбежное перекрытие волновых функций, относящихся к различным уровням. (Напомним в связи с этим, что, согласно § 1.3, концентрация дискретных уровней в запрещенной зоне неупорядоченного полупроводника может быть отнюдь не мала.)

Суть дела можно уяснить себе, рассматривая простейший частный случай материала со случайными элементами структуры — легированный полупроводник. В отсутствие примеси потенциальная энергия электрона есть периодическая функция координат и энергетический спектр системы носит зонный характер. Пусть теперь один из нормальных атомов идеальной кристаллической решетки замещен атомом примеси. При этом нарушается пространственная периодичность потенциального поля — в зависимости от природы примесного атома вблизи него создается дополнительная потенциальная яма или потенциальный горб. Если это — яма, и притом достаточно глубокая и широкая, то в ней возникает локальный уровень (для простоты рассуждений мы ограничиваемся случаем, когда этот уровень один). При бесконечно малой концентрации примеси рассматриваемый уровень, разумеется, дискретен. При увеличении числа примесных атомов, однако, соответствующие волновые функции начинают перекрываться и, казалось бы, локальные уровни должны «размазаться» — так же, как размазываются, образуя,

*) В этих рассуждениях мы пренебрегаем собственными ширинами уровней.

например, зону проводимости, дискретные уровни нормальных атомов кристалла. Это часто используемое рассуждение, однако, содержит неточность. Дело в том, что перекрытие волновых функций электронов, занимающих дискретные уровни, с неизбежностью приводит к размытию последних в зоны, если соответствующие центры локализации изоэнергетичны и расположены в пространстве строго периодически. Эти условия в рассматриваемом примере не выполняются. Действительно, в процессе легирования атомы примеси распределяются в кристалле более или менее случайным образом, и совершенно невероятно, чтобы в кристалле большого объема все атомы примеси выстроились в идеальную периодическую решетку. Разумеется, вполне возможно образование скоплений, содержащих несколько сравнительно близко друг к другу расположенных атомов примеси. Это приводит, однако, не к размазке, а только к расщеплению уровней, связанных с отдельными атомами примеси, — вместо них возникают дискретные же уровни, принадлежащие всему скоплению. Присутствие поблизости другого аналогичного скопления маловероятно хотя бы по комбинаторным соображениям. Далее, в результате классического уширения дискретные уровни становятся, вообще говоря, неизоэнергетическими.

Из сказанного, однако, еще не следует, что размытие дискретных уровней в рассматриваемой системе вообще невозможно. Действительно, в силу принципа неопределенности между энергией и временем электрон мог бы «временно» перейти с данного уровня на другой, расположенный поблизости от первого и не изоэнергетичный с ним *). Затем могла бы последовать цепочка таких виртуальных переходов, завершающаяся в конце концов либо возвращением электрона на исходный уровень, либо реальным безактивационным переходом на другой уровень, изоэнергетичный с первым и достаточно от него удаленный пространственно.

В принципе серия таких реальных переходов могла бы сделать возможным прохождение электрона через весь сколь угодно большой образец. Это и означало бы «размазку» рассматриваемого уровня с образованием участка непрерывного спектра.

Разным реализациям случайного поля могли бы отвечать разные возможности. Таким образом, задачу о размытии дискретных примесных уровней в легированном полупроводнике следует ставить статистически: надо вычислить вероятность того, что состояние, локализованное при малой концентрации примеси, останется таковым и при увеличении ее.

*) Разумеется, сам по себе такой переход нельзя наблюдать на опыте, почему его и называют виртуальным.

Совершенно аналогично ставится и задача о флуктуационных уровнях, возникающих в случайном поле произвольной природы: надо, задавшись статистическими свойствами поля, вычислить вероятность образования в нем локализованных состояний. Причины, по которым указанная вероятность может быть конечной, в сущности те же, что и в рассмотренном выше примере примесного полупроводника: совершенно невероятно, чтобы флуктуационные потенциальные ямы образовали периодическую решетку; маловероятно, чтобы электроны, занимающие одинаковые уровни, оказались близкими и пространственно. Иначе говоря, состояния могут оставаться локализованными не благодаря отсутствию перекрытия соответствующих волновых функций, а несмотря на него.

§ 2*. «Подводные камни»

При попытке более тщательного рассмотрения задачи о флуктуационных уровнях возникают некоторые осложнения, связанные с самой природой рассматриваемой системы и неоднократно служившие источником недоразумений и ошибок.

Первое из этих осложнений связано с типом волновых функций, отвечающих дискретным уровням (если таковые существуют). В обычной квантовомеханической задаче о движении частицы в поле силового центра (не обязательно сферически симметричного) дискретным уровням соответствуют волновые функции, принадлежащие L_2 и локализованные в пространстве вблизи данного центра. В применении к рассматриваемой нами системе это утверждение, однако, нуждается в разъяснении. Действительно, мы имеем здесь не одну потенциальную яму («центр»), а множество их, причем яма одной и той же формы и глубины (типа) повторяется многократно (в пределе при $\Omega \rightarrow \infty$ — бесконечнократно), чем и обусловлено конечное значение концентрации соответствующих уровней. Это означает, что говорить о локализации волновых функций в пространстве здесь можно лишь в несколько условном смысле. Именно, надо рассматривать область конечных размеров, содержащую только одну яму данного типа.

Во избежание недоразумений подчеркнем, что в пределах рассматриваемой области может находиться (и, как правило, находится) много других потенциальных ям, уровни энергии в которых, однако, отличаются от уровней в данной яме. Ситуация становится особенно ясной в случае легированного полупроводника, когда потенциальные ямы создаются отдельными атомами примеси. При достаточно малой их концентрации каждому из атомов данной природы отвечает одна и та же система уровней (для определенности будем говорить просто об одном

уровне). При увеличении концентрации примеси, когда (см. § 1) возникает случайное поле, вступают в игру два эффекта. Во-первых, уровни энергии, соответствующие атомам одной и той же природы, но расположенным в разных местах образца, становятся, вообще говоря, случайно различными. Следовательно, этим атомам соответствуют потенциальные ямы разного типа. Во-вторых, могут возникать комплексы из нескольких примесных атомов, отстоящих друг от друга на расстояние, сравнимое с радиусом локализации электрона на отдельном атоме примеси. Такие комплексы надо рассматривать как потенциальные ямы нового типа; очевидно, образование поблизости от данного комплекса другого в точности такого же весьма маловероятно. Из сказанного следует, что линейный размер рассматриваемой области может значительно превышать среднее расстояние между атомами примеси. С другой стороны, эта область мала по сравнению с размерами всего образца. При термодинамическом предельном переходе объем ее, т. е. объем, приходящийся на одну потенциальную яму данного типа, остается ограниченным. Вместе с тем эта область велика по сравнению с атомными масштабами, и, если интересующий нас радиус локализации не слишком велик, ее можно рассматривать (по сравнению с ним!) как практически бесконечную. Очевидно, так будет обстоять дело для не слишком мелких уровней.

Таким образом, в рассматриваемой системе должны быть по крайней мере три масштаба длины. Первый из них — микроскопический. В задачах с дискретным спектром он определяется типичным значением радиуса локализации. Второй масштаб (мы будем называть его промежуточным) соответствует размерам рассмотренных только что «областей локализации». Третий масштаб — макроскопический. Он определяется размерами образца; именно в объеме, отвечающем этому масштабу, происходит полное самоусреднение. Заметим, что размеры, определяющие первый и второй из указанных масштабов, не носят абсолютного характера: они зависят от энергии электрона. Впредь, говоря о локализованных состояниях, мы будем иметь в виду принятую только что постановку задачи.

Сказанное удобно иллюстрировать с помощью выражения (I. 6.9) для одноэлектронной функции Грина. Согласно сказанному в § I. 6, в области дискретного спектра набор чисел λ состоит из самой энергии уровня $E_\lambda = W$, спинового квантового числа $\sigma_\lambda = \sigma$ и радиус-вектора центра локализации $\mathbf{R}_\lambda = \mathbf{R}$. Таким образом, часть функции Грина, соответствующая дискретному спектру, имеет вид

$$G_{\text{дискр}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = -\frac{1}{2\pi} \sum_{\mathbf{W}} \frac{1}{E - W} \sum_{\sigma, \mathbf{R}} \psi_{\mathbf{W}, \sigma}(\mathbf{x} - \mathbf{R}) \psi_{\mathbf{W}, \sigma}^*(\mathbf{x}' - \mathbf{R}). \quad (2.1)$$

Мы написали здесь аргументы волновых функций в виде $x - R$ и $x' - R$, дабы подчеркнуть, что эти функции локализованы около точек R .

Видим, что при ограничении компонент x , x' пределами указанной выше области и при не аномально большом радиусе локализации в сумме по R в правой части (2.1) заметно отличен от нуля лишь один член. Иначе говоря, дело обстоит так же, как в стандартной «одноцентровой» задаче квантовой механики.

Второе осложнение связано с самим определением понятий дискретного и непрерывного спектров. Дело в том, что разделение энергетического спектра на дискретный и непрерывный имеет строгий смысл лишь в предельном случае системы неограниченных размеров: в системе конечного объема все уровни — дискретные. Поэтому смысл термина «непрерывный» в нашей задаче нуждается в разъяснении. Суть дела, видимо, проще всего понять, рассмотрев сначала пример неслучайного силового поля (например, поля, создаваемого отдельным атомом или ионом) в большом, но конечном объеме Ω . Энергетические уровни электрона в таком поле можно разделить на две группы. В первой из них расстояния между соседними уровнями зависят от Ω , становясь сколь угодно малыми при $\Omega \rightarrow \infty$ *). Нормировочные интегралы для соответствующих волновых функций пропорциональны Ω . Это означает, что электроны, занимающие уровни первой группы, не локализованы в каких-либо ограниченных областях пространства, а «размазаны» по всему объему. Соответствующие волновые функции при $\Omega \rightarrow \infty$ выходят из класса L_2 .

Разности энергий соседних уровней второй группы также зависят от Ω — до тех пор, пока этот объем конечен. Однако при $\Omega \rightarrow \infty$ эта зависимость исчезает, а указанные разности остаются конечными. Нормировочные интегралы при $\Omega \rightarrow \infty$ также перестают зависеть от объема и остаются конечными. Это означает, что электроны, занимающие уровни второй группы, локализованы в областях конечных размеров, причем эти размеры в пределе при $\Omega \rightarrow \infty$ не зависят от Ω . Соответствующие волновые функции принадлежат L_2 как при конечном значении объема, так и при $\Omega \rightarrow \infty$.

В задаче о макроскопическом образце со случайным полем ситуация оказывается формально более сложной, ибо, как мы видели, дискретные уровни (если они существуют) образуют всюду плотный набор. Иначе говоря, при $\Omega \rightarrow \infty$ сколь угодно

*) При учете конечной ширины уровней, неизбежно возникающей в результате даже слабого взаимодействия с фононным или электромагнитным вакуумами, уровни перекрываются уже при конечном значении Ω . Этого достаточно для того, чтобы формально уже можно было считать объем системы сколь угодно большим.

малыми становятся энергетические расстояния между любыми двумя соседними уровнями, независимо от того, входят ли эти уровни в первую или во вторую группу. Однако физические причины этого для уровней той и другой группы совершенно различны. Дело в том, что различен тип волновых функций, принадлежащих уровням первой и второй групп: как и в рассмотренном выше иллюстративном примере, эти функции при $\Omega \rightarrow \infty$ или не принадлежат, или принадлежат L_2 , чем и обеспечивается деление уровней на две группы.

Очевидно, в пределе при $\Omega \rightarrow \infty$ уровни первой группы образуют непрерывный спектр, а уровни второй — дискретный. Им отвечают, соответственно, делокализованные и локализованные состояния. Для удобства мы сохраняем термины «непрерывный» и «дискретный» и при $\Omega < \infty$, вкладывая в них указанный выше смысл.

Согласно первой теореме о корреляции (см. также § IV.1) электроны, заполняющие состояния двух рассмотренных групп, вносят существенно различные вклады в статическую электропроводность: для электронов, находящихся на дискретных уровнях, необходима термическая активация.

Наконец, третье осложнение связано с соблазном заменить в формуле (2.1) суммирование по координатам \mathbf{R} интегрированием по всему образцу. При этом функция Грина оказалась бы зависящей только от разности $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$, а диагональные ее элементы $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E)$ вообще перестали бы зависеть от координат. Иначе говоря, мы пришли бы к «выводу» о совершенно равномерном распределении электронов в пространстве. Очевидно, однако, что такая замена суммирования интегрированием означает, в сущности, не что иное, как усреднение по координатам центров локализации (или по всем положениям образца в пространстве). Естественно, что вариации электронной плотности на длинах не макроскопического масштаба при этом смазываются и величина $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E)$ оказывается постоянной — в соответствии с макроскопической однородностью образца. Это, однако, не означает, что таких вариаций нет на самом деле.

Заметим, что усреднение рассмотренного только что типа мало отличается от усреднения части функции Грина, соответствующей дискретному спектру, по объему образца, т. е. по всем возможным реализациям случайного поля. В последнем случае надо было бы лишь «взвесить» слагаемые в сумме по W в соответствии с вероятностями возникновения уровней с теми или иными энергиями. Согласно (2.1) мы получили бы при этом

$$\langle G_{\text{дискр}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) \rangle = - \frac{1}{2\pi} \sum_{\sigma} \int \bar{\rho}(W) \frac{\psi_{W, \sigma}^*(\mathbf{x} - \mathbf{R}) \psi_{W, \sigma}(\mathbf{x}' - \mathbf{R})}{E - W} dW d\mathbf{R}. \quad (2.2)$$

Очевидно, правая часть (2.2) зависит только от разности $x - x'$ — усредненная таким путем одночастичная функция Грина не содержит информации о возможной локализации электронов.

§ 3. Андерсоновская локализация

Обсудим теперь критерии существования локализованных состояний в неупорядоченных полупроводниках.

Поставленную в § 1 задачу можно сформулировать и несколько иначе. Именно, пусть в начальный момент времени приготовлено состояние, в котором электрон (или иная квазичастица) локализован вблизи одной из флуктуационных потенциальных ям. В частности, это может быть и яма, созданная ионом примеси в полупроводнике обычного типа. Какова вероятность того, что при температуре $T \rightarrow 0$ электрон навсегда останется там локализованным*)?

В применении к рассматриваемой нами системе этот вопрос, равно как вопрос о том, останутся ли уровни дискретными, отнюдь не тривиален. Как мы увидим, эти два вопроса эквивалентны.

По-видимому, впервые указанная только что постановка задачи была дана П. У. Андерсоном (1958). По этой причине о возникновении локализованных состояний квазичастиц (несмотря на возможные перекрытия волновых функций) говорят как об андерсоновской локализации.

Обозначим через $a_0(t)$ амплитуду вероятности того, что электрон, находившийся в начальный момент времени (при $t = 0$) в точке $x = 0$, окажется там же и в момент $t > 0$. По определению запаздывающей (не антикоммутирующей) функции Грина $\bar{G}_r(x, x'; t)$ (еще не усредненной по случайному полю) мы имеем

$$a_0(t) = -i\bar{G}_r(0, 0; t). \quad (3.1)$$

Полагая

$$\bar{G}_r(0, 0; t) = \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iEt} \bar{G}_r(E), \quad (3.2)$$

находим

$$f(t) \equiv |a_0(t)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dv \int_{-\infty}^{\infty} dE \bar{G}_r(E + v/2) \bar{G}_r^*(E - v/2) e^{-ivt}. \quad (3.3)$$

*) Условие $T \rightarrow 0$ существенно. Действительно, в противном случае заведомо отлична от нуля (хотя, может быть, и невелика) вероятность того, что в результате тепловой активации электрон удалится от данного центра на сколь угодно большое расстояние. Этот эффект, очевидно, не имеет отношения к рассматриваемой нами задаче о локализации.

Замечая, что $\bar{G}_r^*(E) = \bar{G}_a(E^*)$ [14], и принимая во внимание, что функции $\bar{G}_r(E)$ и $\bar{G}_a(E)$ аналитичны, соответственно, в верхней и нижней полуплоскостях, видим, что функцию

$$F(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \bar{G}_r(E + \nu/2) \bar{G}_a(E - \nu/2) \quad (3.4)$$

можно аналитически продолжить в верхнюю полуплоскость переменной ν .

Нас интересует величина

$$f = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle f(t) \rangle, \quad (3.5)$$

где угловые скобки обозначают усреднение по случайному полю. Согласно (3.3) и (3.4)

$$\langle F(\nu) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \langle f(t) \rangle e^{i\nu t} dt. \quad (3.6)$$

Полагая $\nu = ip = i\omega - 2\varepsilon$ (где $\varepsilon \in \text{Re}$), получим в правой части (3.6) стандартный интеграл лапласовского типа. Как известно [22], при этом справедливо следующее соотношение (при условии, что указанные ниже пределы существуют):

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle f(t) \rangle = \lim_{\rho \rightarrow 0} \rho \langle F(\rho) \rangle.$$

В силу (3.5) и (3.4) это дает

$$f = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \langle \bar{G}_r(E + i\varepsilon) \bar{G}_a(E - i\varepsilon) \rangle. \quad (3.7)$$

Андерсоновская локализация имеет место, если $f \neq 0$. В такой форме, однако, критерий локализации недостаточно содержателен, ибо в правой части (3.7) фигурирует интеграл по всем энергиям электрона E . Желая выяснить, локализованы ли состояния с данной энергией E , мы должны изучить поведение подынтегрального выражения в (3.7) (Э. Н. Эконому, М. Х. Коэн, 1970; К. Ф. Фрид, 1972)*):

$$f(E) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \langle \bar{G}_r(E + i\varepsilon) \bar{G}_a(E - i\varepsilon) \rangle. \quad (3.7')$$

Заметим, что в выражения (3.7), (3.7') входит среднее значение от произведения двух функций Грина. Выражение (3.7) удобно

*) В работе Фрида вместо \bar{G}_r и \bar{G}_a использовалась причинная функция Грина, что представляется нам менее удобным.

переписать в несколько ином виде, воспользовавшись известным соотношением

$$\bar{G}_{r,a}(\lambda, E) = G_{r,a}(\lambda, E)[1 - n_F(\lambda)]. \quad (3.8)$$

Здесь $n_F(\lambda) = n_F(E_\lambda)$ есть функция Ферми.

В интересующем нас случае предельно низких температур множитель $1 - n_F$ ограничивает суммирование по энергии E_λ областью $E > F$, где F — уровень Ферми. Пользуясь соотношениями (3.8) и (I.6.9), получаем вместо (3.7)

$$f = \frac{1}{(2\pi)^2} \left\langle \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \sum_{\lambda, \lambda'} |\psi_\lambda(0)|^2 |\psi_{\lambda'}(0)|^2 \frac{\theta(E_\lambda - F)\theta(E_{\lambda'} - F)}{E_{\lambda'} - E_\lambda + 2i\varepsilon} \right\rangle, \quad (3.7'')$$

где θ — ступенчатая функция, а функции ψ_λ и $\psi_{\lambda'}$ берутся при $\mathbf{x} = \mathbf{x}' = 0$. Волновые функции непрерывного спектра нормированы на 1 в объеме Ω . Следовательно, $|\psi_\lambda(0)|^2 |\psi_{\lambda'}(0)|^2 \sim \Omega^{-2}$, и при $\Omega \rightarrow \infty$ правая часть (3.7'') стремится к нулю независимо от ε : локализация не имеет места. С другой стороны, в области дискретного спектра функция $\psi_\lambda(\mathbf{x})$, как и вся правая часть (3.7''), асимптотически при $\Omega \rightarrow \infty$ не зависит от объема. Видно, что при сколь угодно большом, но конечном значении Ω слагаемые с $E_{\lambda'} \neq E_\lambda$ не дают вклада в правую часть (3.7''). С другой стороны, при $E_{\lambda'} = E_\lambda$ мы получаем

$$f = \frac{1}{4\pi} \left\langle \sum_{E_\lambda > F} \left(\sum_{\mathbf{R}, \sigma} |\psi_{E_\lambda \sigma}(\mathbf{R})|^2 \right)^2 \right\rangle \neq 0.$$

В этом случае локализация имеет место.

Другой критерий локализации можно получить, рассматривая макроскопически однородный неупорядоченный полупроводник как систему, вырожденную по Н. Н. Боголюбову [23]. Для того чтобы выяснить, имеются ли локализованные состояния, надо снять вырождение по центрам локализации. Для этой цели надо ввести в гамильтониан системы H бесконечно малое локальное возмущение, полагая

$$H = H_0 + \eta V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0). \quad (3.9)$$

Здесь H_0 — гамильтониан рассматриваемой физической системы со случайным полем, η — сколь угодно малая величина, \mathbf{x}_0 — произвольная фиксированная точка, а V — функция, локализованная вблизи нуля своего аргумента; явный вид ее не играет роли. В дальнейшем мы положим для удобства $\mathbf{x}_0 = 0$,

$$V(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}). \quad (3.10)$$

В соответствии с приемом Н. Н. Боголюбова надлежит вычислить изменение электронной плотности под действием воз-

мушения ηV . Если при $\eta \rightarrow 0$ это возмущение останется отличным от нуля, в системе имеются локализованные состояния, в противном случае их нет.

Очевидно, для наших целей достаточно определить, как меняется фурье-образ одночастичной функции Грина $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E)$ под действием рассматриваемого возмущения. Согласно сказанному выше, критерий локализации можно записать в виде

$$\delta G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = O(\eta^0). \quad (3.11)$$

Обозначим через \tilde{G} функцию Грина, соответствующую гамильтониану (3.9):

$$\tilde{G} = G + \delta G.$$

Уравнение для фурье-образа \tilde{G} имеет вид

$$\tilde{G} = G + \eta G V \tilde{G}.$$

В условиях (3.10) отсюда получается

$$\langle \delta G(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E) \rangle = \eta \left\langle \frac{G(\mathbf{x}, 0; E) G(0, \mathbf{x}; E)}{1 - \eta G(0, 0; E)} \right\rangle. \quad (3.12)$$

Правая часть (3.12) не исчезает при $\eta \rightarrow 0$, если энергия E отвечает полюсу функции Грина $G(0, 0; E)$. При этом полюс имеет и функция $\delta G(\mathbf{x}, \mathbf{x}; E)$.

Итак, состояния оказываются локализованными, если усредненная одноэлектронная функция Грина имеет полюсы (а не точки ветвления) на вещественной оси. Наконец, еще один критерий, предложенный Н. Ф. Моттом (1967), состоит в следующем. Состояния считаются локализованными (не локализованными), если при $T \rightarrow 0$ вклад заполняющих их электронов в статическую электропроводность $\sigma(\omega)$ при $\omega \rightarrow 0$ равен нулю (отличен от нуля). Нетрудно видеть, что этот критерий эквивалентен предыдущим. Действительно, согласно первой теореме о корреляции статическая электропроводность при $T = 0$ равна нулю (отлична от нуля) тогда и только тогда, когда уровень Ферми попадает в область дискретного (непрерывного) спектра. Условие $\sigma(\omega) \rightarrow 0$ при $\omega \rightarrow 0$, $T \rightarrow 0$ часто рассматривается как определение области локализованных состояний.

Говоря до сих пор о дискретных уровнях, мы не обсуждали вопроса о числе электронов, способных локализоваться вблизи одного центра. На первый взгляд могло бы показаться, что это число не превышает единицы — в силу кулоновского отталкивания между электронами. Фактически, однако, можно указать три фактора, способствующие локализации двух и, может быть, большего числа электронов вблизи одного центра.

Во-первых, при локализации электронов может выигрываться энергия химической связи (см. в связи с этим § 5). Этот факт

хорошо известен в физике кристаллических полупроводников. Так, медь и золото в германии образуют многозарядные акцепторы, способные захватывать до трех электронов.

Во-вторых, при локализации двух электронов вблизи одного центра выигрывается энергия поляризации вещества, и это может перевесить проигрыш энергии из-за кулоновского отталкивания (П. У. Андерсон, 1975; Р. А. Стрит и Н. Ф. Мотт, 1975; Н. Ф. Мотт, Э. А. Дэвис, Р. А. Стрит, 1975). Возможность возникновения новой квазичастицы, представляющей собой связанное состояние такого типа в идеальной решетке, исследовалась в теории ионных кристаллов (В. Л. Винецкий, 1961; В. Л. Винецкий, Г. И. Семенец, 1975). По очевидным причинам эта квазичастица получила название биполярона; она, естественно, может как целое свободно перемещаться в пространстве. В нашей задаче речь идет о биполяроне, связанном в потенциальной яме того или иного происхождения.

Наконец, в-третьих, сами флуктуации случайного поля могут обеспечить возникновение потенциальных ям, способных удерживать два электрона (подробнее см. § 9).

Представление о двухэлектронных локальных уровнях позволяет понять, почему может практически отсутствовать сигнал ЭПР, связанный с локализованными электронами, несмотря на большую их концентрацию (§ 1.3, п. 9)): если, как следует ожидать, спины электронов, локализованных в данной яме, противоположны, то сигнал ЭПР не возникает. В то же время оптические переходы с участием этих электронов вполне возможны. Становится понятным также влияние подсветки на величину сигнала ЭПР: в результате поглощения света один из электронов, локализованных в данной потенциальной яме, может перейти в другое состояние.

К решению задачи о вероятности возникновения флуктуационных уровней мы перейдем в § 9 после того, как получим удобные для этой цели статистические характеристики случайного поля.

§ 4. Спектр фононов (качественные соображения)

Обратимся теперь к спектру атомных колебаний неупорядоченного полупроводника. Здесь следует различать два типа материалов, соответственно тому, образуют ли атомы основного вещества кристаллическую решетку или нет.

К первому типу относятся, например, сильно легированные полупроводники, включая и ряд неупорядоченных полупроводниковых сплавов. Здесь, очевидно, остается в силе обычное представление о фононах и о делении их спектра на акустические и оптические ветви. Влияние примеси на спектр фононов состоит

в увеличении затухания фононов с данным квазиволновым вектором и в возможном появлении локальных и квазилокальных колебаний (естественно, не характеризующихся никаким квазиволновым вектором*). Частоты локальных колебаний лежат выше «кристаллических» ветвей. При малой концентрации примеси эти частоты образуют дискретную совокупность. При увеличении степени беспорядка здесь, по-видимому, возможно образование участков всюду плотного спектра (И. М. Лифшиц, 1964).

Представление о плотности состояний, использованное выше для описания энергетического спектра электронов и дырок, можно ввести и для фононов. Именно, в условиях термодинамического равновесия концентрация фононов данной ветви (нумерованной индексом ν) дается выражением

$$N_{ph, \nu} = \int \frac{\rho_{ph, \nu}(\omega) d\omega}{\exp(\hbar\omega/T) - 1}. \quad (4.1)$$

Здесь $\rho_{ph, \nu}(\omega)$ есть плотность фононных состояний:

$$\rho_{ph, \nu}(\omega) = -2 \langle \text{Sp Im } D_{r, \nu}^{(-)}(\omega) \rangle, \quad (4.2)$$

где $D_{r, \nu}^{(-)}(\omega)$ — фурье-образ запаздывающей фононной функции Грина.

Как и в случае электронных состояний, дискретным частотам атомных колебаний отвечают дельтообразные особенности $\rho_{ph}(\omega)$; в участках всюду плотного спектра можно заменить в (4.1) сингулярную функцию $\rho_{ph}(\omega)$ сглаженным выражением $\rho_{ph}(\omega)$, представляющим собой огибающую дельтообразных пиков.

Ко второму типу относятся жидкие, аморфные и стеклообразные материалы. Совокупность атомов в них мы будем называть матрицей. В этом случае тепловое движение атомов при не слишком высоких температурах также можно рассматривать в основном как малые колебания около положений равновесия; в отличие от кристаллов, однако, сами эти положения равновесия могут (сравнительно редко) изменяться со временем**).

Как известно из механики, в гармоническом приближении представление о независимых друг от друга нормальных колебаниях можно ввести для любой системы колеблющихся частиц. Таким образом, представление о фононах остается в силе и здесь. Однако, поскольку положения равновесия атомов матрицы не образуют кристаллическую решетку, в данном случае нельзя характеризовать нормальные колебания с помощью ква-

*) Обзор современного состояния теории локальных и квазилокальных колебаний можно найти в книге [24].

**) Подробное рассмотрение теплового движения в жидкостях можно найти в книге [25].

зигволнового вектора. С другой стороны, представление о плотности фононных состояний (вместе с формулами (4.1) и (4.2)) сохраняет точный смысл и здесь.

Полное описание спектра фононов в рассматриваемых системах, включая и расчет функции $\rho_{\text{ph}}(\omega)$, составляет весьма сложную задачу. Некоторые выводы, однако, можно сделать без каких-либо предположений модельного характера.

Во-первых, обычные звуковые волны распространяются и в неупорядоченных средах. Это означает, что при достаточно больших длинах волн затухание их оказывается сравнительно небольшим. Коль скоро длина волны значительно превышает среднее межатомное расстояние в матрице, мы вправе рассматривать последнюю как непрерывную среду, характеризуя ее феноменологическими коэффициентами упругости и вязкости. Это приближение называется гидродинамическим. Из механики сплошных сред известно, что в указанных условиях коэффициент затухания звука пропорционален квадрату его частоты, что и оправдывает сделанное выше утверждение.

Таким образом, в применении к рассматриваемым материалам остается в силе представление о длинноволновых акустических фононах, характеризуемых, однако, не квазиволновым, а просто волновым вектором k . Последний линейно связан с частотой ω . В дальнейшем мы будем пользоваться простейшим законом дисперсии для таких фононов, полагая

$$\omega_{\text{ac}} = ks, \quad (4.3)$$

где s — скорость звука. Соответствующая плотность состояний имеет обычный вид:

$$\rho_{\text{ph, ac}} = \frac{\omega^2}{2\pi^2 s^3}. \quad (4.4)$$

Во-вторых, экспериментально установленный факт сохранения ближнего порядка в интересующих нас материалах наводит на мысль о возможности сохранить и представление о длинноволновых оптических колебаниях атомов матрицы. Эти колебания в известной мере аналогичны наблюдаемым в кристаллах, причем роль «элементарной ячейки» играет, например, совокупность атомов в первой координационной сфере (включая и центральный атом). Тепловое движение приводит, в частности, к малым изменениям относительного расположения атомов в пределах каждой из указанных «структурных единиц»; благодаря межатомному взаимодействию эти деформации неизбежно должны распространяться по всей матрице. Следует ожидать, что, коль скоро деформации в соседних структурных единицах примерно одинаковы, затухание соответствующих колебаний в системе с короткодействующими силами окажется не слишком большим. Соответственно могут распространяться волны дефор-

маций указанного выше типа. Соответствующий закон дисперсии должен иметь вид

$$\omega_{\text{opt}}(\mathbf{k}) = \omega_0 - \alpha k^2, \quad (4.5)$$

где α — постоянная, \mathbf{k} — волновой (не квазиволновой!) вектор.

Наконец, в-третьих, в рассматриваемых материалах, как и в веществах первого типа, следует ожидать возникновения локальных и квазилокальных колебаний. Они могут образовывать участки всюду плотного спектра.

На существование особых низкоэнергетических локализованных возбуждений указывают наблюдаемые на опыте (Р.К. Зеллер, Р. О. Пол, 1971) аномалии теплоемкости, теплопроводности и некоторых других свойств стекол при низких температурах ($\sim 0,1$ К). Так, теплоемкость стекол в низкотемпературной области меняется пропорционально температуре; такое поведение не удается объяснить, учитывая вклад одних лишь длинноволновых акустических фононов. В то же время учет низкоэнергетических возбуждений с медленно меняющейся плотностью состояний позволяет описать указанные аномалии. Физическая природа этих возбуждений еще до конца не выяснена. Одна из моделей связывает их с туннельными переходами атомов или групп атомов между близкими состояниями равновесия, почти вырожденными по энергии (П. У. Андерсон, Б. И. Гальперин, С. М. Варма, 1972; В. А. Филипс, 1972). Вклад в теплоемкость при низких температурах дают лишь те переходы, для которых расстояние ΔE между минимумами потенциальной энергии не превышает величины порядка T . В неупорядоченной системе величины ΔE определяются локальными конфигурациями атомов, локальными напряжениями и т. д., т. е. меняются случайным образом. Естественно ожидать, что функция распределения величин ΔE заметно меняется на энергии порядка характерной флуктуации потенциальной энергии атомов. В рассматриваемых условиях эта величина может заметно превышать T . Тогда число уровней с $\Delta E < T$, а с ним и теплоемкость пропорциональны T . Отметим, что существование рассмотренных возбуждений может сказываться и на электронных свойствах материала. Так, взаимодействие их с электронами составляет еще один механизм эффективного притяжения между электронами, приводящий к образованию локализованных двухэлектронных состояний в неупорядоченном материале (Э. Н. Эконому, К. Л. Нгаи, Т. Л. Рейнеке, 1977).

Отметим в заключение, что основные качественные соображения, высказанные в настоящем параграфе, справедливы применительно и к другим видам элементарных возбуждений. В частности, в аморфных ферромагнетиках речь могла бы идти о спектре спиновых волн (магнонов).

§ 5. Химические связи в неупорядоченных полупроводниках и модели плотности состояний

Расчет плотности состояний «из первых принципов» может представить серьезные трудности даже в задаче об идеальном кристалле. Тем более сложен он в теории неупорядоченных материалов (некоторые современные методы расчета функции $\rho(E)$ рассматриваются в гл. III). По этой причине при интерпретации экспериментальных данных особое значение приобретают соображения, основывающиеся, в конце концов, на картине химических связей в веществе. Важную роль в создании этой картины играет отмеченный в конце § 1.2 принцип локального насыщения химических связей.

Мы рассмотрим две группы материалов из числа наиболее активно исследуемых в настоящее время. К первой из них относятся гомеополярные полупроводники из элементов четвертой группы — аморфные германий и кремний; ко второй — материалы, содержащие элементы шестой группы периодической системы — селен, серу или теллур. Сюда относятся как моноатомные вещества (аморфный селен), так и халькогенидные стекла — As_2Se_3 , As_2Te_3 , As_2S_3 и другие.

Для наглядности будем пользоваться языком одноэлектронной теории твердого тела, основанной на приближении Хартри — Фока. Следует, однако, иметь в виду, что все последующие рассуждения легко переводятся и на многоэлектронный язык: надо лишь рассматривать одноэлектронные волновые функции как базис, используемый для построения соответствующих функций Грина.

Обратимся сначала к аморфным германию и кремнию. Как уже отмечалось, ближний порядок в них такой же, как и в соответствующих кристаллах. Это возможно лишь при сходном характере химических связей. Валентная оболочка атома германия (или кремния) содержит восемь состояний (s - и p -типа) и четыре электрона. При образовании кристалла волновые функции данной оболочки гибридизуются, превращаясь в эквивалентные sp^3 -орбитали ([26], гл. 3). При этом восемь имеющихся состояний расщепляются на две группы — связывающие и антисвязывающие («разрыхляющие»), по четыре состояния в каждой. Состояния первой группы ответственны за образование ковалентной химической связи; при этом, поскольку в валентной оболочке недостаёт до насыщения четырех электронов, координационное число равно четырем. Эти же состояния образуют и базис, на котором строятся блоховские волновые функции валентной зоны. Из состояний второй группы возникает зона проводимости. При переходе к аморфному веществу эта схема расщепления атомных валентных состояний остается в

силе. Отпадают лишь последующие рассуждения о функциях Блоха, но по-прежнему следует ожидать, что волновые функции валентной зоны и зоны проводимости будут сформированы в основном из связывающих и антисвязывающих орбиталей.

Существенная разница между кристаллическим и аморфным состояниями состоит, однако, в том, что во втором случае углы между валентными связями и длины этих связей не ограничены столь жесткими условиями сохранения дальнего порядка. Возможно, по этой причине примеси атомов третьей и пятой групп периодической системы не всегда играют в аморфных германии и кремнии ту важную роль, какую они исполняют в кристаллах: при замене одного из атомов основного вещества на примесный может произойти локальная перестройка структуры, с тем чтобы все валентные связи оказались насыщенными. При этом, в отличие от кристаллов, не появляются свободные «болтающиеся связи» и обусловленные ими локальные уровни. Изменение потенциальной энергии носителей заряда при внедрении примеси связано в этом случае лишь с короткодействующими силами и, может быть, со статическими деформациями материала. По соображениям, указанным в § I.1, соответствующие случайные поля, видимо, не очень сильны, если концентрация примеси не слишком велика. Иначе говоря, следует ожидать, что соответствующие материалы будут относиться к типу А) (§ I.3). Уровень Ферми в них должен располагаться вблизи середины запрещенной зоны, лишь незначительно смещаясь при изменении температуры.

Болтающиеся связи, однако, могут появиться — со всеми вытекающими отсюда последствиями — при наличии в материале вакансий или их объединений — до микрополостей включительно. Когда таких «врожденных» дефектов много, материал должен относиться к типу Б). Заметим, однако, что и здесь уровень Ферми все же может оказаться «привязанным» к середине запрещенной зоны. Причины этого обсуждаются в §§ 10, 19.

Источником болтающихся связей могут служить также примесные атомы должной природы (в Ge и Si — атомы III и V групп), если они распределяются так, что для локального насыщения связей требуется слишком большая энергия деформации, и если их действие заметно на фоне врожденных дефектов.

В качественной форме эти соображения позволяют объяснить ряд фактов, отмеченных в § I.3. Так, при длительном отжиге пленок происходит, видимо, «залечивание» структурных дефектов типа вакансий и т. д. К тому же приводит и легирование аморфного германия или кремния водородом. Действительно, проникая в материал, атомы водорода должны «зацепляться» за болтающиеся связи, образуя комплексы типа GeH или SiH.

Это приводит к исчезновению электронных локальных уровней, обусловленных врожденными дефектами. В результате исчезают сигнал ЭПР и хвост коэффициента поглощения (последний сменяется поглощением на частоте колебаний связи GeH или SiH); становятся заметными также уровни примесей.

Перейдем теперь к халькогенидным материалам. Удобно начать с рассмотрения химической связи в селене (Э. М. Музер и У. В. Пирсон, 1960; М. Кэстнер, 1972). В валентной оболочке атома селена имеется шесть электронов (в *s*- и *p*-состояниях), т. е. для насыщения недостает только двух. По этой причине следует ожидать, что при образовании кристалла или аморфного вещества с ковалентными связями координационное число будет равно двум (структурные исследования показывают, что так и обстоит дело в действительности). Заметной гибридизации волновых функций здесь не происходит, так как разность энергий между валентными *s*- и *p*-термами довольно велика, и расположенные ниже *s*-состояния вообще не играют заметной роли в образовании химических связей.

Из четырех валентных *p*-электронов для образования ковалентных связей с двумя соседними атомами используются только два. Другие два образуют неподеленную, или «уединенную» пару (английский термин — «lone pair»). Естественно ожидать поэтому, что им будут отвечать несколько большие значения энергии, нежели первым двум, образующим ковалентную связь. И действительно, при образовании кристалла селена шесть *p*-состояний расщепляются на три группы, по две орбитали в каждой. Низшую из них по энергии составляют связывающие состояния, среднюю — уединенные пары, а группу с наивысшей энергией — антисвязывающие состояния. Как и в германии и кремнии, последние служат базисом, на котором строятся блоховские волновые функции зоны проводимости. Однако, в отличие от германия и кремния, блоховские волновые функции валентной, т. е. наивысшей заполненной, зоны строятся не из связывающих состояний, а из состояний второй группы — уединенных пар (рис. 3). Как и в германии и кремнии, эта схема расщепления атомных уровней остается в силе и при образовании аморфного селена: отпадают лишь рассуждения о функциях Блоха.

В соединениях, содержащих атомы шестой группы, схема расщепления атомных уровней и образования зон может быть сложнее, чем в моноатомном селене. Все же основная характерная особенность спектра, показанная на рис. 3, сохраняется и там: вклад в волновые функции валентной зоны дают в основном не связывающие орбитали халькогенов, а уединенные пары. Иначе говоря, за энергию химической связи в рассматриваемых материалах ответственны электроны не валентной, а более глу-

бокой зоны. По этой причине волновые функции валентной зоны в халькогенидах гораздо легче деформируемы, нежели в полупроводниках с тетраэдрической координацией — германии, кремнии (С. Овшинский, 1974). Соответственно здесь тем более облегчается выполнение принципа локального насыщения валентных связей в применении к атомам примеси: в образовании этих

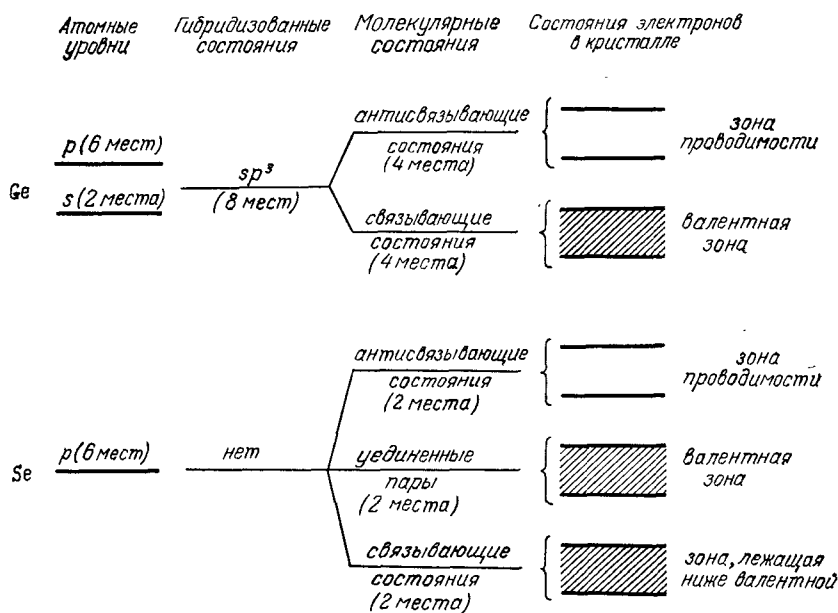


Рис. 3. Сопоставление электронных состояний в атомах и кристаллах германия и селена.

связей могут участвовать и электроны уединенных пар. Далее, облегчается (по сравнению с веществами, не содержащими уединенных пар) и участие валентных электронов в процессах со сравнительно небольшой энергией возбуждения. В частности, в халькогенидах, видимо, следует ожидать несколько больших значений электронной поляризуемости. В соответствии со сказанным в § 2, это может способствовать энергетической выгоды локализованных биполяронов.

Резюмируя все сказанное о двух рассмотренных выше типах материалов, мы приходим к картинам плотности состояний, схематически изображенным на рис. 4 (мы ограничиваемся только щелью для подвижности, обозначая через E_c и E_v , соответственно, дно зоны проводимости и потолок валентной зоны, рассматриваемых как области непрерывного энергетического спек-

тра). От границ зоны проводимости и валентной отходят хвосты плотности состояний, обусловленные наличием случайного поля (по определению мы включаем в них только уровни дискретного спектра). Далее, могут быть пики, связанные с наличием неслучайных дефектов того или иного типа. В отсутствие случайного поля эти пики были бы дельтообразны; случайное поле приводит к их уширению. Число этих пиков может быть различным, и они могут перекрываться друг с другом или с хвостами зон (соответственно рис. 4, а и 4, б). Модели такого типа предлагались рядом авторов (У. Спир, 1974; У. Спир, П. Дж. Ле Комбер, 1976; [5]).

В принципе возможен и случай, когда перекрываются и сами хвосты, отходящие от краев валентной зоны и зоны проводимости (рис. 4, в; для простоты не указаны возможные дополнительные пики). В рамках модели этого типа удалось понять ряд свойств аморфных сплавов с участием халькогенов, например $\text{Te}_{0,5}\text{Si}_{0,1}$, $\text{As}_{0,3}\text{Ge}_{0,1}$ (М. Х. Коэн, Г. Фриче, С. Овшинский, 1969). При этом предполагалось, что хвосты валентной зоны и зоны проводимости образуют, соответственно, состояния «донорного» и «акцепторного» типа. Первые из них нейтральны, будучи заполнены электронами, вторые нейтральны, будучи вакантными (заполнены дырками). Отсюда явствует, что при $T \rightarrow 0$ в материале с таким энергетическим спектром непременно имеются положительно и отрицательно заряженные центры — состояния на хвосте валентной зоны при $E > F$ и на хвосте зоны проводимости при $E < F$. Поскольку они хаотически расположены в

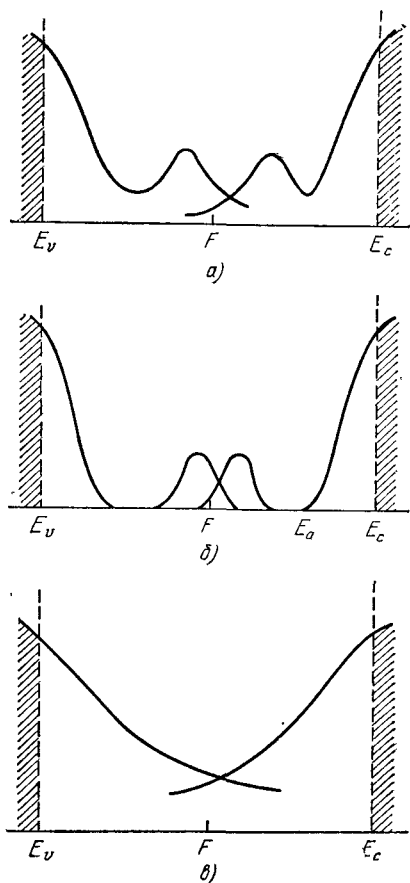


Рис. 4. Возможный ход плотности состояний в запрещенной зоне (схематически; «одноэлектронное» приближение)

материале с таким энергетическим спектром непременно имеются положительно и отрицательно заряженные центры — состояния на хвосте валентной зоны при $E > F$ и на хвосте зоны проводимости при $E < F$. Поскольку они хаотически расположены в

пространстве, при достаточно большой их концентрации возникает случайное поле кулоновского происхождения (в этом отношении рассматриваемый материал подобен сильно легированному компенсированному полупроводнику). Это поле в свою очередь влияет на число состояний на хвостах, приводя к необходимости самосогласованной постановки задачи о вычислении плотности состояний. Другое важное следствие, вытекающее из присутствия разноименно заряженных центров, обсуждается в § 16.

Локальные уровни, описываемые изображенной на рис. 4 плотностью состояний, могут быть как одно-, так и двухэлектронными. При этом, как отмечалось в § 3, взаимное притяжение электронов, обусловленное поляризацией решетки, может перевесить кулоновское отталкивание, в результате чего состояние с двумя электронами, локализованными на одном центре, оказывается энергетически более выгодным, нежели состояние с одним электроном. Так, в модели, предложенной Моттом, Дэвисом и Стритом для объяснения электрических, магнитных и оптических свойств халькогенидных стекол, двухэлектронными считаются уровни, связанные с неслучайными дефектами структуры. Видимо, эта модель позволяет успешно объяснить ряд экспериментальных результатов.

§ 6*. Неупорядоченный полупроводник без случайного поля

Как указывалось в § 1, роль случайного поля становится сравнительно несущественной в материалах с гомеоплярной связью. В частности, так может обстоять дело в «хорошо приготовленных» аморфных германии и кремнии. Рассмотрим поэтому модель случайной сетки атомов с тетраэдрической координацией (§ I. 2). При этом можно воспользоваться одним из вариантов метода сильно связанных электронов. Система описывается следующим гамильтонианом (М. Ф. Торп, Д. Уэйр, 1971):

$$H = V_1 \sum_{i, j, j'} |\Phi_{ij}\rangle \langle \Phi_{ij'}| + V_2 \sum_{i \neq i', j} |\Phi_{ij}\rangle \langle \Phi_{i'j}|. \quad (6.1)$$

Здесь каждому атому с номером i отвечают четыре базисные функции Φ_{ij} , второй индекс, j , нумерует четыре связи. Базисные функции ортонормированы, их можно представлять себе как гибридные sp^3 -орбитали. Простота модельного гамильтониана (6.1) состоит в том, что в нем учитывается взаимодействие лишь между состояниями, отвечающими разным связям одного и того же атома (член с V_1), и взаимодействие между базисными функциями, относящимися к одной и той же связи, но к разным атомам — ближайшим соседям (член с V_2). Несмотря на вариации в относительном расположении и длине

связей, матричные элементы V_1 и V_2 считаются постоянными. При такой записи гамильтониана ничего не говорится о нумерации атомов и связей системы в целом — при сохранении строгого тетраэдрического ближнего порядка система в целом неупорядочена. Однако отсутствие разброса в матричных элементах V_1 и V_2 означает пренебрежение флуктуациями потенциальной энергии электрона. Иначе говоря, речь может идти только о материале без случайного поля. По этой причине не вызывает удивления результат, полученный при рассмотрении энергетического спектра системы с гамильтонианом (6.1): при любом характере связности системы в целом в двузонном энергетическом спектре существует щель E_g величины

$$|E_g| = 2|V_2| - 4|V_1|. \quad (6.2)$$

Это можно доказать следующим образом. Запишем решение уравнения Шредингера $(H - E)\psi = 0$ в виде разложения по базисным функциям:

$$\psi = \sum_{i,j} \Phi_{ij} a_{ij}. \quad (6.3)$$

Зафиксируем какой-либо индекс i и будем рассматривать величины a_{ij} как компоненты вектора-столбца $u(i)$, строки которого отвечают различным связям $j = 1, 2, 3, 4$. Тогда коэффициенты $a_{i',j}$, отвечающие тем же связям, но четырем соседним атомам с номерами i' , можно считать компонентами другого вектора $v(i)$. С помощью этих векторов уравнение Шредингера записывается как

$$Mu(i) = -V_2 v(i). \quad (6.4)$$

Здесь

$$M = \begin{pmatrix} -E & V_1 & V_1 & V_1 \\ V_1 & -E & V_1 & V_1 \\ V_1 & V_1 & -E & V_1 \\ V_1 & V_1 & V_1 & -E \end{pmatrix}. \quad (6.5)$$

Матрице M отвечают невырожденное собственное значение $\lambda_1 = -E + 3V_1$ и трехкратно вырожденное собственное значение $\lambda_2 = -E - V_1$.

Предположим, что ни одно из λ_m ($m = 1, 2$) не превышает по модулю $|V_2|$:

$$\max |\lambda_m| < |V_2|. \quad (6.6)$$

Тогда, обозначив через $\|v\|$, $\|u\|$ нормы векторов, с учетом (6.4) имеем для каждого i

$$|V_2| \|v\| > \{\max |\lambda_m|\} \|u\| \quad (6.7)$$

и

$$\|v\| < x \|u\|. \quad (6.8)$$

Здесь $0 < x < 1$.

Покажем теперь, что сделанное предположение приводит к невозможности нормировать волновую функцию. Определим величину

$$\Delta_j(i) = |v_j(i)|^2 - |u_j(i)|^2. \quad (6.9)$$

Просуммируем $\Delta_j(i)$ по всем атомам кластера, содержащего \mathfrak{N} атомов. Согласно (6.8) мы имеем

$$0 > (x^2 - 1) \sum_i \|u(i)\|^2 > \sum_{i,j} \Delta_j(i). \quad (6.10)$$

Однако величины $\Delta_j(i)$ попарно взаимно уничтожаются для каждой связи внутри кластера. Отсюда вытекает результат

$$\sum_{i,j} \Delta_j(i) = \sum_{\substack{i,j \\ \text{по поверхн.}}} \Delta_j(i). \quad (6.11)$$

Следовательно,

$$\left| \sum_{i,j} \Delta_j(i) \right| < \sum_{i \text{ по поверхн.}} \|u(i)\|^2 (1 + x^2). \quad (6.12)$$

Суммирование в правых частях (6.11) и (6.12) ведется по номерам граничных атомов, имеющих по крайней мере одну разорванную связь. Будем теперь поэтапно наращивать число атомов в кластере таким образом, чтобы все разорванные на некотором этапе связи оказались внутренними на следующем. Определим нормировочную функцию:

$$S_n = \mathfrak{N}_n^{-1} \sum_i \|u(i)\|^2. \quad (6.13)$$

Тогда полученные выше неравенства дают

$$\frac{S_{n+1}}{S_n} > \frac{\mathfrak{N}_n}{\mathfrak{N}_{n+1}} \frac{1 + x^2}{2x^2}. \quad (6.14)$$

При добавлении новых слоев к кластеру отношение $\mathfrak{N}_n/\mathfrak{N}_{n+1}$ стремится к единице при достаточно больших n . Действительно, разность между величинами \mathfrak{N}_n и \mathfrak{N}_{n+1} возрастает с n как объем слоя единичной толщины, т. е. как n^2 , тогда как сами эти величины растут как n^3 . Поэтому левая часть в (6.14) оказывается ограниченной снизу, ибо $0 < x < 1$. Отсюда вытекает, что рассматриваемое состояние невозможно нормировать, и условие (6.6) определяет область энергий, в которой плотность состояний равна нулю. Аналогично доказывается, что неравенство

$$\min |\lambda_m| > |V_2| \quad (6.15)$$

также определяет запрещенную область энергий. Совокупность условий (6.6) и (6.15) и дает приведенную в (6.2) величину щели E_g .

Неизбежным следствием данной модели оказывается наличие двух дельтообразных пиков плотности состояний, располагающихся у краев зон. Последнее затрудняет сопоставление получаемой в этой модели плотности состояний с результатами других расчетов для аморфных структур.

§ 7. Статистические характеристики случайного поля

Физические соображения позволяют ограничить класс функций $V(\mathbf{r})$, на котором функционал $\mathcal{P}[V]$ отличен от нуля. Действительно, естественно ожидать, например, что потенциальная энергия носителя заряда будет непрерывной функцией координат (за исключением, может быть, отдельных точек), окажется — хотя бы в среднем — ограниченной по величине и т. д. Мы будем предполагать возможность разложения Фурье

$$V(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{k} V(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (7.1)$$

причем случайные коэффициенты Фурье $V(\mathbf{k})$ могут быть как обычными, так и обобщенными функциями. В силу вещественности потенциальной энергии $V(\mathbf{r})$ мы имеем $V(\mathbf{k}) = V^*(-\mathbf{k})$.

Иногда удобно пользоваться разложением не в интеграл, а в ряд Фурье. Для этой цели надо рассматривать систему большого, но конечного объема Ω , накладывая условия периодичности на его границах.

Тогда вместо (7.1) получим

$$V(\mathbf{r}) = \Omega^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} v_{\mathbf{k}}, \quad v_{\mathbf{k}} = v_{-\mathbf{k}}^*. \quad (7.1')$$

В пределе при $\Omega \rightarrow \infty$ мы имеем

$$\sum_{\mathbf{k}} (\dots) \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} (\dots).$$

Здесь точками обозначено суммируемое выражение, асимптотически при $\Omega \rightarrow \infty$ не зависящее от объема Ω . Следовательно,

$$v_{\mathbf{k}} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega^{1/2}} V(\mathbf{k}). \quad (7.2)$$

В соответствии со сказанным в § 1.4, представим потенциальную энергию V в виде суммы систематического V_s и случайного V_r слагаемых *):

$$V = V_s + V_r. \quad (7.3)$$

*) В силу линейного характера соотношения (7.1) аргументы функций V , V_s и V_r можно не указывать. Заметим, что слагаемое V_s не обязательно периодически.

Разбиение такого типа, разумеется, неоднозначно. Мы можем воспользоваться этим обстоятельством, включив среднее значение V_r в систематическую часть V_s . Именно, положим

$$V_r = \langle V_r \rangle + U, \quad \langle U \rangle = 0, \quad (7.4)$$

и включим $\langle V_r \rangle$ в систематическое слагаемое V_s .

Вообще говоря, величина $\langle V_r \rangle$ может и сама зависеть от координат. Мы ограничимся изучением макроскопически однородных систем, в которых такая зависимость отсутствует. В сущности, это есть часть определения: система со случайным полем называется макроскопически однородной, если все средние значения типа $\langle V(r_1) \dots V(r_l) \rangle$ ($l = 1, 2, \dots$) зависят лишь от $l - 1$ разностей $r_1 - r_l, r_2 - r_l, \dots$ *).

Физический смысл этого определения очевиден: все точки макроскопически однородной системы статистически равноправны. Примером такой системы может служить кристалл с постоянной в пространстве средней концентрацией примеси.

Если потенциальная энергия носителя заряда в случайном поле не зависит от типа носителя, то величину $\langle V_r \rangle$ можно положить равной нулю: это сводится лишь к определенному выбору начала отсчета энергии. При взаимодействии типа потенциала деформации значения V_r для электронов и дырок, вообще говоря, различны; при этом слагаемое $\langle V_r \rangle$, будучи включено в V_s , приводит к перенормировке ширины запрещенной зоны. Последний эффект может проявиться, например, при междузонном поглощении света (гл. V). В обоих случаях, однако, мы приходим к задаче о статистических характеристиках поля U с нулевым средним значением. Величину \mathcal{P} теперь надо рассматривать как функционал от U ; соответственно мы будем иметь дело со случайными коэффициентами Фурье u_k и $U(\mathbf{k})$, связанными с $U(\mathbf{r})$ и друг с другом соотношениями вида (7.1), (7.1') и (7.2).

Статистические свойства поля $U(\mathbf{r})$ удобно характеризовать с помощью корреляционных функций **)

$$\Psi_n(r_1, \dots, r_n) = \langle U(r_1) \dots U(r_n) \rangle, \quad n \geq 2. \quad (7.5)$$

Действительно, все измеряемые на опыте величины, зависящие от U , выражаются через функции (7.5). Так, например, средний квадрат флуктуации потенциальной энергии носителя заряда ψ_1 дается формулой

$$\psi_1 = \langle U^2(\mathbf{r}) \rangle \equiv \Psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}. \quad (7.6)$$

*) Это определение эквивалентно принятому в книге [13], но более наглядно.

**) В дальнейшем мы будем чаще всего пользоваться бинарной корреляционной функцией Ψ_2 . В тех случаях, когда это не может повести к недоразумению, индекс 2 будет для краткости опускаться.

В макроскопически однородной системе величина ψ_1 есть константа, а функции Ψ_n зависят только от разностей $r_1 - r_n$, $r_2 - r_n, \dots$. В частности, бинарная корреляционная функция $\Psi_2 \equiv \Psi$ зависит только от $r_1 - r_2 = r$. По этой причине может оказаться удобным представление Фурье:

$$\Psi(r) = \int dk e^{ikr} \Psi(k). \quad (7.7)$$

Из физических соображений следует, что корреляционная функция $\Psi(r)$ должна обращаться в нуль при $r \rightarrow \infty$. Действительно, корреляция между случайными величинами $U(r_1)$ и $U(r_2)$ должна ослабевать при раздвижении точек r_1 и r_2 (это есть проявление весьма общего принципа ослабления корреляции (Н. Н. Боголюбов, 1960)). Соответствующую характерную длину (радиус корреляции) мы обозначим через ξ_0 .

Функции Ψ_n удобно выразить через характеристический функционал *)

$$A(zI) = \left\langle \exp \left\{ -iz \int dk U(k) I(k) \right\} \right\rangle. \quad (7.8)$$

Здесь z — комплексное число, возможный знак мнимой части которого определяется условием сходимости получающихся в дальнейшем интегралов, $I(k) = I^*(-k)$ — произвольная функция.

Действительно, варьируя n раз функционал $A(zI)$ по $I(k)$, мы получаем

$$\frac{\delta^n A(zI)}{\delta I(k_1) \dots \delta I(k_n)} \Big|_{I=0} = (-iz)^n \langle U(k_1) \dots U(k_n) \rangle, \quad (7.9)$$

что в сочетании с формулой

$$U(r) = \int dk e^{ikr} U(k) \quad (7.10)$$

определяет связь рассматриваемых вариационных производных с функциями (7.5):

$$\begin{aligned} (-iz)^n \Psi_n(r_1, \dots, r_n) &= \\ &= \int dk_1 \dots dk_n \exp \left(i \sum_{j=1}^n k_j r_j \right) \frac{\delta^n A(zI)}{\delta I(k_1) \dots \delta I(k_n)} \Big|_{I=0}. \end{aligned} \quad (7.11)$$

Условие макроскопической однородности системы накладывает определенные ограничения на свойства функциональных

*) Функционал $A(zI)$ удобен и для непосредственного вычисления многих средних значений.

производных от A по I при $I = 0$. Действительно, поскольку Ψ_n может зависеть лишь от разностей аргументов $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n$, выражение под знаком интеграла в правой части (7.11) должно содержать множитель $\delta(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n)$.

Укажем два типа случайных полей, статистические характеристики которых легко вычисляются в явном виде. К первому типу относятся поля, в которых существенные флуктуации потенциальной энергии носителя заряда возникают при сложении большого числа случайных независимых ограниченных слагаемых с конечной дисперсией, причем дисперсия их суммы неограниченно возрастает при устремлении числа слагаемых к бесконечности. При этом для величин $u_{\mathbf{k}}$ справедливо многомерное распределение Гаусса

$$\mathcal{P}[U] = N \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} u_{-\mathbf{k}} \right\}, \quad (7.12)$$

где $a_{\mathbf{k}} = a_{-\mathbf{k}}$ — вещественные положительные коэффициенты, N — нормировочная постоянная, определяющаяся из условия

$$\langle 1 \rangle = 1. \quad (7.13)$$

Такие поля мы будем называть гауссовыми.

Гауссово поле возникает, например, при взаимодействии носителей заряда с низкочастотными фононами, удовлетворяющими условиям (I.1.4) (Е. В. Бурцев, 1972). Действительно, согласно сказанному в § I.1, энергию этого взаимодействия можно рассматривать как потенциальную энергию электрона в классическом случайном поле (I.1.6) (при $\omega t \rightarrow 0$). Последнее выражение удовлетворяет условиям известной теоремы Н. Н. Боголюбова [27], чем и доказывается сделанное выше утверждение. Легко вычислить бинарную корреляционную функцию для этого поля. С учетом (7.4) мы имеем

$$\Psi_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}}^2 \cos(\mathbf{q}, \mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (7.14)$$

Поскольку область суммирования по \mathbf{q} по условию ограничена лишь длинными волнами, правая часть (7.14) есть плавная функция разности $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$: все ее производные ограничены. В дальнейшем (§ 8) мы увидим, что существуют и другие случайные поля, обладающие таким же свойством.

Ко второму типу относятся поля, в которых потенциальная энергия носителя заряда дается суммой вкладов от отдельных центров, расположенных в случайных точках \mathbf{R}_i ($i = 1, \dots, N$, где N — полное число центров); при этом корреляция между

координатами различных центров отсутствует*). В указанных условиях вероятность обнаружить центр i в элементе объема $d\mathbf{R}_i$ около точки \mathbf{R}_i есть

$$d\mathcal{P}(\mathbf{R}_i) = \frac{d\mathbf{R}_i}{\Omega}, \quad (7.15)$$

а вероятность данной $(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_n)$ конфигурации всех центров дается выражением

$$d\mathcal{P}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_n) = \prod_{i=1}^n \frac{d\mathbf{R}_i}{\Omega}. \quad (7.15')$$

С такими полями приходится иметь дело в астрономии — при вычислении случайной силы, действующей на данную звезду со стороны множества других хаотически движущихся звезд [28], в физике легированных полупроводников, когда роль «центров» исполняют атомы или ионы примеси, и в ряде других задач. Поля такого типа мы будем называть пуассоновскими — по причинам, ясным из теории вероятностей. Как известно (в дальнейшем это будет явно показано), при определенных условиях пуассоновское поле переходит в гауссово. Так обстоит дело, если флуктуации концентрации примесных атомов в должном смысле малы (см. ниже, (7.32), (7.33)).

Рассмотрим сначала гауссово поле.

Тот факт, что под знаком экспоненты в (7.12) стоит простая (а не двойная) сумма, связан с макроскопической однородностью системы. Действительно, в силу соотношения типа (7.1') для U

$$u_k = \Omega^{-1/2} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} U(\mathbf{r}).$$

Подставляя это в (7.12), мы получаем

$$\mathcal{P}[U] = N \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}) B(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \right\}, \quad (7.12')$$

*) Разумеется, предположение об отсутствии корреляции носит приближенный характер. Фактически в расположениях, например, атомов примеси в полупроводнике всегда имеется корреляция. Она обусловлена хотя бы тем, что два различных примесных атома не могут находиться в одном и том же узле решетки. Учет этого обстоятельства (Р. А. Сурис, 1963; Б. Эссер, 1972) приводит к поправкам порядка $n_i d^3$, где n_i — полная концентрация примеси, а d — постоянная решетки.

Возможна также корреляция в расположении примесных центров за счет действующих между ними кулоновских сил притяжения или отталкивания. Учет этого эффекта, однако, неизбежно связан с введением дополнительных гипотез модельного характера. По этой причине мы ограничимся лишь рассматриваемым здесь простейшим случаем.

где $B(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ есть положительно определенное ядро,

$$B(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \Omega^{-1} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k}, \mathbf{r} - \mathbf{r}')}. \quad (7.16)$$

Если бы в (7.12) фигурировала двойная сумма вида

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a(\mathbf{k}, \mathbf{k}') u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'},$$

то, как легко убедиться, мы получили бы вновь выражение (7.12'), но с ядром общего вида:

$$B(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Omega^{-1} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a(\mathbf{k}, \mathbf{k}') e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r} + i\mathbf{k}'\mathbf{r}'}. \quad (7.16')$$

С другой стороны, как мы увидим, ядро B непосредственно связано с корреляционной функцией Ψ . Поэтому зависимость вида (7.16') противоречила бы условию макроскопической однородности системы.

Переходя в формуле (7.12) от суммирования к интегрированию, получим

$$\mathcal{P}[U] = N \exp \left\{ -\frac{1}{2} (2\pi)^3 \int d\mathbf{k} |U(\mathbf{k})|^2 a_{\mathbf{k}} \right\}. \quad (7.12'')$$

При этом формула (7.16) принимает вид

$$B(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = (2\pi)^3 \int d\mathbf{k} e^{-i(\mathbf{k}, \mathbf{r} - \mathbf{r}')} a_{\mathbf{k}}. \quad (7.16'')$$

Как известно [17], коэффициенты $a_{\mathbf{k}}$ определяют средние квадраты величин $u_{\mathbf{k}}$:

$$\langle |u_{\mathbf{k}}|^2 \rangle = \langle u_{\mathbf{k}} u_{-\mathbf{k}} \rangle = a_{\mathbf{k}}^{-1}. \quad (7.17)$$

Принимая во внимание (7.6), (7.7) и (7.15), видим, что

$$a_{\mathbf{k}} = (2\pi)^{-3} \Psi^{-1}(\mathbf{k}), \quad (7.18)$$

и, следовательно, гауссов функционал $\mathcal{P}[U]$ можно записать в виде

$$\mathcal{P}[U] = N \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d\mathbf{k} |U(\mathbf{k})|^2 \Psi^{-1}(\mathbf{k}) \right\}. \quad (7.19)$$

Связь ядра $B(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ с корреляционной функцией Ψ видна из (7.16'') и (7.18).

Из формулы (7.19) явствует, что в гауссовом поле все корреляционные функции Ψ_n выражаются через бинарную $\Psi_2 \equiv \Psi$. Легко вычислить также характеристический функционал $A(zI)$ (см. Приложение III). Мы получаем

$$A(zI) = \exp \left\{ -\frac{z^2}{2} \int d\mathbf{k} |I(\mathbf{k})|^2 \Psi(\mathbf{k}) \right\}. \quad (7.20)$$

Обратимся теперь к пуассоновскому полю.

Имея в виду, что в полупроводнике могут находиться примеси разных типов (например, доноры и акцепторы), удобно рассматривать индекс i как составной, полагая $i = \{a, j_a\}$, где индексы a и j_a нумеруют, соответственно, типы примеси и примесные атомы данного типа; при этом число примесных атомов типа a есть N_a и

$$j_a = 1, \dots, N_a; \quad \sum_a N_a = N. \quad (7.21)$$

Концентрацию атомов типа a обозначим через n_a :

$$n_a = N_a/\Omega. \quad (7.22)$$

Пусть потенциальная энергия носителя заряда в поле отдельного центра типа a , расположенного в точке \mathbf{R}_j , есть $V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$. Тогда

$$V(\mathbf{r}) = \sum_a \sum_{j=1}^{N_a} V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \quad (7.23)$$

Пользуясь этой формулой в применении к полупроводникам с заряженными примесями, следует принять во внимание два обстоятельства.

Во-первых, неизбежное перераспределение свободных и/или связанных зарядов в поле данного центра приводит к экранированию последнего. Это означает, что при увеличении $|\mathbf{r} - \mathbf{R}_j|$ величины $V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ достаточно быстро убывают по модулю, так что соответствующие интегралы по \mathbf{R}_j сходятся на бесконечности. Для ориентации мы будем иногда пользоваться простейшей формой экранированного потенциала, полагая

$$V_a(\mathbf{R}) = \frac{Z_a e^2}{\epsilon R} \exp(-R/r_0), \quad (7.24)$$

где Z_a — заряд данного центра в единицах элементарного заряда e , ϵ — статическая диэлектрическая проницаемость вещества, r_0 — радиус экранирования. Отметим, что экранировка, будучи коллективным эффектом, строго говоря, приводит к неаддитивности потенциала $V(\mathbf{r})$ (хотя представление его в виде суммы (7.23) и можно сохранить). Однако это обстоятельство последовательно учитывается в рамках формально одноэлектронной задачи об энергетическом спектре [14]. Далее, в общем случае статистику случайного поля, равно как и форму потенциала $V_a(\mathbf{R})$, надо определять самосогласованным путем одновременно со спектром носителей заряда. Есть задачи, когда это обстоятельство существенно [29]. Во многих случаях, однако, справедлив принятый здесь более простой подход.

Во-вторых, система в целом остается нейтральной. Это означает, что, наряду с взаимодействием носителя заряда с примесными центрами, надо принимать во внимание и взаимодействие его с размазанным зарядом («фоном») всех остальных электронов и дырок. Условие нейтральности при этом можно выразить в виде [13]

$$\int d\mathbf{R} V_{\text{полн}}(\mathbf{R}) = 0, \quad (7.25)$$

где $V_{\text{полн}}$ — полная потенциальная энергия носителя заряда. Поскольку взаимодействие рассматриваемого носителя заряда с «фоном» проявляется только в условии нейтральности, мы можем в дальнейшем явно его не рассматривать, условно заменяя равенство (7.25) более удобной формулой

$$\langle \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) = 0 \rangle. \quad (7.25')$$

Подчеркнем, что фактически обращается в нуль интеграл (7.25), а не (7.25') (почему последняя формула и заключена в кавычки). Проще, однако, пользоваться символическим «равенством» (7.25'), чем помнить, что к выражениям, линейным по V , надо добавлять еще энергию взаимодействия носителя заряда с компенсирующим фоном. Заметим также, что в случае полной компенсации, когда суммарный заряд одних лишь атомов примеси равен нулю, равенство (7.25') приобретает уже не символический, а точный смысл.

Очевидно, при этом условии (7.25') означает, что

$$\langle V(\mathbf{r}) \rangle = 0. \quad (7.25'')$$

Действительно, случайный характер функции $V(\mathbf{r})$ связан с хаотическим распределением центров в пространстве. Следовательно, «усреднение по случайному полю» сводится здесь к усреднению по всем возможным конфигурациям примеси. В силу (7.23) мы имеем

$$\langle V \rangle = \sum_a \sum_{j=1}^{N_a} \Omega^{-1} \int d\mathbf{R}_j V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \prod_{i \neq j} \int \frac{d\mathbf{R}_i}{\Omega}.$$

Заметим, что для примесей разного типа величины V_a имеют разные знаки. Для примеси данного типа все интегралы от V_a здесь одинаковы, и, следовательно,

$$\langle V \rangle = \sum_a n_a \int d\mathbf{R} V_a(\mathbf{R}). \quad (7.26)$$

Здесь введена новая переменная интегрирования $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{R}_j$. Будучи умножена на Ω , правая часть (7.26) превращается в ле-

вую часть (7.25'). Таким образом, мы вправе отождествить правую часть (7.23) с полем $U(\mathbf{r})$.

Вместо функционала $\mathcal{P}[U]$ здесь удобнее говорить о функции распределения $\mathcal{P}(U)$, определяющей вероятность данной флуктуации потенциальной энергии:

$$\mathcal{P}(U) = \prod_{i=1}^N \int \frac{d\mathbf{R}_i}{\Omega} \delta \left[U - \sum_{a,j} V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \right]. \quad (7.27)$$

Для вычисления интеграла в правой части представим δ -функцию в виде обычного разложения Фурье; тогда

$$\mathcal{P}(U) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{isU} \prod_a F_a(s), \quad (7.27')$$

где

$$F_a(s) = \left[\frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{R} e^{-isV_a(\mathbf{R})} \right]^{N_a}. \quad (7.28)$$

Дальнейшая выкладка совершенно аналогична выводу распределения Хольцмарка в астрономии [28]. Заметим, прежде всего, что, поскольку потенциал $V_a(\mathbf{R})$ убывает с увеличением R , интеграл в квадратных скобках в (7.28) пропорционален объему. По этой причине удобно переписать равенство (7.28) в виде

$$F_a(s) = \left\{ \int \frac{d\mathbf{R}}{\Omega} [e^{-isV_a(\mathbf{R})} - 1] + 1 \right\}^{N_a}. \quad (7.28')$$

Далее, нас интересует предельный случай, когда величины Ω , N и N_a неограниченно возрастают, причем

$$\lim_{\substack{N_a \rightarrow \infty \\ \Omega \rightarrow \infty}} \frac{N_a}{\Omega} = n_a < \infty. \quad (7.29)$$

Выполняя указанный предельный переход в формуле (7.28'), получаем

$$F_a(s) = \exp \left\{ n_a \int d\mathbf{R} [e^{-isV_a(\mathbf{R})} - 1] \right\}. \quad (7.28'')$$

Соответственно

$$\mathcal{P}(U) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp \left\{ isU + \sum_a n_a \int d\mathbf{R} [e^{-isV_a(\mathbf{R})} - 1] \right\}. \quad (7.27'')$$

Таким же способом можно вычислить и характеристический функционал $A(zI)$. Выполняя над равенством (7.23)

преобразование Фурье, мы получаем

$$U(\mathbf{k}) = \sum_a \sum_{j=1}^{N_a} V_a(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}, \quad (7.30)$$

где $V_a(\mathbf{k})$ есть фурье-образ функции $V_a(\mathbf{R})$; в частном случае (7.24)

$$V_a(\mathbf{k}) = \frac{Z_a e^2}{2\pi^2 \epsilon (k^2 + r_0^{-2})}. \quad (7.31)$$

Согласно (7.8), (7.15') и (7.30) в рассматриваемом случае

$$A(zI) = \Omega^{-N} \prod_{a,j} \int d\mathbf{R}_j \exp \left\{ -iz \int d\mathbf{k} V_a(\mathbf{k}) I(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \right\},$$

откуда

$$A(zI) = \exp \left\{ \sum_a n_a \int d\mathbf{R} \left[\exp \left(-iz \int d\mathbf{k} V_a(\mathbf{k}) I(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} \right) - 1 \right] \right\} \quad (7.32)$$

Если интересующие нас значения z достаточно малы, то выражение в квадратных скобках в (7.32) можно представить в виде

$$\begin{aligned} & -iz \int d\mathbf{k} V_a(\mathbf{k}) I(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} - \\ & - \frac{z^2}{2} \int d\mathbf{k} d\mathbf{k}' V_a(\mathbf{k}) V_a(\mathbf{k}') I(\mathbf{k}) I(\mathbf{k}') e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}', \mathbf{R})}. \end{aligned} \quad (7.33)$$

Интеграл по \mathbf{R} от первого слагаемого (с учетом (7.25') и (7.26)) дает нуль после суммирования по a ; соответственно

$$A(zI) \approx \exp \left\{ -\frac{z^2}{2} (2\pi)^3 \sum_a n_a \int d\mathbf{k} |V_a(\mathbf{k})|^2 |I(\mathbf{k})|^2 \right\}. \quad (7.34)$$

Это есть не что иное, как характеристический функционал гауссова поля (7.20), причем

$$\Psi(\mathbf{k}) = (2\pi)^3 \sum_a n_a |V_a(\mathbf{k})|^2. \quad (7.35)$$

Справедливость последней формулы легко проверить непосредственным вычислением (см. Приложение IV). Таким образом, пуассоновское поле сводится к гауссову, коль скоро оправдана аппроксимация (7.33). В разных задачах количественная формулировка этого условия оказывается различной — в зависимости от того, какие именно значения переменной z играют главную роль при вычислении той или иной величины.

Отметим три интересных частных случая пуассоновского поля.

а) Поле хаотически распределенных по образцу заряженных точечных центров (например, атомов примеси). В этом случае мы получаем согласно (7.35) и (7.31)

$$\Psi(\mathbf{k}) = \frac{2e^4 n_i^*}{\pi e^2 (k^2 + r_0^{-2})^2}, \quad (7.36)$$

где n_i^* — эффективная концентрация примеси (П. IV. 5).

Согласно (7.7) и (7.36) в координатном пространстве мы имеем

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{2\pi n_i^* e^4}{e^2} r_0 \exp(-r/r_0). \quad (7.37a)$$

Роль корреляционной длины ξ_0 здесь играет радиус экранирования r_0 .

б) Поле диполей, хаотически распределенных по образцу. Плечи этих полей \mathbf{d} могут быть и различными; поэтому надо говорить о диполях разных типов, нумеруя их индексом a . Под N_a и V_a в формуле (7.23) следует понимать теперь число диполей данного типа и потенциальную энергию электрона в поле отдельного экранированного диполя:

$$V_{\text{dip}}(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{\epsilon r} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) - \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r} + \mathbf{d}_a|} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r} + \mathbf{d}_a|}{r_0}\right).$$

Соответствующий фурье-образ есть

$$V_{\text{dip}}(\mathbf{k}) = \frac{e^2}{2\pi^2 \epsilon} \frac{1 - e^{-i\mathbf{k}\mathbf{d}}}{r_0^{-2} + k^2}.$$

Поскольку $V_{\text{dip}}(\mathbf{k}) = 0$ при $\mathbf{k} = 0$, условие (7.25) в этом случае удовлетворяется автоматически, чего и следовало ожидать — система нейтральна.

Для бинарной корреляционной функции мы получаем здесь

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{4\pi e^4 r_0}{e^2} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) \sum_a n_a \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[\exp\left(\frac{r}{r_0} - \frac{|\mathbf{r} + \mathbf{d}_a|}{r_0}\right) + \exp\left(\frac{r}{r_0} - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{d}_a|}{r_0}\right) \right] \right\}. \quad (7.37b)$$

в) Поле упругих деформаций, возникающих в неоднородном твердом растворе в силу флуктуаций состава, коль скоро эти флуктуации малы: средняя атомная доля примеси в каждом узле должна быть мала по сравнению с единицей. Согласно Приложению II, соответствующую бинарную корреляционную функцию можно аппроксимировать выражением

$$\Psi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (7.37b)$$

где Φ_0 — постоянная. В растворах с одним атомом в элементарной ячейке Φ_0 дается формулой (П. II. 15), в которой следует пренебречь атомной долей c по сравнению с единицей. Величину ψ_1 в случае (7.37в) надо определять по формуле (П. II. 15').

Представление о характеристическом функционале удобно использовать для феноменологического описания случайных полей, для которых явный вид функционала $\mathcal{P}[U]$ может быть неизвестен.

Рассмотрим прежде всего поля с конечным значением среднего квадрата, ψ_1 , и других аналогичных величин (см. ниже формулу (7.43)). В отличие от гауссова, будем называть их полями общего вида. В этом случае удобно представить характеристический функционал в виде

$$A(zl) = \exp \left\{ -\frac{z^2}{2} \int dk |I(k)|^2 \Phi(k) \right\} \sum_{n \geq 0} c_n H_n[F(zl)]. \quad (7.34')$$

Здесь $\Phi(k)$ — функция того же класса, что и $\Psi(k)$ (вещественная, положительная и интегрируемая), H_n — полиномы Эрмита, c_n — коэффициенты, удовлетворяющие условиям

$$\sum_{n \geq 0} c_n H_n(0) = 1, \quad c_{2m} \in \text{Re}, \quad c_{2m+1} \in \text{Im}, \quad (7.38)$$

$$F(zl) = \sum_{l \geq 2} \frac{z^l}{l!} \int dk_1 \dots dk_l \delta(k_1 + \dots + k_l) \times \\ \times \Phi_l(k_1, \dots, k_l) I(k_1) \dots I(k_l), \quad (7.39)$$

Φ_l — некоторые достаточно регулярные ядра.

Точный смысл последнего выражения состоит в следующем. Пусть

$$\Phi_l(0, \dots, 0) < \infty, \quad \xi_l \equiv \Phi_l(0, \dots, 0) \Phi^{-l/2}(0) l^{-3} < \infty, \quad (7.40)$$

а c — некоторая постоянная. Мы будем считать, что ряды *)

$$S_1(z) = \sum_{l \geq 2} \frac{z^l}{l!} \xi_l, \quad S_2(z) = \sum_{k \geq 0} c_k H_k(cS_1), \quad S_3 = \sum_k c_k H_k[F(z)] \quad (7.41)$$

сходятся при всех конечных значениях вещественного аргумента z , причем так, что интеграл

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{z} e^{-z^2} S_2(z) < \infty, \quad (7.41')$$

*) В дальнейшем (§ 9) возникают выражения именно такого типа.

а $S_3(z)$ возрастает при $z \rightarrow \infty$ не быстрее, чем экспоненциально. Условия (7.40), (7.41) заведомо выполняются для достаточно гладких случайных полей.

Наличие δ -функций в членах ряда (7.39) имеет ясный физический смысл: это есть не что иное, как отражение свойства макроскопической однородности системы. По той же причине в ряде (7.39) отсутствуют слагаемые с $l = 0, 1$.

Легко связать друг с другом функции Ψ , Φ и Φ_l . Так, формулы (7.9), (7.34') и (7.39) дают

$$\langle U(k') U(k'') \rangle = \delta(k' + k'') \{ \Phi(k') - \Phi_2(k', k'') \}, \quad (7.42)$$

откуда

$$\Psi(k) = \Phi(k) - \Phi_2(k, -k). \quad (7.42')$$

Интегрируя это выражение по k , получаем

$$\psi_1 = \varphi_1 - \int dk \Phi_2(k, -k), \quad (7.42'')$$

где

$$\varphi_1 = \int dk \Phi(k). \quad (7.43)$$

По условию

$$\varphi_1 < \infty, \quad \int dk \Phi_2(k, -k) < \infty. \quad (7.43')$$

Далее, условие ослабления корреляции на больших расстояниях в сочетании с формулой (7.7) дает

$$k^2 \oint d\Omega(k) \Psi(k) < \infty \quad \text{при } k \rightarrow 0. \quad (7.44)$$

Здесь $d\Omega(k)$ есть элемент телесного угла в пространстве «волновых векторов» k . Мы примем несколько более сильное условие, полагая

$$\Psi(k) \xrightarrow[k \rightarrow 0]{} \text{const}. \quad (7.44')$$

Это условие действительно выполняется для ряда интересных систем (см., например, (7.36)).

В случае, когда условия ограниченности (7.43') не выполняются, представление (7.34') становится неудобным. Естественно, поля такого типа возникают лишь в результате некоторых идеализаций, при отказе от которых, например, величина ψ_1 заведомо станет ограниченной. Тем не менее иногда использование таких идеализированных случайных полей может оказаться

удобным. К числу их относится, например, лоренцево поле*), для которого

$$\mathcal{P}[U] = N \left[1 + \int dk U^*(\mathbf{k}) R^{-1}(\mathbf{k}) U(\mathbf{k}) \right]^{-1}. \quad (7.45)$$

Здесь N — нормировочный множитель, $R(\mathbf{k})$ — вещественная положительная функция, удовлетворяющая условию

$$\int dk R(\mathbf{k}) \equiv r_1 < \infty. \quad (7.46)$$

Характеристический функционал в этом случае легко вычисляется непосредственно (см. Приложение V). Мы имеем

$$A(zI) = \rho K_1(\rho), \quad (7.47)$$

где через K_1 обозначена функция Макдональда, а

$$\rho = \left[z^2 \int dk |I(\mathbf{k})|^2 R(\mathbf{k}) \right]^{1/2} \quad (7.48)$$

(имеется в виду арифметическое значение корня квадратного).

Пользуясь выражениями (7.20), (7.34') и (7.47), легко найти, в частности, вероятность того, что абсолютная величина $|U(\mathbf{r})|$ будет очень велика. Именно, обозначим через U_1 заданную положительную величину (которую в дальнейшем мы будем устремлять к бесконечности). Обозначим через Q_1 вероятность того, что $|U(\mathbf{r})| > U_1$. По определению понятия вероятности мы имеем

$$Q_1 = \langle \theta[|U(\mathbf{r})| - U_1] \rangle, \quad (7.49)$$

где $\theta(\xi)$ есть ступенчатая функция вещественного аргумента ξ :

$$\theta(\xi) = \begin{cases} 1, & \xi > 0, \\ 0, & \xi < 0. \end{cases} \quad (7.50)$$

Действительно, выражение $\langle 1 \rangle$ (равное единице по условию нормировки (7.13)) можно рассматривать как объем всего пространства функций U . В правой части (7.49) стоит доля этого объема, в которой реализуется интересующее нас неравенство. Для вычисления этой величины удобно воспользоваться интегральным представлением ступенчатой функции:

$$\theta(\xi) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds}{s - i\varepsilon} e^{is\xi}, \quad \varepsilon \rightarrow +0. \quad (7.50')$$

*) Смысл названия «лоренцево поле» ясен из сравнения правой части (7.45) с обычной формулой Лоренца, описывающей спектральное распределение какой-либо физической величины.

Рассмотрим сначала случай $U(\mathbf{r}) > 0$. Подставляя (7.50') в (7.49), мы получаем

$$Q_1 = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds}{s - i\epsilon} \exp(-isU_1) \left\langle \exp \left[is \int d\mathbf{k} U(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \right] \right\rangle. \quad (7.51)$$

Последний множитель в подынтегральном выражении в (7.51) есть не что иное, как характеристический функционал (7.8) при $z = -s$ и $I = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. В случае гауссова поля он дается формулой (7.20); при этом для Q_1 получается, с учетом (7.6) и (7.7),

$$Q_1 = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds}{s - i\epsilon} \exp \left(-isU_1 - \frac{s^2}{2} \psi_1 \right). \quad (7.52)$$

При $U_1 \gg \sqrt{2\psi_1}$ это дает

$$Q_1 = \exp(-U_1^2/2\psi_1). \quad (7.53a)$$

В более общем случае (7.34') мы получаем при $U_1 \gg \sqrt{2\psi_1}$ (с учетом (7.38) и (7.43))

$$Q_1 = \exp(-U_1^2/2\psi_1). \quad (7.53б)$$

Наконец, в случае лоренцева поля подстановка выражения (7.47) в интеграл (7.51) дает (при $U_1 \gg \sqrt{r_1}$)

$$Q_1 = (1 + U_1^2 r_1^{-1})^{-1}; \quad (7.53в)$$

параметр r_1 здесь дается формулой (7.46).

Пусть теперь $U(\mathbf{r}) < 0$. Тогда для Q_1 получается прежняя формула (7.51), в которой следует лишь изменить знак в последнем множителе: теперь фигурирует характеристический функционал (7.8) при $z = +s$ и $I = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. Согласно (7.20), (7.47) и (7.48) в гауссовом и лоренцевом полях при этом получаются прежние результаты (7.53a) и (7.53в). В случае поля общего вида формула (7.34'), вообще говоря, несимметрична относительно замены $z \rightarrow -z$. Однако при $U_1 \rightarrow \infty$ существенную роль в (7.51) играют малые значения s (т. е. z). Соответственно в сумме по n в правой части (7.34') остается лишь слагаемое с $n = 0$, и для Q_1 вновь получается выражение (7.53б).

Таким образом, во всех трех случаях вероятность того, что случайный потенциал $U(\mathbf{r})$ будет очень велик по модулю, оказывается исчезающе малой.

§ 8. Собственное случайное поле в неупорядоченных полупроводниках

При изучении эффектов, обусловленных воздействием случайного поля на носители заряда, важно бывает знать, каковы характерные длины, на которых заметно изменяется это поле.

Известное представление об этом можно получить, исследуя введенную в предыдущем параграфе бинарную корреляционную функцию $\Psi(r)$ *). Как мы видели, можно выделить три типа случайных полей, возникающих в неупорядоченных материалах.

Первый тип характеризуется бинарной корреляционной функцией вида (7.37а) или (7.37б). Поле такого типа естественно назвать кулоновским. Оно характерно, например, для сильно легированных полупроводников.

Второму типу соответствует бинарная корреляционная функция вида (7.37в). Такие поля мы будем называть δ -образными. Наконец, пример бинарной корреляционной функции третьего типа дается формулой (7.14). Поскольку сумма в правой части (7.14) охватывает лишь не слишком большие волновые векторы, функция $\Psi(\mathbf{r})$ здесь ведет себя достаточно плавно. Точный смысл этого выражения следующий. Введем, наряду с параметром ψ_1 , (7.6), еще величину

$$\psi_2 = \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{r}'} \Psi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}' = \mathbf{r}} \equiv \frac{1}{2} \langle (\nabla U)^2 \rangle \quad (8.1)$$

и обозначим через m эффективную массу электрона (дырки), соответствующую вспомогательной задаче с периодическим полем (см. ниже). Тогда интересующее нас условие можно записать в виде

$$\frac{\hbar^2 \psi_2}{4m\psi_1^{3/2}} \ll 1. \quad (8.2)$$

Аналогичные соотношения связывают и средние значения величин, содержащих более высокие степени производных или производные более высокого порядка. Смысл этих соотношений очевиден: пространственные производные случайной потенциальной энергии в среднем малы — тем меньше, чем выше их порядок. Случайное поле, удовлетворяющее условию (8.2) и ему аналогичным, называется гладким**). Один пример его нам известен — это поле, созданное совокупностью звуковых волн со случайными амплитудами и фазами. Другой пример будет рассмотрен в конце этого параграфа.

*) Если поле гауссово, то бинарная функция дает исчерпывающую его характеристику, ибо все корреляционные функции высших порядков явно через нее выражаются. При рассмотрении полей другого типа ситуация оказывается более сложной; однако и там поведение функции $\Psi(\mathbf{r})$ позволяет в известной мере судить и о качественных чертах высших корреляционных функций. Заметим также, что для решения ряда задач только бинарная корреляционная функция и нужна.

**) Заметим, что кулоновское поле не гладкое: как легко убедиться, производные от функций (7.37а), (7.37б) имеют особенности при $\mathbf{r} \rightarrow 0$. Это есть не что иное, как отражение хорошо известной сингулярности кулоновского поля точечного заряда в точке его нахождения.

Ряд систем, в которых реализуются случайные поля названных выше типов, был указан в § 7. В этом параграфе мы исследуем природу случайных полей, возникающих в аморфных и стеклообразных полупроводниках, а также в полупроводниках с радиационными дефектами или полумакроскопическими дефектами технологического характера (В. Л. Бонч-Бруевич, В. Д. Караиванов и Я. Г.Пройкова, 1979).

Обратимся сначала к аморфным и стеклообразным полупроводникам. Как и в кристаллических материалах, случайные поля здесь могут создаваться примесями или иными дефектами, приводящими к отклонению структуры атомной матрицы от идеального стекла (§ 1.2). Эти поля, в сущности, такие же, как и в кристаллах: часть их уже была изучена в § 7. Нас здесь будет интересовать поле, обусловленное случайными элементами структуры самого идеального стекла. Наличие такого поля есть неотъемлемое свойство рассматриваемого материала. По этой причине его естественно назвать собственным.

Рассматривая потенциальную энергию носителя заряда в случайной сетке атомов, удобно прежде всего заменить потенциал, создаваемый каждым атомом, псевдопотенциалом. Ограничимся сначала одноатомными материалами в аппроксимации локального псевдопотенциала, не зависящего от энергии*). Тогда полный псевдопотенциал V дается выражением [30]

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i), \quad (8.3)$$

где $v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ — псевдопотенциал атома, расположенного в точке \mathbf{R}_i ; индекс i нумерует атомы, полное число которых в объеме Ω равно N . В дальнейшем мы будем считать $N \rightarrow \infty, \Omega \rightarrow \infty, N/\Omega = \Omega_0^{-1} < \infty$ (очевидно, Ω_0^{-1} есть средняя концентрация атомов).

Введем фурье-образы полного псевдопотенциала и атомных псевдопотенциалов, полагая

$$V(\mathbf{q}) = \Omega^{-1} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} V(\mathbf{r}), \quad (8.4)$$

$$v(\mathbf{q}) = \Omega_0^{-1} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} v(\mathbf{r}). \quad (8.5)$$

Пользуясь соотношениями (8.3) — (8.5), легко находим

$$V(\mathbf{q}) = v(\mathbf{q}) s(\mathbf{q}), \quad (8.6)$$

где $s(\mathbf{q})$ есть структурный фактор:

$$s(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i). \quad (8.7)$$

*) Первое и третье из этих ограничений будут в дальнейшем сняты.

В неупорядоченной системе псевдопотенциал V ответствен как за возникновение зонного энергетического спектра, так и за появление дискретных уровней в запрещенной зоне и за рассеяние делокализованных носителей заряда при низких температурах. Строго говоря, все эти эффекты следует описывать совместно. Удобно, однако, выделить из набора коэффициентов $V(\mathbf{q})$ часть, описывающую вспомогательную задачу с периодическим полем. Для этой цели следует положить

$$V(\mathbf{q}) = V_{\text{всп}} + V_1, \quad (8.8)$$

При этом $V_{\text{всп}} \neq 0$ лишь для некоторого дискретного набора векторов \mathbf{q} , соответствующих векторам обратной решетки \mathbf{b}_n вспомогательной задачи с периодическим полем ($\mathbf{q} = \mathbf{b}_n$)*).

Задача о вычислении параметров случайного поля сводится теперь к усреднению величин $s(\mathbf{q})$ и $s(\mathbf{q})s(\mathbf{q}')$ при значениях \mathbf{q} и \mathbf{q}' , не входящих в определение $V_{\text{всп}}$.

Заметим, что согласно (8.8) функция $V_{\text{всп}}$ — также случайная. Однако, как объяснялось в § 1.7, измеряемые на опыте параметры зонного спектра суть величины не случайные. Легко убедиться также, что слагаемые V_1 и $V_{\text{всп}}$ статистически независимы: $\langle V_{\text{всп}} V_1 \rangle = 0$. По этой причине мы вправе усреднять только V_1 , не обращая внимания на $V_{\text{всп}}$.

В дальнейшем мы не будем делать различия между V_1 и V , имея в виду возможность не только указанной выше приближенной постановки задачи.

Обозначим через $n_{\text{ат}}(\mathbf{r})$ плотность числа частиц в физически бесконечно малом объеме около точки \mathbf{r} (среднее значение этой величины есть Ω_0^{-1}). Как известно ([17], § 116),

$$\langle n_{\text{ат}}(\mathbf{R}_1) n_{\text{ат}}(\mathbf{R}_2) \rangle = \Omega_0^{-2} \omega(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) + \Omega_0^{-1} \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2), \quad (8.9)$$

где ω есть бинарная корреляционная функция атомов. В пренебрежении корреляцией в расположении атомов она равна единице. Такая аппроксимация использовалась в предыдущем параграфе при рассмотрении случайного поля атомов примеси. В данном случае она, однако, не оправдана.

*) Согласно (8.4)—(8.7)

$$V_{\text{всп}} = \sum_n e^{i\mathbf{b}_n \mathbf{r}} v(\mathbf{b}_n) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e^{-i\mathbf{b}_n \mathbf{R}_i}$$

Полагая $\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{a}_n$, где \mathbf{a}_n — векторы прямой вспомогательной решетки, видим, что $V_{\text{всп}}(\mathbf{r}) = V_{\text{всп}}(\mathbf{r}' + \mathbf{a}_n)$.

В анизотропной системе функция ω могла бы зависеть и от направления вектора \mathbf{r} . Для дальнейшего существенно лишь, что мы рассматриваем систему без дальнего порядка. Отсюда следует, что корреляция между атомами, достаточно далеко отстоящими друг от друга, должна исчезать, т. е. должно иметь место условие $\omega(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 1 \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$.

В силу (8.9) мы получаем

$$\langle s(\mathbf{q}) \rangle = \delta_{\mathbf{q}, 0} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \delta(\mathbf{q}) \quad (8.10)$$

и, далее,

$$\langle s(\mathbf{q}) s(\mathbf{q}') \rangle = \frac{(2\pi)^3}{N\Omega} \delta(\mathbf{q} + \mathbf{q}') [S(\mathbf{q}) + (2\pi)^3 \Omega_0^{-1} \delta(\mathbf{q})]. \quad (8.11)$$

Здесь

$$S(\mathbf{q}) = 1 + \Omega_0^{-1} \int d\mathbf{r} [\omega(\mathbf{r}) - 1] e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \quad (8.12)$$

Функция S (так называемая функция интерференции) хорошо известна в теории рассеяния рентгеновских лучей, электронов и нейтронов [31]. Она определяет вероятность упругого рассеяния с изменением волнового вектора на \mathbf{q} . Значения ее для ряда волновых чисел получаются непосредственно из опыта.

Для дальнейшего существенны два точных соотношения, которым удовлетворяет функция $S(\mathbf{q})$ при $\mathbf{q} \rightarrow \infty$ и $\mathbf{q} \rightarrow 0$.

Во-первых, в соответствии с указанным выше свойством функции $\omega(\mathbf{r})$, $S(\mathbf{q}) \rightarrow 1$ при $\mathbf{q} \rightarrow \infty$.

Во-вторых, для термодинамически равновесных систем [17]

$$\lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} S(\mathbf{q}) = \Omega_0^{-1} T\kappa, \quad (8.13)$$

где κ — изотермическая сжимаемость.

В применении к стеклообразным и аморфным веществам, а также к неупорядоченным твердым растворам справедливость равенства (8.13) не очевидна, так как флуктуации концентрации атомов там могут носить и нетермодинамический характер. Величину $S(0)$ для этих систем следует рассматривать как эмпирически определяемый параметр (он может и превышать $\Omega_0^{-1} T\kappa$).

Комбинируя теперь формулы (8.3), (8.4), (8.6), (8.11) и (8.12), легко находим

$$\Psi(r) = \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} |v(\mathbf{q})|^2 S(\mathbf{q}) \quad (8.14)$$

или, при $\omega(\mathbf{r}) = \omega(r)$ и $v(\mathbf{q}) = v(q)$,

$$\Psi(r) = \frac{\Omega}{2\pi^2 r} \int_0^\infty q \sin(qr) \cdot S(q) v^2(q) dq. \quad (8.14')$$

Удобно ввести здесь безразмерные переменные, полагая

$$q = 2k_F x, \quad k_F = (3\pi^2 z \Omega_0^{-1})^{1/3},$$

где z — число валентных электронов на атом. Тогда

$$\Psi(r) = \frac{12z}{\rho} \int_0^\infty x^2 v^2(x) S(x) \sin(\rho x) dx, \quad (8.14'')$$

где $\rho = 2k_F r$.

В формулах (8.14) — (8.14'') уже выполнен предельный переход от суммирования к интегрированию по компонентам \mathbf{q} . При этом можно не заботиться об исключении конечного (в крайнем случае счетного) числа слагаемых с $\mathbf{q} = \mathbf{b}_n$, ибо функция $S(\mathbf{q})$ гладкая*).

Формулы (8.12) — (8.14) легко обобщаются на случай соединения. Пусть индексы a, a' нумеруют типы атомов (или ионов). Тогда вместо одной корреляционной функции ω появляется набор $\omega_{aa'}(\mathbf{r})$ и, соответственно, вместо $S(\mathbf{q})$ мы имеем дело с функциями

$$S_{aa'}(\mathbf{q}) = \delta_{aa'} + (\Omega_a^{-1} \Omega_{a'}^{-1})^{1/2} \int d\mathbf{r} [\omega_{aa'}(\mathbf{r}) - 1] e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \quad (8.15)$$

Здесь Ω_a^{-1} есть средняя концентрация атомов данного типа, а $\delta_{aa'}$ — символ Кронекера.

При $q \rightarrow \infty$ мы имеем $S_{aa'} \rightarrow \delta_{aa'}$; далее (в термодинамически равновесной системе),

$$\lim_{q \rightarrow 0} S_{aa'}(\mathbf{q}) = T\kappa (\Omega_a \Omega_{a'})^{-1/2}. \quad (8.16)$$

Для корреляционной функции случайного поля получаем теперь

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{a, a'} (\Omega_a \Omega_{a'})^{1/2} \int d\mathbf{q} S_{aa'}(\mathbf{q}) v_a(\mathbf{q}) v_{a'}(-\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \quad (8.17)$$

*) Заметим, однако, что при необходимости выполнять в дальнейшем численное интегрирование это обстоятельство следует учитывать, ибо тогда интеграл заменяется конечной суммой.

Формулы (8.14) и (8.17) выражают бинарную корреляционную функцию через атомные псевдопотенциалы, характеризующие структуру данного материала, и через функции $S_{aa'}$, непосредственно определяемые на опыте.

Заметим, что возможные эффекты ближнего порядка учитываются здесь автоматически. Они характеризуются функциями $w_{aa'}(\mathbf{r})$, т. е. в конечном счете величинами $S_{aa'}(\mathbf{q})$.

Атомные псевдопотенциалы известны для многих элементов, и функции $v_a(\mathbf{q})$ можно считать заданными либо таблично, либо графически, либо с помощью интерполяционных формул того или иного типа. Комбинируя их с экспериментальными данными для $S_{aa'}(\mathbf{q})$, мы могли бы рассчитать и функцию $\Psi(\mathbf{r})$. В рассматриваемой задаче, однако, можно обойтись и без этого.

Действительно, рассмотрим сначала гомеоплярные материалы. Мы имеем здесь систему с короткодействующими силами. Поэтому единственные значения энергии и длины, которые могут входить в формулы (8.14) и (8.14''), — порядка атомных. Иначе говоря, в задаче нет параметров, которые могли бы обеспечить доминирующую роль малых волновых чисел в правой части (8.14). Отсюда явствует, что поле может оказаться гладким лишь в результате случайных соотношений между параметрами функций S и v . Видимо, в таких веществах гладкое случайное поле может появиться лишь при наличии структурных дефектов. Мы вернемся к этому вопросу в конце данного параграфа.

Рассмотрим теперь асимптотику функции $\Psi(\mathbf{r})$ при $r \rightarrow \infty$. Для этой цели удобно воспользоваться координатным представлением. По определению ($\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}$)

$$\Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \langle (V(\mathbf{r}_1) - \langle V \rangle)(V(\mathbf{r}_2) - \langle V \rangle) \rangle = \langle V(\mathbf{r}) V(0) \rangle - \langle V \rangle^2. \quad (8.18)$$

Подставляя сюда выражение (8.3), находим

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = & \int \prod_k \frac{d\mathbf{R}_k}{\Omega} \left\{ \sum_{i=1}^N v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i) v(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_i) + \right. \\ & \left. + \sum_{\substack{i, j \geq 1 \\ (i \neq j)}}^N v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i) v(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j) \omega(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) \right\} - \\ & - \left[\int \prod_k \frac{d\mathbf{R}_k}{\Omega} \sum_{i=1}^N v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i) \right]^2. \end{aligned}$$

Интегралы по всем переменным \mathbf{R}_k , кроме входящих в аргументы атомных псевдопотенциалов, равны Ω , а интегралы, содержащие псевдопотенциалы, не зависят от нумерации индексов

при \mathbf{R} . Следовательно,

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = & \frac{N}{\Omega} \int d\mathbf{R} v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}) v(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}) + \\ & + \frac{N(N-1)}{\Omega^2} \int d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 [\omega(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) - 1] v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_1) v(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_2) + \\ & + \frac{N(N-1)}{\Omega^2} \int d\mathbf{R}_1 v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_1) \int d\mathbf{R}_2 v(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_2) - \frac{N^2}{\Omega^2} \left(\int d\mathbf{R} v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}) \right)^2. \end{aligned}$$

С точностью до слагаемых $\sim \Omega^{-1}$, исчезающих при термодинамическом предельном переходе, последние два слагаемых взаимно уничтожаются, и мы получаем после очевидной замены переменных

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = & \Omega_0^{-1} \int d\mathbf{R} v(\mathbf{R}) v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 + \mathbf{R}) + \\ & + \Omega_0^{-2} \int d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 [\omega(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) - 1] v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_1) v(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_2). \quad (8.19) \end{aligned}$$

Согласно сказанному ранее, первое слагаемое в правой части (8.19) заметно отлично от нуля, лишь если расстояние $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ — порядка атомного. Поведение второго слагаемого зависит от того, как быстро происходит убывание функции $\omega(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) - 1$ при $|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2| \rightarrow \infty$. Из экспериментальных данных, указанных в § 1.2, вытекает, что в аморфных германии и кремнии функция $\omega(r)$ практически обращается в единицу на длине r_c , не превышающей нескольких межатомных расстояний. Естественно ожидать, что так будет обстоять дело и в других аморфных материалах с короткодействующими силами. С другой стороны, представление о случайном поле часто используется в задачах, в которых существенны значительно большие длины. Так обстоит дело при исследовании поведения носителей заряда, занимающих не слишком сильно локализованные состояния в щели для подвижности (в том числе и у края подвижности), а также носителей заряда с энергиями, принадлежащими непрерывному спектру (не слишком далеко от края подвижности). В этих условиях имеет смысл аппроксимировать корреляционную функцию выражением (7.37в), причем в силу (8.14)

$$\Phi_0 = \int \Psi(r) dr = \Omega_0 v^2(0) S(0). \quad (8.20)$$

Обратимся теперь к гетерополярным материалам (в частности, стеклам). При наличии ионной связи в качестве $v_a(\mathbf{q})$ в формуле (8.17) следует использовать экранированные псевдопотенциалы ионов. Для большинства приложений в физике стеклообразных полупроводников интерес представляет, по-ви-

димому, поведение корреляционной функции на расстояниях, значительно превышающих атомные. При этом экранирование валентными электронами сводится просто к появлению в знаменателе $v_a(\mathbf{q})$ безынерционной диэлектрической проницаемости вещества ϵ , а обрыв $v_a(\mathbf{r})$ на больших расстояниях обеспечивается одним из механизмов экранирования (свободными или локализованными носителями или примесями), хорошо известных в физике полупроводников. Все эти механизмы можно учесть феноменологическим путем, вводя в выражение для $v_a(\mathbf{q})$ радиус экранирования r_0 (явные выражения для последнего в разных условиях хорошо известны). Далее, поскольку химическая связь в интересующих нас материалах может быть не чисто полярной, удобно ввести эффективные заряды ионов Z_a (в единицах элементарного заряда e). Числа Z_a характеризуют долю полярной связи и могут быть и нецелыми. Таким образом,

$$v_a(\mathbf{q}) = - \frac{4\pi Z_a e^2}{\epsilon \Omega_a (q^2 + r_0^{-2})}. \quad (8.21)$$

Подставляя выражение (8.21) в правую часть (8.17), мы получаем

$$\Psi(r) = \frac{8e^4}{\epsilon^2} \sum_{a, a'} \frac{Z_a Z_{a'}}{\sqrt{\Omega_a \Omega_{a'}}} \left[A_{aa'}(R) + \frac{r_0}{R} B_{aa'}(R) \right], \quad (8.22)$$

где $R = r/r_0$, $A_{aa'} = \frac{\pi r_0}{4} \delta_{aa'} \exp(-R)$, $B_{aa'} = \int_0^\infty \frac{x \sin Rx}{(1+x^2)^2} F_{aa'}(x) dx$,

$F_{aa'}(x) = S_{aa'}(x) - \delta_{aa'}$, $x = q/2k_F$.

Функция $F_{aa'}(x)$ стремится к нулю при $x \rightarrow \infty$, однако характер этого стремления зависит от асимптотики разности $\omega_{aa'}(r) - 1$ при $r \rightarrow \infty$. При этом интеграл $B_{aa'}$ не обязательно представляет собой гладкую функцию \mathbf{r} : производные от него по компонентам вектора \mathbf{r} , начиная с некоторого порядка, могут оказаться неограниченными при $r \rightarrow 0$. Эта функция, однако, более гладкая, нежели $A_{aa'}(R)$, — уже лапласиан от последней расходится при $R \rightarrow 0$. Еще более существенно то обстоятельство, что при $r_c \ll r_0$ слагаемое $(r_0/R) B_{aa'}$ оказывается малым по сравнению с $(\pi/4)r_0 e^{-R}$, и в ряде задач им можно пренебречь.

Таким образом, возвращаясь к обычным единицам, мы получаем

$$\Psi(r) = \frac{2\pi r_0 e^4}{\epsilon^2} e^{-r/r_0} \sum_a \frac{Z_a^2}{\Omega_a}. \quad (8.23)$$

Формально это есть не что иное, как корреляционная функция кулоновского случайного поля. Смысл этого результата совершенно ясен: в сущности, мы имеем здесь тоже неупорядоченную систему заряженных частиц. Любопытно, однако, что корреляционные эффекты влияют лишь на сравнительно гладкую часть случайного поля, описываемую функцией $(r_0/R) B_{aa'}$.

Эффективная концентрация ионов n_i^* (сравните с (7.37a)) дается здесь выражением

$$n_i^* = \sum_a Z_a^2 \Omega_a^{-1}. \quad (8.24)$$

Поскольку величины Ω_a суть объемы, приходящиеся на один атом (типа a) основного вещества, правая часть (8.24) может быть довольно большой. Так, при $a = 1, 2$, $Z_1 = -Z_2 = 0, 1$ и $\Omega_a = 10^2$ ат. ед. мы имеем $n_i^* \approx 10^{21}$ см $^{-3}$. В таких условиях оказываются оправданными аппроксимации, принятые в теории сильно легированных полупроводников.

Обсудим теперь роль энергетической зависимости псевдопотенциала. Интересуясь лишь сравнительно небольшой областью энергий вблизи границ запрещенной зоны, E_c и E_v , мы вправе положить, соответственно, для валентной зоны и для зоны проводимости $\delta V = \delta V(E_v)$ и $\delta V = \delta V(E_c)$. Таким образом, бинарная корреляционная функция приобретает зонные индексы, и, например, вместо одного параметра ψ_1 появляются три:

$$\psi_i^j = \langle \delta V(E_i) \delta V(E_j) \rangle; \quad i, j = c, v. \quad (8.25)$$

Иначе говоря, дело обстоит так, как если бы на электроны и дырки действовали различные случайные поля.

Наконец, обратимся к вопросу о происхождении гладкого случайного поля. Заранее ясно, что оно может возникнуть либо в системе с далекодействующими силами, либо в условиях, когда имеется систематическая причина, обеспечивающая эффективное обрезание коротковолновых компонент поля. Как мы видели в § 4, последний случай реализуется, например, при взаимодействии носителей заряда с длинноволновыми фононами. Нас здесь будет интересовать система с кулоновскими силами. Гладкое поле здесь может возникнуть в условиях, когда набор точечных зарядов можно заменить непрерывным распределением плотности заряда, т. е. в условиях, когда оправдан подход, характерный для макроскопической электродинамики. Примеры неслучайных силовых полей такого типа хорошо известны — достаточно вспомнить об искривлении зон вблизи разного рода контактов. Интересующее нас случайное поле возникает, например, в результате случайных сравнительно крупномасштабных вариаций концентрации примеси или иных заря-

женных структурных дефектов (не обязательно точечных) при переходе от одного физически малого объема к другому. При этом в пределах указанных объемов концентрация дефектов практически постоянна, а условие локальной нейтральности может и не иметь места. Дефекты такого типа могут иметь технологическое происхождение (Ж. Л. Робер, Б. Пистуле, А. Раймон, Р. Л. Аломбар, К. Бернар, К. Бускэ, 1978). Они возникают также в результате облучения полупроводников нейтронами (Р. Л. Госсик, 1950). «Механизм» возникновения случайного поля удобно проиллюстрировать на одном специальном примере, близком к модели Госсика.

Пусть мы имеем набор хаотически разбросанных сферических областей радиуса R в полупроводнике, легированном донорами. Флуктуация концентрации доноров в пределах каждой из областей есть δN_d ; с ней связана избыточная концентрация экранирующих электронов $\delta n = n_0 [\exp(e\varphi/T) - 1]$, где φ — электростатический потенциал, n_0 — средняя концентрация электронов (использование Больцмановской статистики здесь не носит принципиального характера: при отказе от него изменилось бы лишь выражение для фигурирующего в дальнейшем радиуса экранирования r_0). Будем считать, что рассматриваемые объемы не перекрываются и, как уже говорилось, содержат много частиц, т. е. концентрация их N и размер R удовлетворяют следующим неравенствам:

$$NR^3 \leq 1, \quad \frac{4\pi}{3} R^3 \delta N_d \gg 1. \quad (8.26)$$

Допустим для простоты, что $|e\varphi| \ll T$. Тогда потенциал отдельной области дается выражениями (начало координат — в центре данной области)

$$\varphi(r) = \begin{cases} ar_0^2 [1 - (r_0/r)(1 + R/r_0) \exp(-R/r_0) \operatorname{sh}(r/r_0)], & r \leq R, \\ ar_0^3 [(R/r_0) \operatorname{ch}(R/r_0) - \operatorname{sh}(R/r_0)] \frac{\exp(-r/r_0)}{r}, & r \geq R. \end{cases} \quad (8.27)$$

Здесь $a = \frac{4\pi e}{\epsilon} \delta N_d$, $r_0^{-2} = \frac{4\pi n_0 e^2}{\epsilon T}$. Пользуясь выражениями (8.27), легко убедиться, что условие $|e\varphi| \ll T$ сводится в данном случае к неравенству $R \ll r_0$ (если $\delta N_d \leq n_0$).

Полный потенциал V/e получается суммированием выражений (8.27) по всем областям. При некоррелированном расположении последних в пространстве при этом возникает пуассоновское случайное поле, причем, как легко убедиться,

$$\psi_1 = N \int dr e^2 \varphi^2(r), \quad \psi_2 = \frac{1}{2} N \int dr e^2 (\nabla \varphi)^2. \quad (8.28)$$

Подставляя сюда выражения (8.27), получаем (при $R \ll r_0$)

$$\psi_1 = \frac{2\pi a^2}{9} r_0 R^6 e^2 N, \quad \psi_2 = \frac{4\pi a^2}{15} R^5 e^2 N. \quad (8.29)$$

Соответственно условие гладкости (8.2) принимает вид

$$\frac{\varepsilon \hbar^2}{m e^2 R} \frac{1}{\frac{4\pi}{3} R^3 \delta N_d (N r_0^3)^{1/2}} \ll 1. \quad (8.30)$$

По смыслу задачи $\varepsilon \hbar^2 / m e^2 R \ll 1$. Принимая во внимание неравенства (8.26), видим, что условие (8.30) заведомо выполняется уже при $N r_0^3 \sim 1$.

Желая использовать этот иллюстративный пример для рассмотрения ситуации в реальных материалах, мы должны были бы принять во внимание и возможное присутствие акцепторов и других заряженных дефектов, а также выполнить усреднение по значениям δN_d и R и по форме рассматриваемых объемов, а может быть, и принять во внимание корреляцию в относительном их расположении. Видимо, обилие неизбежно возникающих здесь предположений модельного характера делает такой расчет мало оправданным. Проще рассматривать величины ψ_1 и ψ_2 (или их аналоги в случае негауссова поля) как феноменологические параметры.

В рассмотренном выше иллюстративном примере, как и в более сложных случаях, характерных, например, для радиационно поврежденных материалов, гладкое случайное поле возникало «изначально». В дальнейшем (§ 12) мы увидим, однако, что и в системах с отнюдь не гладкими случайными полями также возникает плавное искривление зон. Его можно рассматривать как гладкое случайное поле «вторичного» характера.

§ 9*. Теорема существования дискретных флуктуационных уровней в запрещенной зоне неупорядоченного полупроводника

В соответствии со сказанным в § 1, нам надлежит оценить вероятность Q_b того, что в данном случайном поле возникают дискретные уровни. Они отвечают локализованным (в смысле, указанном в §§ 1, 2) состояниям носителей заряда. Для этой цели удобно написать сначала условие возникновения таких уровней при заданной форме потенциальной энергии электрона $U(\mathbf{r})$. Интересующая нас вероятность представляет собой не что иное, как вероятность реализации указанного условия. Вычислить ее нелегко; для наших целей, однако, достаточно найти нижнюю ее границу.

Будем рассматривать макроскопически однородную систему. Тогда, в соответствии с §§ 1, 7, задача сводится к исследованию системы электронов с гамильтонианом

$$H = H_0 + \sum_i U(\mathbf{r}_i), \quad (9.1)$$

где индекс i нумерует электроны, $U(\mathbf{r}_i)$ — потенциальная энергия i -го электрона в случайном поле, нормированная условием (7.4), H_0 — гамильтониан системы электронов, движущихся во «вспомогательном» (в смысле § 8) периодическом поле и взаимодействующих друг с другом. Периодическое поле исключим с помощью метода эффективной массы, причем для простоты будем считать соответствующий закон дисперсии параболическим и изотропным:

$$E_p = p^2/2m. \quad (9.2)$$

Энергия E_p отсчитывается здесь от края зоны проводимости; перенос результатов на случай дырочных локальных уровней очевиден*). Заметим, что использование метода эффективной массы в принятом здесь варианте накладывает хорошо известные ограничения на величину энергии ионизации флуктуационных уровней: эта энергия должна быть не слишком велика.

Рассмотрим сначала задачу об одноэлектронных уровнях, соответствующих локализации одного электрона в данной потенциальной яме (В. Л. Бонч-Бруевич, 1971). В соответствии со сказанным в § 1, мы приходим при этом к «одноэлектронному» (в указанном там смысле) уравнению Шредингера

$$\hat{T}\psi + U\psi = E\psi. \quad (9.3)$$

Здесь $\hat{T} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2$ есть оператор кинетической энергии.

Уравнение (9.3) в принципе может иметь как дискретный, так и непрерывный спектр. Первому из них соответствуют интересные нас локализованные состояния. По определению макроскопически однородной системы свойства ее инвариантны относительно одновременного сдвига всех потенциальных ям**). Иначе говоря, если локализованные состояния вообще образуются, то имеет место вырождение по координатам центра ло-

*) Во избежание недоразумений подчеркнем еще раз, что эффективная масса m представляет собой в данном случае вспомогательную величину. То же относится и к аналогичным ей параметрам, которые могли бы входить в закон дисперсии более сложного вида: они входят в ответ как вспомогательные параметры, подлежащие определению из опыта (как в теории поляронов [18]).

**) Мы отвлекаемся при этом от возможных деталей атомной структуры. Строго говоря, в применении, например, к кристаллам надо было бы говорить не о любой точке, а о любой элементарной ячейке. Суть дальнейших рассуждений, однако, от этого не меняется.

кализации (§ I.6). Поскольку указанное вырождение в рассматриваемой задаче не снимается, мы можем просто выбрать значения этих координат по произволу. Для определенности поместим центр локализации в начало координат; тем самым приобретают смысл и понятия «достаточно большое расстояние», «на бесконечности» и т. п.

Введем в уравнении (9.3) сферические координаты r, θ, φ , обозначив через $\nabla_{\theta, \varphi}^2$ лапласиан по угловым переменным. (Направление полярной оси здесь и в дальнейшем в этой главе может быть выбрано произвольно.) Получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \nabla_{\theta, \varphi}^2 \right] \psi + U(r, \theta, \varphi) \psi = E \psi. \quad (9.3')$$

Обозначим через γ^{-1} радиус локализации электрона, занимающего предполагаемый дискретный уровень (если последний действительно существует, то величина γ должна оказаться вещественной)*. По определению (см. конец § 1) при достаточно большом объеме системы Ω величина γ не зависит от Ω , т. е., в частности,

$$(\gamma \Omega^{1/3})^{-1} \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad \Omega \rightarrow \infty. \quad (9.4)$$

Положим

$$\psi = e^{-\gamma r} f(r, \theta, \varphi), \quad (9.5)$$

где f — новая неизвестная функция. Подставляя (9.5) в (9.3'), получаем

$$-\frac{\hbar^2 \gamma^2}{2m} \left(1 - \frac{2}{\gamma r} \right) f + \frac{\hbar^2 \gamma^2}{m} \left(1 - \frac{1}{\gamma r} \right) \frac{1}{\gamma} \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2 \gamma^2}{2m} \frac{1}{\gamma^2 r^2} \nabla_{\theta, \varphi}^2 f + U(r, \theta, \varphi) f = E f. \quad (9.6)$$

Как и в § 2, обозначим через l_0 характерный линейный размер области локализации в смысле, указанном в § 2. По определению l_0 удовлетворяет неравенству

$$\gamma l_0 \gg 1. \quad (9.7)$$

При $r = l_0$ уравнение (9.6) можно переписать в виде

$$-f + \frac{2m}{\hbar^2 \gamma^2} U f = \frac{2mE}{\hbar^2 \gamma^2} f - \frac{A[f]}{l_0 \gamma}. \quad (9.8)$$

Здесь через $A[f]$ обозначено выражение, конечное при $\gamma l_0 \rightarrow \infty$; явный вид его ясен из сопоставления (9.8) и (9.6).

* Естественно, γ зависит от энергии рассматриваемого состояния. Подробнее см. ниже, § 11.

Разложим f в ряд по шаровым функциям $Y_l^m(\theta, \varphi)$:

$$f(l_0, \theta, \varphi) = \sum_{l \geq 0} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta, \varphi) c_{lm}(l_0), \quad (9.9)$$

и будем в дальнейшем для краткости обозначать совокупность чисел (l, m) одним индексом n (так, $Y_l^m \equiv Y_n$ и т. д.). Подставляя (9.9) в (9.8), получим систему уравнений для коэффициентов $c_{lm} \equiv c_n$:

$$\left(1 + \frac{2mE}{\hbar^2 \gamma^2}\right) c_n - \frac{\tilde{A}}{\gamma l_0} = \frac{2m}{\hbar^2 \gamma^2} \sum_{n'} U_{nn'}(l_0) c_{n'}. \quad (9.10)$$

Здесь через \tilde{A} обозначен результат подстановки (9.9) в выражение для A , величины $U_{nn'}$ суть элементы эрмитовой матрицы

$$U_{nn'}(l_0) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{n'}^*(\theta, \varphi) U(l_0, \theta, \varphi) Y_n(\theta, \varphi). \quad (9.11)$$

Коэффициенты c_n можно нормировать условием $\sum_n |c_n|^2 = 1$. Умножая равенство (9.10) на c_n^* и суммируя результат по n , получаем, с учетом (9.11),

$$1 + \frac{2mE}{\hbar^2 \gamma^2} = \frac{2mE}{\hbar^2 \gamma^2} \left\{ \sum_{n, n'} c_n^* U_{nn'}(l_0) c_{n'} + \frac{C}{\gamma l_0} \right\}, \quad (9.12)$$

где C — величина, остающаяся ограниченной при $\gamma l_0 \rightarrow 0$. Обозначим через $\nu(l_0)$ низшее собственное значение матрицы $U_{nn'}(l_0)$. Очевидно,

$$\sum_{n, n'} c_n^* U_{nn'}(l_0) c_{n'} \geq \nu(l_0). \quad (9.13)$$

Следовательно,

$$\frac{\hbar^2 \gamma^2}{2m} + E \geq \nu(l_0) + \frac{C}{\gamma l_0}. \quad (9.14)$$

Знак равенства реализуется, если коэффициенты c_n образуют собственный вектор матрицы $U_{nn'}(l_0)$, принадлежащий низшему собственному значению $\nu(l_0)$. При $\gamma l_0 \rightarrow \infty$ вторым слагаемым в правой части (9.14) можно пренебречь. Удобнее, однако, сохранить пока конечные значения γl_0 , ибо понимаемый буквально предел матрицы (9.11) при $l_0 \rightarrow \infty$ может и не существовать: в любой точке пространства случайный потенциал может иметь существенную особенность, с подавляющей вероятностью оставаясь при этом конечным в силу (7.53а) — (7.53в). Иначе говоря, с подавляющей вероятностью случайный потенциал осциллирует

(на бесконечности). Предельный переход $\gamma l_0 \rightarrow \infty$ мы совершим лишь в дальнейшем, при усреднении по случайному полю, когда это действительно возможно.

Важно заметить также, что условие $\gamma l_0 \rightarrow \infty$ еще не означает перехода к рассмотрению всего образца. Согласно § 2, область с линейными размерами порядка l_0 , будучи велика по сравнению с областью локализации электрона, не обязательно должна быть макроскопически велика. Мы будем иметь в виду условие $l_0^3 \Omega^{-1} \ll 1$. Иначе говоря, в дальнейшем будут выполнены два предельных перехода:

$$\gamma l_0 \rightarrow \infty, \quad \Omega l_0^{-3} \rightarrow \infty. \quad (9.15)$$

Первый из них мы будем называть «предельным переходом в смысле (9.7)». Он нужен для установления однозначной связи между γ и $\nu(l_0)$. Второй предельный переход — термодинамический. Он подразумевается при вычислении средних по случайному полю.

Поскольку радиус локализации γ^{-1} , очевидно, зависит от энергии ионизации, возрастая с ее уменьшением, указанное выше разграничение первой и второй шкал длины может оказаться несостоятельным, коль скоро речь идет о крайне мелких уровнях, «поджатых» к границе зоны проводимости (или, для дырок, к границе валентной зоны). В задаче, нас сейчас интересующей, это несущественно, ибо между «очень малой» и «слишком большой» энергией ионизации (когда уже нельзя пользоваться методом эффективной массы) имеется достаточно широкий интервал. Однако сам вопрос о зависимости величины γ^{-1} от энергии ионизации заслуживает внимания. Мы вернемся к нему в § 11.

Согласно (9.14) (со знаком равенства) значения γ могут быть вещественными, лишь если *)

$$\nu(l_0) - E + C/\gamma l_0 > 0. \quad (9.16)$$

С другой стороны, если какое-нибудь собственное значение уравнения (9.3) удовлетворяет неравенству (9.16), то ему принадлежит собственная функция, локализованная в пространстве. Иначе говоря, такое собственное значение относится к дискретному спектру. При этом, в силу отмеченного выше вырождения по центрам локализации, число дискретных уровней, если они вообще существуют, будет пропорционально объему системы Ω . Позднее (§ 10) мы явно убедимся в этом.

Итак, вопрос о вероятности существования дискретных флуктуационных уровней сводится к вопросу о вероятности реализа-

*) В случае центрального поля, обращаемого в нуль на бесконечности, неравенство (9.16) принимает хорошо известный вид: $E < 0$.

ции неравенства (9.16) в данном случайном поле. Эта вероятность Q_b дается выражением (сравните с (7.49))

$$Q_b = \langle \theta [v(l_0) - E + C/\gamma l_0] \rangle, \quad (9.17)$$

где θ есть ступенчатая функция.

Вычисление правой части (9.17) затруднено тем, что величина $v(l_0)$ представляет собой функционал от $U(\mathbf{r})$, и притом функционал неизвестного вида. Очевидно, однако, что мы лишь уменьшим значение Q_b , заменяя v меньшей величиной. В качестве таковой удобно взять наименьшее значение $v(l_0)$ для всех возможных конфигураций случайного поля на сфере радиуса l_0 :

$$v_{\min} = \min_{(U)} \{v(l_0)\}. \quad (9.18)$$

При этом в силу (7.53а) — (7.53в) с подавляющей вероятностью $|v_{\min}| < \infty$.

Заметим, что в силу (9.15) величина v_{\min} отнюдь не обязана совпадать с абсолютным минимумом v во всем образце: на поверхности сферы радиуса l_0 «самоусреднение» еще не происходит. Вместе с тем, выполняя усреднение по «области локализации», мы должны считать v_{\min} заданной величиной.

Таким образом,

$$Q_b \geq \langle \theta [v_{\min} - E + C/\gamma l_0] \rangle. \quad (9.17')$$

При этом мы вправе считать, что $v_{\min} < 0$. В противном случае правую часть (9.17') можно было бы еще больше упростить, заменяя там v_{\min} нулем.

Собственное значение E также, очевидно, представляет собой функционал от $U(\mathbf{r})$. Как известно из квантовой механики,

$$E = (\psi, \hat{T}\psi + U\psi), \quad (9.19)$$

где ψ есть точная собственная функция уравнения (9.3), принадлежащая данному собственному значению E , а круглые скобки обозначают скалярное произведение:

$$(\psi, \hat{T}\psi + U\psi) = \int d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) (\hat{T} + U) \psi(\mathbf{r}).$$

Поскольку $\psi = \psi[U]$, вычисление правой части (9.17') с учетом (9.19) неудобно. Мы можем, однако, мажорировать E , воспользовавшись вариационным принципом квантовой механики. Согласно последнему правая часть (9.19) может только увеличиться, если заменить там собственную функцию ψ произвольной функцией класса L_2 (нормированной, как и ψ , на единицу). Обозначим такую функцию через ψ_γ , понимая под γ параметр или совокупность параметров, от которых она может зависеть. Тогда

$$E \leq (\psi_\gamma, \hat{T}\psi_\gamma + U\psi_\gamma), \quad (9.20)$$

причем знак равенства достигается только при $\psi_V = \psi$. Таким образом,

$$Q_b \geq \left\langle \theta \left[v_{\min} + \frac{C}{\gamma l_0} - (\psi_V, \hat{T}\psi_V + U\psi_V) \right] \right\rangle. \quad (9.17'')$$

Поскольку вид функции ψ_V может быть навязан а priori, случайная величина U входит в (9.17'') только явно. Это позволяет без труда вычислить фигурирующее там среднее значение. Действительно, пользуясь интегральным представлением (7.50'), мы можем переписать соотношение (9.17'') в виде

$$Q_b \geq \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds}{s - i\epsilon} e^{i(v_m - a)s} \left\langle \exp \left\{ \frac{isC}{\gamma l_0} - isb \right\} \right\rangle, \quad (9.21)$$

где

$$a = (\psi_V, \hat{T}\psi_V), \quad b[U] = (\psi_V, U\psi_V). \quad (9.22)$$

В выражении (9.21) уже можно выполнить формальный предельный переход $\gamma l_0 \rightarrow \infty$. Квантовомеханические средние значения a и b удобно вычислять, подставляя $U(r)$ и ψ_V в виде разложений Фурье типа (7.1). При этом

$$a = \int dk T(k) |\psi_V(k)|^2, \quad b[U] = \int dk U(k) B(k), \quad (9.23)$$

$$B(k) = \int dk' \psi_V^*(k') \psi_V(k' - k).$$

Задача свелась, таким образом, к вычислению интегралов от характеристического функционала $A(sB)$. Это вычисление удобно выполнять по отдельности для случая гауссова поля, поля общего вида (с характеристическим функционалом (7.34')) и лоренцева поля.

а) *Гауссово поле.* Пользуясь формулой (7.20), мы получаем из (9.21) (при $v_{\min} < 0$)

$$Q_b \geq \frac{1}{2} (1 - \operatorname{erf} \eta_1), \quad (9.21')$$

где

$$\eta_1 = \frac{a + |v_{\min}|}{2b}, \quad (9.24)$$

$$b = \left[\frac{1}{2} \int dk \Psi(k) |B(k)|^2 \right]^{1/2}, \quad (9.25)$$

а $\operatorname{erf} \eta_1$ — интеграл ошибок:

$$\operatorname{erf} \eta_1 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\eta_1} e^{-t^2} dt.$$

Принимая во внимание выражение (9.5) для волновой функции связанного состояния, возьмем пробную функцию $\psi_\gamma(\mathbf{k})$ в виде *)

$$\psi_\gamma(\mathbf{k}) = \frac{(8\gamma^5)^{1/2}}{\pi(\gamma^2 + k^2)^2}. \quad (9.26)$$

При этом

$$E - v_{\min} = -\hbar^2\gamma^2/2m, \quad a = \hbar^2\gamma^2/2m, \quad B = (1 + k^2/4\gamma^2)^{-2} \quad (9.27)$$

и, следовательно,

$$\eta_1 = \frac{\hbar^2\gamma^{1/2}/2m + |v_{\min}| \gamma^{-3/2}}{4 \left[\int d\mathbf{q} \Psi(2\gamma\mathbf{q}) (1 + q^2)^{-4} \right]^{1/2}}. \quad (9.28)$$

В силу (7.44') знаменатель дроби (9.28) при достаточно малых (но конечных) значениях γ пропорционален $[\Psi(\mathbf{k})]^{1/2}|_{k=0}$. Видим, что величина η_1 , а с ней и вероятность Q_b , оказывается конечной.

б) *Поле общего вида.* Пользуясь формулой (7.34'), мы получаем

$$Q_b \geq \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds}{s - i\varepsilon} e^{i(v_{\min} - a)s - \bar{b}^2 s^2} \sum_{n \geq 0} c_n H_n[F], \quad (9.29)$$

где

$$\bar{b} = \left[\frac{1}{2} \int d\mathbf{k} \Phi(\mathbf{k}) B(\mathbf{k}) B(-\mathbf{k}) \right]^{1/2}, \quad (9.30)$$

величины a и B по-прежнему даются выражениями (9.23), а функция F получается из выражения (7.39) заменой $z \rightarrow s$, $I(\mathbf{k}) \rightarrow B(\mathbf{k})$.

Возьмем функцию ψ_γ в прежнем виде (9.26) и ограничимся случаем достаточно малых γ , когда функции $\Phi_l(2\gamma\mathbf{q}_1, \dots, 2\gamma\mathbf{q}_l)$ можно аппроксимировать их значениями в нуле, $\Phi_l(0, \dots, 0)$. Произведя в (9.29) замену переменных $\bar{b}s = y$ и принимая во внимание равенства (9.27) и (7.41), мы получим

$$Q_b \geq \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{y} \exp \left\{ -i \frac{v_{\min} - a}{\bar{b}} y - y^2 \right\} S_2(z). \quad (9.21'')$$

*) Функция (9.26) может быть не ортогональна к собственным функциям нижележащих дискретных уровней. При доказательстве интересующей нас сейчас теоремы о существовании дискретных уровней это, разумеется, не играет роли, ибо уровень, описываемый функцией ψ_γ , можно рассматривать как основной. Действительно, обратное предположение означало бы, что какие-то дискретные уровни заведомо существуют, и дальнейшие рассуждения стали бы беспредметны. Однако попытка вычислить таким путем плотность состояний и общее число дискретных уровней была бы не оправдана.

Ряд $S_2(z)$ дается формулой (7.41) при

$$c = \frac{1}{2v^3}, \quad z = 2^{7/2} \pi \gamma^{3/2} y.$$

В силу (7.41') интеграл в (9.21'') сходится. По определению коэффициентов c_n он не может превышать $1/2$. С другой стороны, будучи функцией многих независимых параметров, он не может и равняться $1/2$ тождественно. Отсюда следует, что в условиях (7.41) и (7.41') вероятность Q_b оказывается конечной.

в) *Лоренцево поле.* Заранее очевидно, что в случайных полях такого типа вероятность возникновения достаточно больших флуктуаций потенциальной энергии носителя заряда не меньше, чем в случаях а) и б); соответственно следует ожидать, что и здесь вероятность Q_b окажется конечной. И действительно, пользуясь формулами (7.47) и (7.48), мы получаем из (9.21)

$$Q_b \geq \frac{1}{2} + \frac{\kappa}{\pi} \int_0^{\infty} K_1(\kappa s) \sin[(v_{\min} - a)s] ds, \quad (9.31)$$

где

$$\kappa = \left[\int d\mathbf{k} |B(\mathbf{k})|^2 R(\mathbf{k}) \right]^{1/2}. \quad (9.32)$$

Интеграл в правой части (9.31) легко вычисляется (см. Приложение VI), и мы получаем (при $v_{\min} < 0$)

$$Q_b \geq \frac{1}{2} \left[1 - \frac{a + |v_{\min}|}{\sqrt{(a + |v_{\min}|)^2 + \kappa^2}} \right] > 0. \quad (9.21''')$$

Легко убедиться, что неравенства (9.21')—(9.21''') не связаны со специфическим видом вспомогательного закона дисперсии (9.2). Последний, согласно (9.23), влияет лишь на величину константы a . Иначе говоря, вид закона дисперсии, отвечающего вспомогательной задаче с чисто периодическим полем, может влиять на число дискретных уровней и на их распределение по энергии, но не на сам факт их существования.

Итак, вероятность возникновения дискретных флуктуационных уровней в случайных полях всех трех рассмотренных нами типов оказывается конечной. Причина этого очевидна: в этих полях отличны от нуля (хотя, может быть, и невелики) вероятности образования достаточно глубоких*) и широких флуктуа-

*) Разумеется, слова «достаточно глубоких» имеют здесь лишь формальный математический смысл. Фактически, в силу условий применимости данных моделей, мы не имеем права рассматривать уровни с энергиями ионизации порядка ширины запрещенной зоны. Весьма часто, однако, последняя значительно превосходит все другие характерные энергии электронов (в том числе и $\Phi_1^{1/2}$), что и оправдывает наши рассуждения.

ционных ям. В принципе, разумеется, возможны и другие типы случайных полей. Так, могло бы оказаться, что возможные значения функции $U(\mathbf{r})$ ограничены по модулю величиной, сравнимой с характерной энергией электронов (или даже меньшей ее). Тогда флуктуационные ямы нужной глубины могут и не возникнуть. Формально это проявляется в том, что аргумент ступенчатой функции в формуле (9.17) не сможет оказаться положительным. Исследование ограничений такого типа, однако, требует конкретизации рассматриваемой модели случайного поля. В системах, указанных в пунктах 1)–4), 7) и 8) § I.1, они, по-видимому, не имеют места.

Обратимся теперь к вопросу о возможности локализации двух электронов в одной и той же флуктуационной потенциальной яме. При этом, очевидно, необходимо явно учитывать кулоновское взаимодействие между двумя данными электронами. С другой стороны, влияние всех остальных носителей заряда, как и при рассмотрении «одноэлектронных» уровней, может проявиться лишь в экранировании силовых полей. При этом мы примем во внимание и возможное в принципе экранирование взаимодействия двух локализованных электронов друг с другом. Действительно, размеры области локализации могут оказаться довольно большими.

Как мы увидим, явный вид потенциальной энергии экранированного взаимодействия двух электронов V_C оказывается не очень существенным. По этой причине мы ограничимся простейшим выражением:

$$V_C(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}{r_0}\right). \quad (9.33)$$

Здесь ε — статическая диэлектрическая проницаемость материала, которая наблюдалась бы в отсутствие свободных носителей заряда*), \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 — радиус-векторы двух рассматриваемых электронов, r_0 — радиус экранирования. Явное выражение для него зависит от механизма экранирования. Для дальнейшего, однако, оно не очень существенно: достаточно рассматривать r_0 просто как феноменологический параметр.

Таким образом, мы приходим к двухэлектронной задаче с гамильтонианом

$$H = T_1 + T_2 + V_C(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + U(\mathbf{r}_1) + U(\mathbf{r}_2). \quad (9.34)$$

*) Строго говоря, отождествление ε со статической диэлектрической проницаемостью полностью оправдано лишь в случае гомеоплярного материала. При наличии заметной доли ионной связи так можно поступать, лишь рассматривая самые мелкие уровни. Именно, энергия ионизации E_I должна удовлетворять условию $E_I/\hbar \ll \omega_0$, где ω_0 — характерная частота поляризационных колебаний ионов.

Исследуя спектр соответствующего уравнения Шредингера, мы можем ограничиться приближением Хартри. Действительно, учет корреляционных эффектов может лишь ослабить эффект кулоновского отталкивания (то же относится и к обменной поправке, проявляющейся лишь в случае параллельных электронных спинов). Следовательно, возможный вывод о конечной вероятности возникновения «двухэлектронных» уровней, полученный в приближении Хартри, окажется тем более справедливым при более точном расчете. Дальнейшие рассуждения протекают так же, как и в одноэлектронном случае. Следует лишь в качестве пробной функции ψ_γ взять произведение функций вида (9.26) (тем самым мы ограничиваемся случаем антипараллельных электронных спинов). Ограничимся для простоты только гауссовым случайным полем. Тогда нижняя граница вероятности образования двухэлектронных локальных уровней вновь дается правой частью (9.21'), в которой надо лишь заменить аргумент η_1 на

$$\frac{\frac{\hbar^2}{2m} \gamma^{1/2} + |\nu_{\min}| \gamma^{-3/2} + \frac{5e^2}{16\epsilon} \gamma^{-1/2} f(\gamma r_0)}{4 \left[\int dq \Psi(2\gamma q) (1+q^2)^{-4} \right]^{1/2}}. \quad (9.28')$$

Здесь

$$f(y) = 1 - \frac{1}{2(1+2y)} \left[1 + \frac{4}{1+2y} + \frac{32y^2}{5(1+2y)^2} + \frac{32y^3}{5(1+2y)^3} \right]. \quad (9.35)$$

Последнее слагаемое в числителе (9.28') учитывает эффект отталкивания. Заметим, что при изменении своего аргумента от нуля до бесконечности функция f , отражающая явный вид экранированного потенциала, изменяется лишь от 1/2 до 1. Иначе говоря, роль кулоновского отталкивания (даже переоцененная в связи с использованием аппроксимации Хартри) сводится лишь к появлению в числителе (9.28') дополнительного слагаемого $\sim \frac{e^2}{\epsilon} \gamma^{-1/2}$, т. е. к замене $|\nu_{\min}|$ на $|\nu_{\min}| + \frac{5e^2}{16\epsilon} \gamma$. Таким образом, учет кулоновского отталкивания между двумя локализованными электронами уменьшает вероятность образования соответствующих уровней (чего и следовало ожидать), но все же не обращает ее в нуль. Уровни такого типа — занимаемые двумя электронами с антипараллельными спинами — также должны существовать в запрещенной зоне рассматриваемого неупорядоченного полупроводника (хотя, видимо, в меньшей концентрации, чем одноэлектронные). Очевидно, это обстоятельство может служить одной из причин различия данных о полной концентрации дискретных уровней, полученных по ЭПР и другими методами*). Действительно, двухэлектронные уровни рассматри-

*) См. § 19 и § 1.3.

ваемого типа в ЭПР не проявляются, соответственно чему эта методика дает заниженное значение для полной концентрации уровней.

Образование дискретных уровней — не единственный результат, к которому может привести наличие флукуационных потенциальных ям. Действительно, из квантовой механики хорошо известно, что, помимо связанных состояний, в поле притяжения могут возникнуть резонансные и виртуальные уровни. Последние проявляются в усиленном рассеянии свободных носителей заряда. Аналогичную роль играют и мелкие уровни, отвечающие связанным состояниям, «поджатым» к границе непрерывного спектра.

Влияние виртуальных и резонансных уровней на явления переноса с участием делокализованных электронов и дырок и на оптические свойства кристаллических полупроводников исследовалось многими авторами (впервые, по-видимому, А. И. Ансельмом, 1953). Полупроводники со случайным полем обладают в этом отношении двумя особенностями. Во-первых, в данном случае для возникновения виртуальных и резонансных уровней не требуется каких-либо особых причин (вроде особенностей закона дисперсии) — может быть достаточно лишь пространственных флукуаций потенциальной энергии электрона в случайном поле (М. Коэн, 1970). Во-вторых, следует ожидать, что распределение виртуальных (как и дискретных) уровней по энергии будет плотным. Наличие виртуальных уровней может сказаться, например, на явлениях переноса. Так, в компенсированных полупроводниках, содержащих такие уровни, подвижность свободных носителей заряда может оказаться пропорциональной $T^{1/2}$ (В. Л. Бонч-Бруевич, 1972).

§ 10*. Оценка концентрации флукуационных уровней

Теорема § 9 сама по себе еще не дает никаких сведений о концентрации флукуационных уровней или об их распределении по энергии: она лишь устанавливает условия, при которых названные уровни заведомо существуют. Расчет плотности состояний требует, видимо, тех или иных предположений модельного характера*). Однако порядковую оценку верхнего предела полной концентрации флукуационных уровней можно получить довольно простым путем. Действительно, естественно ожидать, что наиболее мелкие уровни, созданные потенциальными ямами не слишком малого размера, можно описывать квазиклассически. Выражение для общего числа одноэлектронных уровней v_1 в данном поле $U(\mathbf{r})$ хорошо известно из квантовой механики.

*) Мы вернемся к этой задаче в гл. III.

Принимая вспомогательный закон дисперсии (9.2), мы имеем ([19], § 48)

$$v_1 = \frac{(2m^3)^{1/2}}{3\pi^2\hbar^3} \int dr [-U(\mathbf{r})]^{3/2}, \quad (10.1)$$

причем интегрирование ведется лишь по той области, где $U(\mathbf{r}) < 0$. В применении к нашей задаче надо лишь усреднить выражение (10.1) по случайному полю. Для этой цели удобно явно выразить условие $U(\mathbf{r}) < 0$, введя под знак интеграла ступенчатую функцию $\theta[-U(\mathbf{r})]$. Тогда (с учетом (7.50'))

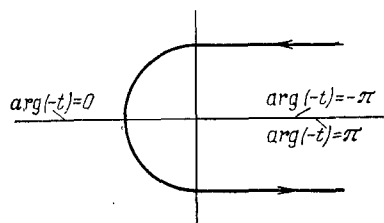


Рис. 5. Контур интегрирования в формуле (10.4).

$$\langle v_1 \rangle = \frac{(2m^3)^{1/2}}{3\pi^2\hbar^3} \int dr B_1, \quad (10.2)$$

где $B_1 =$

$$= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds}{s - \varepsilon} \langle e^{-isU(\mathbf{r})} [-U(\mathbf{r})]^{3/2} \rangle. \quad (10.3)$$

Для вычисления фигурирующего здесь среднего значения удобно воспользоваться известным интегральным представлением гамма-функции Эйлера [32]:

$$\frac{1}{\Gamma(z)} = \frac{i}{2\pi} \int_L (-t)^{-z} e^{-t} dt. \quad (10.4)$$

Интеграл берется здесь по контуру, изображенному на рис. 5. Совершая в (10.4) очевидную замену переменных $t \rightarrow -tU(\mathbf{r})$ (при $U(\mathbf{r}) < 0$), мы получаем

$$[-U(\mathbf{r})]^{3/2} = \frac{i}{2\pi} \Gamma(5/2) \int_L (-t)^{-5/2} e^{tU(\mathbf{r})} dt \quad (10.5)$$

и, следовательно,

$$B_1 = \frac{\Gamma(5/2)}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds}{s - i\varepsilon} \int_L (-t)^{5/2} A(z \cdot e^{t\mathbf{kr}}) dt, \quad (10.6)$$

где $A(z \cdot e^{i\mathbf{kr}})$ есть характеристический функционал (7.8) при $z = s + it$, $I = e^{i\mathbf{kr}}$.

В макроскопически однородной системе этот функционал фактически не зависит от координат. Следовательно, интеграл по \mathbf{r} в формуле (10.2) будет равен просто объему системы Ω : как и следовало ожидать, полное число флуктуационных уров-

ней оказывается пропорциональным Ω , что и позволяет ввести представление о полной (при всех энергиях) их концентрации $\langle v_1 \rangle / \Omega$.

Положим

$$A(s \cdot e^{i\mathbf{kr}}) \equiv A(s) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\mathbf{vs}} A(v) dv. \quad (10.7)$$

Очевидно, $A(v)$ есть вероятность того, что $U(\mathbf{r}) = v$. Получим

$$\frac{\langle v_1 \rangle}{\Omega} = \frac{(2m^3)^{1/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} v^{3/2} A(v) dv. \quad (10.8)$$

В частности, в гауссовом поле формула (7.20) дает

$$A(s) = \exp\left(-\frac{s^2 \psi_1}{2}\right), \quad A(v) = \frac{\exp(-v^2/2\psi_1)}{\sqrt{2\pi\psi_1}}, \quad (10.9)$$

и, следовательно,

$$\frac{\langle v_1 \rangle}{\Omega} = \frac{\Gamma(5/4) m^{3/2} \psi_1^{3/4} 2^{1/4}}{3\pi^{5/2} \hbar^3}. \quad (10.10)$$

Введем «эффективную температуру» T^* , представляя правую часть (10.10) в виде, привычном в обычной статистике полупроводников [3]:

$$\frac{\langle v_1 \rangle}{\Omega} = 2 \frac{(2\pi m T^*)^{3/2}}{(2\pi \hbar)^3} \equiv N_c(T^*). \quad (10.11)$$

Сравнивая равенства (10.11) и (10.10), получаем

$$T^* \approx 0,3 \psi_1^{1/2}. \quad (10.12)$$

Положим для оценки $\psi_1^{1/2} = 0,05$ эВ. Тогда T^* соответствует 160 К и

$$\frac{\langle v_1 \rangle}{\Omega} \approx \left(\frac{m}{m_0}\right)^{3/2} 10^{19} \text{ см}^{-3}. \quad (10.13)$$

Несмотря на ориентировочный характер этой оценки, видно, что концентрация флуктуационных уровней в полупроводниках со случайным полем может оказаться весьма большой. Это обстоятельство, видимо, может служить одной из причин отмечавшейся в гл. I малой чувствительности положения уровня Ферми в ряде неупорядоченных полупроводников к легированию посторонними примесями. Действительно, в рассматриваемых условиях уровень Ферми может быть фиксирован самими флуктуационными уровнями.

Обратимся теперь к двухэлектронным связанным состояниям. При этом мы не будем принимать во внимание возмож-

ные силы притяжения, рассматривая лишь связанные состояния, возникающие в достаточно глубоких флуктуационных потенциальных ямах несмотря на наличие кулоновского отталкивания. Число таких состояний можно оценить тем же путем, что и ν_1 , — с одним лишь уточнением. Дело в том, что, рассуждая квазиклассическим путем, мы должны принять специальные меры, дабы отделить истинно двухэлектронные состояния от пар одноэлектронных. Напомним в связи с этим, что, согласно сказанному в § 9, в двухэлектронном состоянии оба электрона находятся, в основном, в одной и той же области с линейными размерами порядка радиуса локализации. С другой стороны, говоря о паре одноэлектронных уровней, мы имеем в виду состояние, в котором электроны локализованы каждый у своего центра, причем расстояние между центрами превышает радиус локализации. Отсюда явствует, что простейший, хотя и грубый, способ выделить двухэлектронные состояния состоит в том, чтобы ограничить область интегрирования по координатам электронов \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , полагая

$$r \equiv |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \leq x_0. \quad (10.14)$$

Здесь x_0 — длина порядка радиуса локализации.

Введем следующие обозначения:

$$b = V_c(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)|_{r=x_0}, \quad (10.15)$$

$$A[s(e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_2})] \equiv A(s, r) = \int_{-\infty}^{\infty} d\nu e^{i\nu s} F(\nu, r). \quad (10.16)$$

Тогда

$$\frac{\langle \nu_2 \rangle}{\Omega} = \frac{2m^3}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^{x_0} r^2 B_2(r) dr, \quad (10.17)$$

где

$$B_2(r) = \int_b^{\infty} (\nu - b)^3 F(\nu, r) d\nu. \quad (10.18)$$

В частности, в гауссовом случайном поле

$$F(\nu, r) = \frac{\exp[-\nu^2/4[\psi_1 + \Psi(r)]]}{2\sqrt{\pi}[\psi_1 + \Psi(r)]}. \quad (10.19)$$

Самые простые результаты получаются, если в функции $F(\nu, r)$ главную роль играют значения r , малые по сравнению с x_0 (так обстоит дело, если корреляционная функция $\Psi(r)$ достаточно быстро убывает с увеличением r). При этом

$$A(s, r) \approx A(s, 0) = A(2s)$$

(последнее равенство вытекает из определения A с учетом макроскопической однородности системы). Следовательно, $F(\nu, 0) \approx 1/2 A(\nu/2)$. Обозначим через E_0 характерную энергию, фигурирующую в функционале $A(s, 0)$ (в гауссовом поле $E_0 = \sqrt{\psi_1}$), и положим

$$\lambda = b/2E_0. \quad (10.20)$$

Тогда, сравнивая выражения (10.9) и (10.17), мы получаем, полагая $\nu = at$:

$$\frac{\langle \nu_2 \rangle}{\langle \nu_1 \rangle} \approx \frac{4}{3} \left(\frac{bmx_0^2}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{\int_1^{\infty} (t-1)^3 A(\lambda t) dt}{\int_0^{\infty} t^{3/2} A(\lambda t) dt}. \quad (10.21)$$

В гауссовом поле при слабом отталкивании, когда $\lambda \ll 1$, правая часть (10.21) оказывается пропорциональной

$$\frac{mx_0^2 b}{\hbar^2 \lambda^{3/2}} = \frac{mx_0^2 \psi_1^{3/4}}{\hbar^2 b^{1/2}}. \quad (10.22)$$

Поскольку \hbar^2/mx_0^2 — порядка энергии ионизации, величина (10.22) может оказаться и не малой.

С другой стороны, при сильном отталкивании, когда $\lambda \gg 1$, концентрация двухэлектронных уровней, как и следовало ожидать, сравнительно невелика: левая часть (10.22) оказывается заметно меньше единицы.

§ 11. Радиус локализации. Степенная локализация

Радиус локализации γ^{-1} зависит от энергии ионизации рассматриваемого уровня E . Вид этой зависимости нетрудно установить для сравнительно глубоких флуктуационных ям. Действительно, здесь (рис. 6) можно выделить область пространства, в которой $\max_{(\theta, \varphi)} |U(r, \theta, \varphi)| \ll E$ и, следовательно, волновая функция имеет известный из квантовой механики асимптотический вид:

$$\psi \sim \exp\left(-\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r\right). \quad (11.1)$$

При этом, очевидно,

$$\gamma^{-1} = \hbar/\sqrt{2mE}. \quad (11.2)$$

При уменьшении энергии ионизации, во-первых, в соответствии с (11.2), растет радиус локализации и, во-вторых, возра-

стает вероятность возникновения соответствующих флуктуаций потенциальной энергии, т. е. уменьшается среднее расстояние между ямами сравнимой глубины. В силу обеих этих причин размеры асимптотической области сужаются, и при достаточно малых значениях E она исчезает вовсе. Формулы (11.1) и (11.2) при этом уже не имеют места, и, более того, лишается смысла сама постановка задачи о поведении волновой функции вдали от центра данной потенциальной ямы. Действительно, в рассматриваемых условиях слова «далеко от данной ямы» означают вместе с тем и «близко к другой, почти такой же». Мы

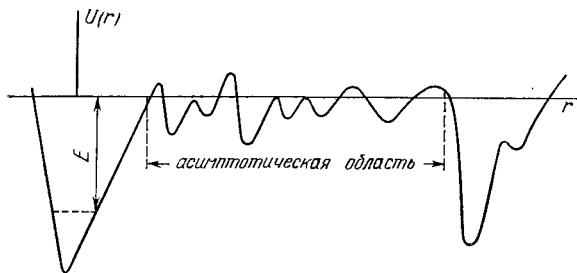


Рис. 6. К асимптотике волновых функций дискретного спектра. В части пространства, обозначенной как «асимптотическая область», справедливо выражение (11.1).

можем, однако, сохранить представление о радиусе локализации γ^{-1} как о характерном линейном размере области пространства, в пределах которой в основном сосредоточена волновая функция. Точное определение слов «характерный линейный размер» для наших целей несущественно (это может быть, например, квантовомеханическое среднее значение расстояния между электроном и центром локализации). Физический интерес здесь представляет вид функции $\gamma(E)$ для существенных конфигураций случайного поля. Рассматривая гауссово случайное поле с бинарной функцией корреляции (7.37в), можно угадать ответ при $E \rightarrow 0$ с помощью соображений размерности. Надо лишь принять во внимание, что в него должна войти статистическая характеристика поля — величина Φ_0 . Действительно, мы имеем здесь два независимых параметра размерности длины: $\gamma_1^{-1} = \hbar/\sqrt{2mE}$ и $\gamma_2^{-1} = \Phi_0^{1/3} E^{-2/3}$. Следовательно, можем написать

$$\gamma^{-1}(E) = \gamma_2^{-1} f(\gamma_2/\gamma_1), \quad (11.3)$$

где f — некоторая непрерывная функция. По физическим соображениям величина Φ_0 должна входить в γ^{-1} в неотрицательной степени. Для этого достаточно, чтобы функция f имела конечный предел при стремлении ее аргумента к нулю. Оценка сверху для

радиуса локализации получится, если обеспечить наиболее быстрое его возрастание при $E \rightarrow 0$. Поскольку при этом $\gamma_2/\gamma_1 \rightarrow 0$, следует положить $f(0) \neq 0$. Таким образом, при $E \rightarrow 0$

$$\gamma^{-1}(E) \rightarrow \text{const } \Phi_0^{1/3} E^{-2/3}. \quad (11.4)$$

Этот результат был указан К. Фридом (1972) и Р. А. Абрамом и С. Ф. Эдвардсом (1972). Провести аналогичное рассуждение, заменив в (11.3) γ_2^{-1} на γ_1^{-1} , невозможно, ибо в ответ не вошла бы величина Φ_0 .

Известный интерес представляет задача об асимптотике волновых функций неслучайных (в смысле § 2) дефектов структуры. Для достаточно глубоких уровней, разумеется, справедливо выражение (11.1). Однако есть случай (В. Л. Бонч-Бруевич, 1976), когда вместо экспоненциальной асимптотики оказывается справедливым выражение вида

$$\psi \sim r^{-n} \chi(\theta, \varphi). \quad (11.5)$$

Здесь n — число (такое, чтобы функция (11.5) удовлетворяла условиям нормировки), χ — произвольная квадратично интегрируемая функция полярных углов θ, φ . При этом говорят о степенной локализации*).

Асимптотика вида (11.5) имеет место, если потенциальная энергия в уравнении Шредингера на больших расстояниях от центра локализации имеет вид (мы пользуемся обозначением v , дабы избежать смешения со случайной функцией $U(\mathbf{r})$)

$$v \sim \frac{c(\theta, \varphi)}{r^2}. \quad (11.6)$$

Здесь $c(\theta, \varphi)$ — произвольная регулярная функция, удовлетворяющая лишь указанному ниже ограничению.

В справедливости сказанного легко убедиться непосредственной проверкой: надо лишь подставить выражения (11.5) и (11.6) в уравнение Шредингера (9.3) (с заменой U на v). При этом число n неявно выражается через функцию $c(\theta, \varphi)$, что и ограничивает ее условием нормируемости волновой функции (11.5).

В частности, выражение (11.6) может описывать потенциальную энергию электрона в поле электрического диполя или в поле упругих напряжений, создаваемых точечным дефектом структуры.

*) Сама возможность степенной локализации решений уравнения Шредингера хорошо известна [33, 34]. Из формул (11.5) и (11.6) вытекает, однако, что она более реалистична, чем можно было бы подумать. Некоторые результаты, видимо, указывающие на возможность степенной локализации электронов в неупорядоченных полупроводниках, были численным методом получены В. Дж. Ластом и Д. Дж. Таулесом (1974).

Энергия ионизации состояния с асимптотикой (11.5) оказывается равной нулю. Очевидно, такая ситуация неустойчива: сколь угодно близко от данного уровня располагаются делокализованные состояния в зоне проводимости (или валентной). Естественно ожидать, что это вырождение снимается каким-либо возмущением, неизбежно присутствующим во всякой реальной системе. В неупорядоченных полупроводниках роль такого возмущения может играть случайное поле. В результате его действия уровень либо превращается в резонансный, либо сдвигается ниже, в область дискретного спектра. В последнем случае асимптотика (11.5) сменяется более быстрым убыванием ψ с ростом r ; однако в не слишком сильном поле это происходит лишь на очень больших расстояниях от центра локализации, а в физически интересной области остается в силе выражение (11.5).

§ 12. Плавное искривление зон

Как видно из формулы (9.14), собственные значения уравнения (9.3) (и аналогичного ему двухэлектронного уравнения) отсчитываются от «случайного нуля» $\nu_0 = \lim_{\gamma l \rightarrow \infty} \nu(l_0)$. При этом состояния с энергиями, меньшими ν_0 , описываются волновыми функциями дискретного спектра, локализованными в основном в микроскопически малых областях пространства вблизи соответствующих потенциальных ям. Состояния с энергиями, большими ν_0 , в задаче «атомного» типа принадлежали бы непрерывному спектру. В рассматриваемом случае, однако, понятие «непрерывный спектр» требует уточнения. Дело в том, что, согласно §§ 2, 9, мы имеем два больших (по сравнению с γ^{-1}) масштаба длины: l_0 и $\Omega^{1/3}$. Из результатов § 9 вытекает лишь, что при $E > \nu_0$ вероятность обнаружить электрон отлична от нуля либо в пределах области с линейными размерами порядка l_0 , либо во всем образце.

Поскольку предел « $\gamma l_0 \rightarrow \infty$ » понимается в смысле (9.7), величина ν_0 — не самоусредняющаяся и в разных частях образца она может быть различной; характерная длина, на которой заметно меняется ν_0 , есть, очевидно, величина порядка l_0 . Мы будем называть величины ν_0 для электронов и дырок локальными границами дискретного спектра E'_c и E'_v . Видим, что в разных частях образца дискретному спектру отвечают, вообще говоря, различные, и притом случайно различные, значения энергии (рис. 7). Об этом иногда говорят как о «сосуществовании» дискретного и непрерывного спектров. Однако, как уже отмечалось, термин «непрерывный спектр» здесь не однозначен, ибо он относится к состояниям обоих указанных выше типов. По сути дела, этот термин следует сохранить лишь для состояний,

в которых электрон может находиться во всем объеме образца. Вместе с тем состояния, в которых электроны локализованы в областях с линейными размерами порядка l_0 , также в известном смысле «похожи» на непрерывный спектр. Именно, следует ожидать, что в силу большого размера и не слишком малой глубины таких ям в каждой из них будет содержаться много уровней. Тогда интервалы между большинством соседних уровней будут $\sim 1/l_0$. По определению эти интервалы малы по сравнению с характерными энергиями электронов. По этой причине мы будем говорить, что рассматриваемые области энергии образуют квазинепрерывный спектр.

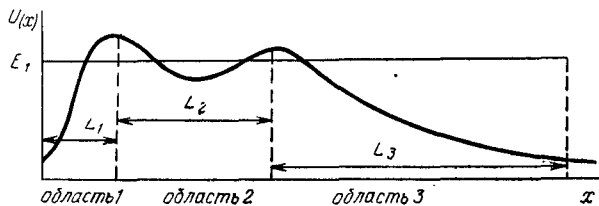


Рис. 7. Сосуществование дискретного и непрерывного спектров (схематически). Длины L_1, L_3 порядка l_0 (их следует устремить к бесконечности в смысле (9.7)). Уровень E_1 в области 2 принадлежит дискретному спектру, а в области 3 — непрерывному.

Согласно первой теореме о корреляции (§ 1.5 и Приложение I) электроны, занимающие состояния дискретного и квазинепрерывного спектров, при $T = 0$ не дают вклада в электропроводность на постоянном токе. Поэтому границы щели для подвижности суть границы непрерывного спектра электронов и дырок. Поскольку электропроводность есть величина самоусредняющаяся (§ 1.7), положения этих границ в макроскопически однородном образце не должны зависеть от координат. Мы будем обозначать их через E_c и E_v .

Итак, мы приходим к картине энергетического спектра, схематически изображенной на рис. 8. В области, ограниченной сверху наименьшей из энергий E_c и E'_c , а снизу — наибольшей из энергий E_v и E'_v , расположены дискретные электронные и дырочные уровни. В областях энергии E , определяемых неравенствами $E_c < E < E'_c$ и $E'_v < E < E_v$, вместо дискретных уровней появляются резонансные состояния. Наконец, при $E'_c < E < E_c$ и $E_v < E < E'_v$ мы имеем квазинепрерывный спектр (эти области на рисунке заштрихованы*). В зависимости от при-

*) В принципе, видимо, не невозможен и случай «истинного» сосуществования дискретного и непрерывного спектров, когда дискретный уровень попадает в область непрерывного спектра и не «размазывается». Примеры соответствующих потенциалов известны [33]. Пока неясно, однако, могут ли они иметь место в ансамбле существенных реализаций.

роды случайного поля локальные границы зон E'_c и E'_v могут изменяться в пространстве как одинаковым, так и неодинаковым образом. Первое имеет место в полях кулоновского типа (электрическое поле одинаково действует на электроны зон проводимости и валентной), второе — в полях, обусловленных, например, случайными деформациями решетки или набором звуковых волн (потенциалы деформации для разных зон могут быть различны по величине и по знаку).

Видим, что в полупроводнике со случайным полем неизбежно возникает плавное (макроскопическое в смысле первого неравенства (9.15)) искривление зон. Это обстоятельство отражает

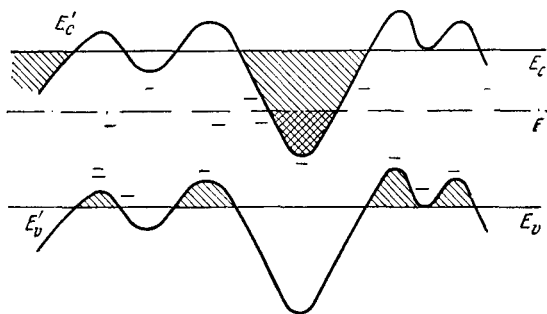


Рис. 8. Плавное искривление зон в полупроводнике со случайным полем (схематически). Горизонтальные черточки отвечают отдельным дискретным уровням.

не что иное, как существование длинноволновой части случайной потенциальной энергии электрона $U(\mathbf{r})$. В самом деле, разложим функцию $U(\mathbf{r})$ в интеграл Фурье, полагая

$$U(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} U(\mathbf{q}). \quad (12.1)$$

Разделим область интегрирования (12.1) на две части $|\mathbf{q}| < q_0$ и $|\mathbf{q}| > q_0$, подчинив «граничное» волновое число q_0 следующим условиям:

$$l_0^{-1} \ll q_0 \ll \min\{\gamma, l^{-1}, \lambda^{-1}\}. \quad (12.2)$$

Здесь γ , λ и l суть, соответственно, характерные значения обратного радиуса локализации, длины волны электрона и феноменологически определяемой длины свободного пробега (последние две величины относятся к электронам в областях непрерывного спектра). Таким образом,

$$U(\mathbf{r}) = \int_{|\mathbf{q}| < q_0} U(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + \int_{|\mathbf{q}| > q_0} d\mathbf{q} U(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \quad (12.3)$$

По определению, первое слагаемое в правой части (12.3) практически не меняется на протяжении интересующей нас области локализации. Оно как раз и описывает плавное искривление зон; при этом вместе с границами зон смещаются и электронные, и дырочные уровни, так что значения энергий ионизации их остаются неизменными (как и изображено на рис. 8). Второе слагаемое в (12.3) описывает «коротковолновую» часть случайной потенциальной энергии. Она ответственна, в частности, за сам факт возникновения флуктуационных дискретных уровней.

Глубина плавных флуктуаций может быть сравнима с расстоянием между границами зон и уровнем Ферми (дважды заштрихованный участок на рис. 8). Соответственно в образце появляются случайно расположенные области с размерами порядка l_0 , в которых электронный или дырочный газ оказывается вырожденным. Эти области получили название капель (Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, 1972). Названные авторы указали один из возможных конкретных механизмов, ответственных за возникновение плавного искривления зон: он связан с крупномасштабными флуктуациями концентрации примеси в сильно легированных и сильно компенсированных полупроводниках. В этом случае особенно ясен смысл длины l_0 : по порядку величины это есть не что иное, как радиус экранирования рассматриваемой флуктуации (это утверждение остается в силе и в общем случае). Разумеется, для вычисления l_0 следует воспользоваться нелинейной теорией экранирования.

Коль скоро границы зон проводимости и валентной смещаются одинаково, плавное искривление зон не играет заметной роли в тех явлениях, в которых существенны лишь разности электронных уровней энергии в области с линейными размерами порядка l_0 . К числу таких явлений относится, например, поглощение электромагнитных волн частоты ω при междозонных переходах (если $\hbar\omega > E'_c(\mathbf{r}) - E'_v(\mathbf{r})$) или при переходах «уровень — зона» (если $\hbar\omega > E'_c(\mathbf{r}) - E_t(\mathbf{r})$). При меньших частотах плавное искривление зон, однако, оказывается существенным (гл. V). Оно также влияет на все физические характеристики, определяемые шириной запрещенной зоны, коль скоро границы зон проводимости и валентной под действием случайного поля смещаются по-разному. Так, например, обстоит дело в случайных полях, созданных потенциалом деформации.

Представление о плавном искривлении зон, неизбежно вытекающее из общей теоремы § 9, было впервые высказано Г. Фриче (1971) на основании анализа ряда экспериментальных данных. В той же работе было сделано и предположение о существовании в неупорядоченных полупроводниках электронных

состояний трех типов, отвечающих в нашей терминологии областям дискретного, квазинепрерывного и непрерывного спектров. В дальнейшем появился еще ряд экспериментальных исследований, подтверждающих эту точку зрения.

§ 13*. Квазиоднородные системы

Наличие плавного искривления зон означает, что рассматриваемый полупроводник неизбежно внутренне неоднороден. В силу условий (9.15) это обстоятельство формально не препятствует представлению о макроскопической однородности. Вместе с тем объем с линейными размерами порядка l_0 может содержать уже достаточно много электронов, чтобы его можно было рассматривать как физически бесконечно малый объем в смысле, обычно употребляемом в статистической физике. При этом можно говорить о локальной концентрации частиц и о других локальных значениях различных наблюдаемых на опыте величин. Соответственно возникает необходимость некоторого обобщения аппарата, рассмотренного в § 1.6.

Согласно (I.6.3) и (I.6.5) плотность состояний можно записать в виде

$$\rho(E) = \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{x} \rho(\mathbf{x}, E), \quad (13.1)$$

где

$$\rho(\mathbf{x}, E) = 2 \left\langle \text{Im} \sum_s G_r(\mathbf{x}, s; \mathbf{x}, s; E) \right\rangle_{l_0}. \quad (13.2)$$

Эта величина называется локальной плотностью состояний.

Рассматривая лишь интегральную величину $\rho(E)$, мы могли бы и не ставить в (13.2) знак усреднения: таковое все равно произойдет при интегрировании по объему системы Ω в (13.1). Теперь, однако, нас будет интересовать и функция $\rho(\mathbf{x}, E)$ сама по себе. При этом усреднение в (13.2) производится лишь по реализациям случайного поля в физически бесконечно малом объеме с линейными размерами порядка l_0 . Это обстоятельство и отмечается с помощью нижнего индекса при знаке усреднения.

Очевидно, локальная концентрация частиц связана с $\rho(\mathbf{x}, E)$ равенством

$$n(\mathbf{x}) = \int \rho(\mathbf{x}, E) n_F(E) dE. \quad (13.3)$$

В пространственно однородной системе, когда функция Грина $G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E)$ зависит только от разности пространственных аргументов $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$, величины $\rho(\mathbf{x}, E)$ и $\rho(E)$, разумеется, совпадают друг с другом. Как и $\rho(E)$, локальная плотность состояний положительно определена.

При рассмотрении образца с плавным изменением $n(\mathbf{x})$ удобно ввести смешанное (вигнеровское) представление, полагая

$$G_r(\mathbf{x}, \mathbf{y}; E) = G'_r\left(\mathbf{x} - \mathbf{y}, \frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{2}; E\right) = \int d\mathbf{p} e^{i(\mathbf{p}, \mathbf{x} - \mathbf{y})} G'_r\left(\mathbf{p}, \frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{2}; E\right). \quad (13.4)$$

При этом *)

$$\rho(\mathbf{x}, E) = 2 \int d\mathbf{p} \langle \text{Sp}_s \text{Im} G'_r(\mathbf{p}, \mathbf{x}; E) \rangle_{l_0}. \quad (13.2')$$

Смысл представления (13.4) состоит в том, что в рассматриваемой системе функция $\langle G'_r(\mathbf{x} - \mathbf{y}, \frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{2}; E) \rangle_{l_0}$ сравнительно слабо зависит от второго аргумента и как угодно сильно — от первого. Действительно, заметное изменение $\langle G'_r \rangle$ как функции $\mathbf{x} - \mathbf{y}$ может произойти уже на расстоянии порядка γ^{-1} , а как функции $\mathbf{x} + \mathbf{y}$ — на расстоянии порядка l_0 .

Разумеется, представление (13.4) не связано непременно с наличием случайного поля. В той или иной форме им (или его аналогами) часто пользуются при рассмотрении самых различных систем. Существенно лишь, чтобы эти системы характеризовались, помимо размера образца, еще по меньшей мере двумя резко различными масштабами длины (§§ 2, 9). Системы указанного типа можно назвать квазиоднородными.

Легко написать общую формулу для электропроводности квазиоднородной системы. Пусть электрическое поле, реакция на которое вычисляется, плавно изменяется в пространстве. Тогда вещественную часть тензора комплексной электропроводности на частоте ω можно представить в виде [14]

$$\text{Re} \sigma_{ij}(\omega) = \text{Im} \frac{\partial}{\partial k_j} \left[\int d\mathbf{y} e^{-i(\mathbf{k}, \mathbf{x} - \mathbf{y})} \lambda_i^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega) \right]_{\mathbf{k}=0}. \quad (13.5)$$

Здесь \mathbf{k} — волновой вектор электромагнитной волны, $\lambda_i^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \omega)$ — фурье-образ по времени $t = x_0 - y_0$ от величины

$$\lambda_i^0(x, y) = \frac{e^2}{2m_0} \lim_{\substack{x'_i \rightarrow x \\ x_0 \rightarrow x_0}} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x'_i} \right) \times \\ \times \text{Sp}_s \int d\mathbf{y}' d\mathbf{y}'' \langle G_c(x, \mathbf{y}') \Gamma_e^0(\mathbf{y}', \mathbf{y}''; y) G_c(\mathbf{y}'', \mathbf{x}') \rangle_{l_0}; \quad (13.6)$$

Γ_e^0 — скалярная компонента полной электромагнитной вершинной части, G_c — причинная функция Грина. Шпур в правой ча-

*) Заметим, что функция $\text{Im} G'_r(\mathbf{p}, \mathbf{x}; E)$, вообще говоря, не положительно определенная. Этим свойством обладает лишь интеграл от нее по \mathbf{p} .

сти (13.6) берется только по спиновым переменным; символы y' , dy' (и им аналогичные) обозначают четырехмерную переменную $y' = \{y', y_0\}$ и четырехмерный элемент объема $dy'dy_0$.

Положим, подобно (13.4),

$$\Gamma_e^0(y', y''; y) = \Gamma' \left(y' - y, y'' - y; \frac{y' + y''}{2} \right) = \\ = \frac{1}{(2\pi)^8} \int dk' dk'' \Gamma' \left(k', k''; \frac{y' + y''}{2} \right) e^{-i(k', y' - y'') + i(k'', y'' - y)}, \quad (13.7)$$

где k' , k'' — четырехмерные переменные. Заметим, что в третий аргумент Γ' входят только пространственные координаты: мы рассматриваем термодинамическую систему, однородную по времени.

Подставим выражения (13.4) и (13.7) в (13.6) и выполним там дифференцирование и интегрирование по соответствующим координатам. При этом, в силу сравнительно медленной зависимости усредненной величины $\langle G'_c \Gamma' G'_c \rangle_{l_0}$ от аргументов $y' + y''$, $x + y'$ и $y'' + x'$, мы вправе пренебречь производными по этим аргументам по сравнению с произведениями типа $k'_i \Gamma'$ и $p_i G'_c$ (квазилокальная аппроксимация). Таким путем получаем

$$\text{Re } \sigma_{ij}(\mathbf{x}, \omega) = \frac{e^2}{m_0} (2\pi)^4 \text{Re} \lim_{t \rightarrow +0} \text{Sp}_s \frac{\partial}{\partial k_j} \left[\int d\mathbf{p} p_i \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 e^{i p_0 t} \times \right. \\ \times \left\langle \Gamma' \left(\mathbf{p} + \frac{\mathbf{k}}{2}, p_0 + \frac{\omega}{2}; \mathbf{p} - \frac{\mathbf{k}}{2}, p_0 - \frac{\omega}{2}; \mathbf{x} \right) \times \right. \\ \left. \times G'_c \left(\mathbf{p} - \frac{\mathbf{k}}{2}, p_0 - \frac{\omega}{2}; \mathbf{x} \right) G'_c \left(\mathbf{p} + \frac{\mathbf{k}}{2}, p_0 + \frac{\omega}{2}; \mathbf{x} \right) \right]_{l_0} \Big|_{\mathbf{k}=0}. \quad (13.8)$$

В отсутствие координатной зависимости Γ' и G'_c правая часть (13.8) переходит в хорошо известное выражение для проводимости пространственно однородной системы (П.1.1). Заметим, что в обе части равенства (13.8) входит только один — и притом один и тот же — пространственный аргумент \mathbf{x} . Это означает, что в применении к рассматриваемой системе имеет смысл представление о проводимости как функции точки, причем $\sigma_{ij}(\mathbf{x}, \omega)$ оказывается локально связанной с концентрацией частиц. Этот привычный результат есть следствие квазилокальной аппроксимации. Он позволяет рассматривать аргумент \mathbf{x} в формуле (13.8) просто как параметр. Соответственно остаются в силе все рассуждения, которые использовались при доказательстве теорем о корреляции между электропроводностью и плотностью состояний. В частности, тождество Уорда по-прежнему можно записать в виде (П.1.17), понимая под G_c и G'_c выражения,

стоящие в правых частях (13.4) и (13.7). В сущности, сохраняется и данное в § 1.5 определение понятия «зона»; надо лишь вместо плотности состояний пользоваться локальной плотностью состояний.

§ 14. Корреляционные эффекты

Как отмечалось в § 1, в принятом там и далее «одноэлектронном» приближении взаимодействие между носителями заряда учитывается не полностью. Действительно, это приближение основано на замене истинного взаимодействия между электронами взаимодействием каждого из них в отдельности с некоторым эффективным (самосогласованным) полем [1]. При этом в известной мере теряются эффекты, обусловленные влиянием взаимодействия электронов на их пространственное распределение и энергетический спектр. Эти эффекты называются корреляционными. Отметим две важные их группы.

1. Одноэлектронные уровни, отвечающие как локализованным, так и делокализованным состояниям, часто бывают вырожденными. Так, при слабом спин-орбитальном взаимодействии одна и та же энергия отвечает двум возможным значениям спинового квантового числа (двукратное спиновое вырождение). При этом принцип Паули допускает заполнение одного уровня двумя электронами. Для делокализованных состояний отсюда не вытекает серьезных осложнений, поскольку в этом случае электроны с большой вероятностью разделены пространственно. Однако при локализации электронов в одной и той же потенциальной яме взаимное кулоновское их отталкивание может оказаться существенным, и учет его необходим принципиально. Этот эффект хорошо известен в физике кристаллических полупроводников [3]. Там его учитывают либо вводя феноменологически отдельные (многоэлектронные!) энергетические уровни для каждого зарядового состояния ловушки, либо предполагая, что попадание двух электронов (дырок) на один примесный центр вообще невозможно (последнее — в случае мелких доноров или акцепторов).

С другой стороны, как отмечалось в § 5, поляризация решетки электронами может привести к тому, что эффективное взаимодействие между ними окажется притягивающим. Так, например, обстоит дело, когда выигрыш энергии поляризации превышает энергию кулоновского отталкивания. Поскольку поляризацию решетки можно рассматривать как совокупность поляризационных волн, сопоставив последним определенную ветвь фононного спектра, можно сказать, что речь идет здесь о притяжении между электронами, обусловленном их взаимодействием с фононами,

2. Кулоновское притяжение между электронами и дырками приводит к образованию экситонов. В полупроводниках с достаточно узкой запрещенной зоной выигрыш энергии при связывании пар «электрон — дырка» в экситоны может перевесить проигрыш энергии за счет перевода электронов из валентной зоны в зону проводимости. При этом окажется энергетически выгодным самопроизвольное образование электронно-дырочных пар, и система перейдет в новое состояние — экситонный изолятор (название связано с тем, что материал в таком состоянии не содержит свободных носителей заряда). Это явление называют экситонной неустойчивостью. Очевидно, как и в п. 1, при рассмотрении экситонов и экситонной неустойчивости явный учет кулоновского взаимодействия необходим принципиально.

В последующих пяти параграфах мы несколько подробнее обсудим возможную роль корреляционных эффектов в неупорядоченных полупроводниках.

§ 15. Экситон в неупорядоченном полупроводнике

Сам по себе факт существования экситонов в неупорядоченных полупроводниках (§ I.3) удивления не вызывает. Действительно, возникновение экситонных состояний обусловлено лишь кулоновским притяжением между электронами и дырками, которое, естественно, не исчезает при разупорядочении вещества. Однако при наличии случайного поля имеются три причины, которые могут привести к распаду экситона на свободные электрон и дырку; при достаточно большой вероятности распада экситон вообще перестает существовать как стационарное состояние (А. Г. Самойлович и В. М. Кондратенко, 1956; В. Л. Бонч-Бруевич и В. Д. Искра, 1971).

Во-первых, при движении экситона (как и любого атома) во внешнем поле, не обладающем пространственной периодичностью, возможен обмен энергией между внутренними и внешними (связанными с движением центра инерции) степенями свободы. Это означает, в частности, возможность «ударов второго рода», при которых происходит возбуждение или ионизация экситона за счет кинетической энергии.

Во-вторых, при наличии всюду плотного спектра дискретных уровней состояние системы с одним свободным экситоном может оказаться энергетически вырожденным с другим состоянием, в котором экситона нет, но есть два носителя заряда, локализованных далеко друг от друга. Этот эффект, видимо, подробно еще не исследован.

В-третьих, если силы, действующие со стороны силового поля на электрон и дырку, направлены в противоположные сто-

роны, то при достаточно большой их величине экситон может просто разорваться. Так заведомо обстоит дело, если работа названных сил на длине порядка радиуса экситона близка к энергии его ионизации. Обозначим «радиус экситона» через a , а энергию ионизации его — через E_I . Тогда указанное условие можно записать в виде

$$a \sqrt{\langle (\nabla U)^2 \rangle} \gtrsim E_I.$$

В сильно легированных (в том числе и компенсированных) полупроводниках появляется еще дополнительный фактор, способный вообще исключить возможность существования экситона как стационарного состояния. Это — экранирование кулоновского взаимодействия свободными и связанными зарядами. В случае экситона Ванье — Мотта мы имеем здесь буквально ту же задачу, что и при рассмотрении мелких доноров [13]. При уменьшении радиуса экранирования r_0 энергия ионизации уменьшается и в конце концов обращается в нуль, когда r_0 становится сравнимым с радиусом экситона.

Очевидно, первые три эффекта приводят к ограничению времени жизни экситона. Влияние их должно быть особенно заметным в случае экситонов Ванье — Мотта, характеризующихся сравнительно небольшой энергией ионизации. С другой стороны, у экситонов Френкеля энергия ионизации, видимо, слишком велика, чтобы «удары второго рода о случайное поле» могли заметно на них повлиять; распад этих экситонов за счет второго из указанных выше факторов возможен, видимо, лишь при довольно специальной форме плотности состояний в запрещенной зоне.

Рассмотрим задачу о распаде экситона Ванье — Мотта в слабом случайном поле за счет «ударов второго рода». Ограничимся при этом простейшей моделью: будем считать, что во вспомогательной задаче (§ 8) законы дисперсии электрона и дырки — простые параболические с минимумами в центре зоны Бриллюэна. Допустим также, что время жизни экситона относительно рассматриваемого распада значительно меньше, нежели относительно рекомбинации, и пренебрежем последним эффектом. Уравнение Шредингера для рассматриваемой системы двух квазичастиц есть

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_n} \nabla_n^2 - \frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla_p^2 - V(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_p) + U_n(\mathbf{r}_n) + U_p(\mathbf{r}_p) \right\} \Psi. \quad (15.1)$$

Здесь m_n , m_p и \mathbf{r}_n , \mathbf{r}_p — эффективные массы и радиус-векторы электрона и дырки, а $V(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_p)$ и $U_n(\mathbf{r}_n)$, $U_p(\mathbf{r}_p)$ суть, соответственно, энергии взаимодействия электрона и дырки друг с дру-

гом и со случайным полем. Удобно ввести координаты Якоби

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_n - \mathbf{r}_p, \quad \mathbf{R} = \frac{m_n \mathbf{r}_n + m_p \mathbf{r}_p}{m_n + m_p}, \quad (15.2)$$

а также приведенную массу $m = \frac{m_n m_p}{m_n + m_p}$ и массу центра инерции экситона $M = m_n + m_p$. Тогда уравнение (15.1) примет вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (H_0 + U) \Psi. \quad (15.1')$$

Здесь

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + V(\mathbf{r}), \quad (15.3)$$

$$U = U_n \left(\mathbf{R} + \frac{m_p}{M} \mathbf{r} \right) + U_p \left(\mathbf{R} - \frac{m_n}{M} \mathbf{r} \right). \quad (15.4)$$

Оператор $U(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ мы будем рассматривать как возмущение, вызывающее переходы между собственными состояниями оператора H_0 — состояниями системы без случайного поля.

В соответствии со сказанным выше интерес представляют условия, в которых радиус экранирования достаточно велик, а потенциальная энергия носителей заряда достаточно плавно изменяется в пространстве (точный смысл последнего выражения будет указан ниже — см. текст после формулы (15.12) и формулу (15.13)). Следовательно, в качестве $V(\mathbf{r})$ можно взять обычное кулоновское выражение (в материале с не слишком большой долей ионной связи оно содержит полную диэлектрическую проницаемость ϵ). Далее, функцию $U(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ можно разложить в ряд по степеням первого аргумента, полагая

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = U_n(\mathbf{R}) + U_p(\mathbf{R}) + \left(\mathbf{r}, \frac{m_p}{M} \nabla_{\mathbf{R}} U_n(\mathbf{R}) - \frac{m_n}{M} \nabla_{\mathbf{R}} U_p(\mathbf{R}) \right). \quad (15.5)$$

Третье слагаемое в правой части (15.5) описывает связь между внутренними и внешними степенями свободы. Именно через него и выражается искомая вероятность распада экситона.

Пусть в начальный момент экситон находится в основном состоянии. Соответствующая волновая функция есть

$$\Psi_i = (\pi a_B^3)^{-1/2} \exp(-r/a_B) (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_i \mathbf{R}\right), \quad (15.6)$$

где $a_B = \epsilon \hbar^2 / m e^2$ — боровский радиус экситона, а \mathbf{p}_i — импульс центра инерции. Соответствующая энергия, отсчитанная от энергии состояния, в котором свободные электрон и дырка покоятся на бесконечном расстоянии друг от друга, дается выражением

$$E = -E_B + p_i^2 / 2m. \quad (15.7)$$

Здесь $E_B = m e^4 / 2 \epsilon^2 \hbar^2$ — боровская энергия экситона.

Нас интересует вероятность перехода в состояние, в котором экситон диссоциирован. Соответствующие волновая функция Ψ_f и энергия E_f суть

$$\Psi_f = \psi(\mathbf{r}) (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_f \mathbf{R}\right), \quad (15.6')$$

$$E_f = E_B \kappa^2 + p_f^2 / 2M. \quad (15.7')$$

Здесь $\psi(\mathbf{r})$ — волновая функция непрерывного спектра, \mathbf{p}_f — квазиимпульс центра инерции экситона в конечном состоянии, κ — безразмерное квантовое число, непрерывно изменяющееся от нуля до бесконечности.

Расчет искомой вероятности \mathcal{P} производится по стандартным формулам квантовой механики. Результат надо усреднить по всем возможным значениям компонент начальной скорости экситона \mathbf{p}_i/M и по случайному полю. В первом неисчезающем приближении вероятность перехода выражается через квадрат оператора возмущения. Соответственно введем функцию

$$\begin{aligned} \Psi_{np}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') &= \left(\frac{m_p}{M}\right)^2 \langle U_n(\mathbf{r}') U_n(\mathbf{r}'') \rangle + \left(\frac{m_n}{M}\right)^2 \langle U_p(\mathbf{r}') U_p(\mathbf{r}'') \rangle - \\ &- \frac{m_n m_p}{M^2} \langle U_n(\mathbf{r}') U_p(\mathbf{r}'') + U_p(\mathbf{r}') U_n(\mathbf{r}'') \rangle. \end{aligned} \quad (15.8)$$

Очевидно, это есть не что иное, как обобщение обычной бинарной корреляционной функции (§ 7) на случай двух типов носителей заряда. Мы будем считать функцию Ψ_{np} изотропной: $\Psi_{np} = \Psi_{np}(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|)$. Тогда для усредненной указанным выше образом и отнесенной к единице времени вероятности перехода мы получаем

$$\mathcal{P} = -B \int_0^\infty X(\kappa) \int_0^\infty \Psi_{np}(r) \frac{d^2}{dr^2} \left[\frac{1}{r} J(r) \right] dr d\kappa. \quad (15.9)$$

Здесь

$$X(\kappa) = \frac{\kappa}{(1 + \kappa^2)^4} \frac{\exp\left[-\frac{2}{\kappa} \operatorname{arctg} \frac{2\kappa}{1 - \kappa^2}\right]}{1 - \exp(-2\pi/\kappa)}, \quad (15.10)$$

$$\begin{aligned} J(r) &= \int_1^\infty z dz \sin[ar \sqrt{(\kappa^2 + 1)(z^2 - 1)}] \exp[-bz^2(\kappa^2 + 1)] \times \\ &\times \sin[azr \sqrt{\kappa^2 + 1}], \end{aligned} \quad (15.11)$$

$$B = \frac{2^{16} M^{1/2}}{3 \sqrt{\pi} m T^{3/2}}, \quad a = \left(\frac{M}{m}\right)^{1/2} a_B^{-1}, \quad b = \frac{E_B}{T}. \quad (15.12)$$

Согласно сказанному в § 7, характерная длина, определяющая — в среднем — скорость изменения случайного поля в пространстве, есть радиус корреляции ξ_0 . Условие плавности случайного поля в рассматриваемой задаче сводится к неравенству

$$a_B \ll \xi_0. \quad (15.13)$$

Мы вправе поэтому разложить функцию $\Psi_{np}(r)$ в (15.9) по степеням r , ограничиваясь первым неисчезающим приближением. При этом возникают две возможности:

$$\text{а) } \Psi'_{np}(0) \equiv \left. \frac{d\Psi_{np}(r)}{dr} \right|_{r=0} = 0,$$

$$\text{б) } \Psi'_{np}(0) \neq 0,$$

причем из физических соображений вытекает, что $\Psi'_{np}(0) < 0$.

В случае а) вероятность перехода выражается через вторую производную $\Psi''_{np}(0)$ и оказывается сравнительно небольшой. В случае б) можно положить

$$\frac{d^2 [r\Psi_{np}(r)]}{dr^2} \approx 2\Psi'_{np}(0). \quad (15.14)$$

При этом интегралы, фигурирующие в правой части (15.9), удается вычислить в аналитическом виде в двух предельных случаях: «высоких» ($b \ll 1$) и «низких» ($b \gg 1$) температур. В первом из них мы получаем

$$\mathcal{P} \approx 0,8 \sqrt{\frac{M}{T}} \frac{a_B^2 |\Psi'_{np}(0)|}{\hbar^2} \ln \left(\frac{T}{E_B} \right), \quad (15.15)$$

а во втором

$$\mathcal{P} \sim \exp(-E_B/T). \quad (15.16)$$

Причина появления экспоненциального множителя в (15.16) очевидна: работа, необходимая для диссоциации экситона, совершается за счет кинетической энергии центра инерции. В этих условиях вероятность распада, естественно, невелика. С другой стороны, в случае (15.15) она, как мы сейчас увидим, может быть вполне ощутима. При этом формулой (15.15) можно воспользоваться для оценки параметра $\Psi'_{np}(0)$, коль скоро величину \mathcal{P} удастся оценить, например, по кинетике нарастания фотопроводимости в условиях, когда первичный акт поглощения света связан с образованием экситонов (идеи о роли экситонов в этом процессе обсуждались В. Е. Лашкаревым, Е. А. Сальковым и М. К. Шейнкманом (1961), В. Е. Лашкаревым, А. В. Любченко и М. К. Шейнкманом (1967)).

Формулой (15.15) можно воспользоваться, в частности, для оценки времени жизни экситона Ваннье—Мотта в поле беспо-

рядочно расположенных заряженных примесей. При этом $U_n(\mathbf{r}) = -U_p(\mathbf{r})$ и, согласно (15.8) и (7.36),

$$|\Psi'_{np}(0)| = \frac{2\pi n_i^* e^4}{\epsilon^2}. \quad (15.17)$$

Полагая для оценки $b = 0,1$, $n_i^* = 10^{13}$ см⁻³, $a_B = 8 \cdot 10^{-7}$ см, $E_B = 0,01$ эВ, находим с помощью (15.15) $\mathcal{P} \gtrsim 3 \cdot 10^9$ с⁻¹.

Очевидно, выражение (15.16) определяет и температурную зависимость времени жизни экситона Френкеля относительно «ударов второго рода». Ясно, однако, что значение \mathcal{P} в этом случае будет весьма невелико, и расчет его малоинтересен.

Один из основных эффектов, связанных с существованием экситонов в кристаллах, состоит в поглощении и рекомбинационном излучении света в области частот ниже $\omega_0 = (E_c - E_v)/\hbar$. К задаче об экситонном поглощении в неупорядоченном материале мы обратимся в гл. V.

§ 16*. Кулоновская щель

Взаимодействие между электронами и дырками может заметно повлиять на вид плотности состояний вблизи энергии, отвечающей положению уровня Ферми F_0 при температуре абсолютного нуля *). Суть дела легко представить себе с помощью модели Коэна, Фриче и Овшинского, обсуждавшейся в § 5 (рис. 4, в). Как отмечалось в § 5, в рамках этой модели состояния на хвосте, отходящем от валентной зоны, — «донорного» типа, а состояния на хвосте, отходящем от зоны проводимости, — «акцепторного» типа. Первые — нейтральны, будучи заполнены электронами. Ионизация их состоит в переводе электронов на более высокие уровни. При этом возникают локализованные дырки. Состояния второго типа нейтральны, будучи заполнены дырками. Ионизация их состоит в переводе дырок на более высокие (дырочные) уровни; при этом возникают локализованные электроны. Здесь следует обратить внимание на два обстоятельства.

Во-первых, коль скоро рассматриваемые хвосты плотности состояний перекрываются, в материале даже при нулевой температуре имеются центры, заряженные положительно и отрицательно.

Во-вторых, один из типов возбуждения системы при низких температурах состоит, очевидно, в перебросе электронов из «до-

*) Этот вопрос интенсивно обсуждается с начала семидесятых годов (М. Поллак, 1970; Дж. Сринивасан, 1971; Н. Ф. Мотт, 1975; А. Л. Эфрос и Б. И. Шкловский, 1975; Т. Курозава и Х. Сугимото, 1975; В. Л. Бонч-Бруевич, 1977).

норных» состояний при $E < F_0$ в «акцепторные» при $E > F_0$. При этом также возникают разноименно заряженные центры. В обоих случаях кулоновское взаимодействие понижает энергию системы. Иначе говоря, взаимодействие электронов друг с другом и с неподвижными зарядами центров локализации воспринимается как притяжение между локализованными электронами и дырками.

Подчеркнем, что этот вывод не связан непременно с моделью рис. 4, в. Важно лишь, чтобы имело место хотя бы одно из указанных выше обстоятельств. Возникновению эффективного притяжения между электронами способствует также поляронный эффект, обсуждавшийся в § 5.

Наличие эффективного притяжения, естественно, наводит на мысль о возможности экситонной неустойчивости и связанной с ней перестройки энергетического спектра. Однако, в отличие от задачи об экситонной неустойчивости обычного типа, мы здесь имеем дело с локализованными электронами при наличии случайного поля.

Соответственно расчет содержит некоторые новые моменты.

Непрерывный спектр электронов и дырок в интересующей нас задаче не играет роли. Поэтому мы вправе выбрать в качестве базисных одноэлектронные собственные функции задачи (I.6.8) с указанным там составом квантовых чисел: $\lambda = \{E_\lambda, R_\lambda, \sigma_\lambda\}$. Будем считать функции ψ_λ ортогонализированными. Обозначим через a_λ^+ и a_λ фермиевские операторы порождения и уничтожения частиц в соответствующих состояниях. Тогда гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$H = \sum_{\lambda} E_{\lambda} a_{\lambda}^{+} a_{\lambda} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\lambda_1, \lambda_2 \\ \lambda_3, \lambda_4}} (\lambda_1, \lambda_2 | V | \lambda_3, \lambda_4) a_{\lambda_1}^{+} a_{\lambda_2}^{+} a_{\lambda_3} a_{\lambda_4}. \quad (16.1)$$

Здесь

$$\begin{aligned} (\lambda_1, \lambda_2 | V | \lambda_3, \lambda_4) &= \\ &= \int dx dx' \psi_{\lambda_1}^{*}(\mathbf{x}) \psi_{\lambda_2}^{*}(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{\lambda_3}(\mathbf{x}) \psi_{\lambda_4}(\mathbf{x}'), \end{aligned} \quad (16.2)$$

а $V(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ есть эффективная энергия взаимодействия в координатном представлении. Точный вид функции $V(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ для дальнейшего не играет роли. Существенно лишь принять во внимание неизбежное экранирование кулоновского потенциала. Оно может быть обусловлено как перераспределением носителей заряда в пространстве*), так и технологическими причи-

*) При этом исследование закона экранирования должно выполняться самосогласованным путем уже с учетом возможного изменения спектра за счет кулоновского взаимодействия.

нами, связанными, например, с преимущественно близким расположением разноименно заряженных примесей.

В отсутствие магнитного поля функции ψ_λ можно выбрать вещественными. Далее, будем считать, что радиус локализации мал по сравнению с радиусом действия потенциала $V(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ (радиусом экранирования). Тогда при рассмотрении электронов, локализованных у разных центров, можно в первом приближении пренебречь обменными эффектами. При этом гамильтониан (16.1) принимает вид

$$H = \sum_{\lambda} E_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \lambda'} V(\lambda, \lambda') a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda'}^{\dagger} a_{\lambda'} a_{\lambda} \equiv H_e + H_{ee}, \quad (16.1')$$

где

$$V(\lambda, \lambda') = V(\lambda', \lambda) = \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \psi_{\lambda}^2(\mathbf{x}) V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{\lambda'}^2(\mathbf{x}'). \quad (16.3)$$

Если расстояние $\mathbf{R} = |\mathbf{R}_{\lambda} - \mathbf{R}_{\lambda'}|$ значительно превышает радиусы локализации обеих функций ψ_{λ} и $\psi_{\lambda'}$, то правая часть (16.3) еще более упрощается. В самом деле, в указанных условиях $\psi_{\lambda}^2(\mathbf{x})$ и $\psi_{\lambda'}^2(\mathbf{x}')$ при интегрировании с плавной функцией $V(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ ведут себя соответственно, как $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{R}_{\lambda})$ и $\delta(\mathbf{x}' - \mathbf{R}_{\lambda'})$. Следовательно,

$$V(\lambda, \lambda') \approx V(\mathbf{R}_{\lambda} - \mathbf{R}_{\lambda'}). \quad (16.3')$$

Суммирование по λ, λ' в правой части (16.1') можно ограничить условием $\lambda \neq \lambda'$. Впредь это всегда будет подразумеваться.

Гамильтониан (16.1) коммутирует с оператором $n_{\lambda} = a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda}$, а потому и с суммой $N = \sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda}$, взятой по какой-либо области изменения квантовых чисел λ . Это означает, что в данном случае «одноэлектронные» квантовые числа λ описывают собственные значения интегралов движения и их можно использовать для характеристики стационарных состояний многоэлектронной системы. В частности, в основном состоянии системы с гамильтонианом (16.1') состояния λ делятся на два класса — вакантные (в этом случае мы будем полагать $\lambda = \alpha$) и полностью заполненные ($\lambda = \beta$). В качестве N можно выбрать, например, сумму, взятую по состояниям типа β (при $T = 0$ это есть полное число локализованных электронов). Таким образом, возбужденные состояния рассматриваемой системы многих частиц можно классифицировать по числу электронов, «переброшенных» из состояний β в состояния α . Волновую функцию состояния с n «переброшенными» электронами (n парами) можно записать в виде (В.Л. Бонч-Бруевич, 1953)

$$\Psi_n = \sum_{\alpha, \beta} f_n(\alpha_1, \dots, \alpha_n; \beta_1, \dots, \beta_n) a_{\alpha_1}^{\dagger} \dots a_{\alpha_n}^{\dagger} a_{\beta_n} \dots a_{\beta_1} \Psi_0, \quad (16.4)$$

где Ψ_0 — волновая функция основного состояния системы, а f_n — функция, подлежащая определению (она антисимметрична относительно перестановки любых двух аргументов α между собой и β между собой). Подставляя (16.4) в уравнение Шредингера с гамильтонианом (16.1'), можно получить систему незацепляющихся уравнений для функций f_n . Собственные значения ее определяют непосредственно энергии возбуждения ΔE_n , т. е. разности между полными энергиями возбужденного и основного состояний. Для наших целей достаточно рассмотреть уравнение для функции f_1 . Оно имеет вид

$$\left\{ \left[E_\alpha + \sum_{\beta'} V(\alpha, \beta') \right] - \left[E_\beta + \sum_{\beta'} V(\beta, \beta') \right] - V(\alpha, \beta) \right\} f_1(\alpha, \beta) = \\ = \Delta E_1 f_1(\alpha, \beta). \quad (16.5)$$

Величины

$$E_\alpha^* = E_\alpha + \sum_{\beta'} V(\alpha, \beta'), \quad E_\beta^* = E_\beta + \sum_{\beta'} V(\beta, \beta') \quad (16.6)$$

имеют ясный физический смысл. Действительно, суммы по β' здесь описывают взаимодействие электрона в состоянии α (β) со всеми другими электронами, заполняющими состояния β' . Следовательно, E_α^* и E_β^* суть не что иное, как «перенормированные» энергии одночастичных уровней, вычисленные с учетом межэлектронного взаимодействия. Этот эффект перенормировки учитывается и в «одноэлектронном» приближении, и мы могли бы сразу написать гамильтониан (16.1), заменив E_α , E_β на E_α^* , E_β^* и одновременно исключив соответствующие члены из гамильтониана взаимодействия. Именно энергии E_α^* и E_β^* имеют непосредственное физическое значение, и о них шла речь в § 1. В частности, они и должны удовлетворять условиям

$$E_\alpha^* \geq F_0, \quad E_\beta^* \leq F_0. \quad (16.7)$$

В зависимости от природы системы знаки равенства здесь могут достигаться или не достигаться.

Последнее слагаемое в фигурных скобках в правой части (16.5) учитывает эффект корреляции. Как видно из уравнения (16.5), энергия возбуждения системы при «перебросе» одного электрона дается выражением

$$\Delta E_1 = E_\alpha^* - E_\beta^* - V(\alpha, \beta). \quad (16.8)$$

Знак «минус» перед последним слагаемым как раз и описывает притяжение между возникающими при перебросе электроном и дыркой. Тот факт, что величина ΔE_1 зависит от α и β , не должен вызывать удивления: выше уже отмечалось, что эти наборы квантовых чисел сохраняют точный смысл и для многоэлектронной задачи, коль скоро мы пользуемся гамильтонианом

(16.1'). Можно показать, что при $n \ll N$ энергии возбужденных состояний с бóльшим числом «переброшенных» электронов даются суммами выражений (16.8). Таким образом, для исследования слабо возбужденных состояний системы достаточно ограничиться формулой (16.8).

По определению величина ΔE_1 должна быть неотрицательной при любых заданных значениях E_α^* и E_β^* : в противном случае принятое выше предположение о характере основного состояния системы оказывается неправильным. Об этом говорят как о неустойчивости основного состояния (относительно возмущения, вносимого корреляционными эффектами). Соответственно неравенство $\Delta E_1 \geq 0$ называют условием устойчивости. Если оно не выполняется, то возмущение $V(\alpha, \beta)$, даже слабое, приводит к перестройке энергетического спектра. Она может состоять в появлении энергетической щели между состояниями α и β . При этом разность энергий $E_\alpha^* - E_\beta^*$ должна быть не меньше некоторой положительной величины $\Delta_{\alpha\beta}$:

$$E_\alpha^* - E_\beta^* \geq \Delta_{\alpha\beta}. \quad (16.9)$$

Ширина щели $\Delta_{\alpha\beta}$ определяется условием устойчивости

$$\Delta_{\alpha\beta} \geq V(\alpha, \beta). \quad (16.10)$$

Щель, обусловленную рассмотренными выше эффектами взаимодействия между электронами, называют кулоновской. Из предыдущего, однако, ясно, что для возникновения щели существенно лишь само наличие эффективного притяжения между носителями заряда, а не конкретная его природа.

В чистых кристаллических полупроводниках состояниям α и β отвечают, соответственно, зона проводимости и валентная, а $\Delta_{\alpha\beta}$ есть ширина запрещенной зоны, в пределах которой расположен уровень Ферми. Неравенство (16.10) означает при этом, что выигрыш энергии, достигающийся при связывании свободных электрона и дырки в экситон, не компенсирует проигрыша ее, связанного с необходимостью переброса электрона из валентной зоны в зону проводимости.

В системе с плотностью состояний, изображенной на рис. 4, а, щель отсутствует, и перестройка спектра становится необходимой. Следует, однако, принять во внимание, что величины E_α^* , E_β^* , R_α и R_β здесь случайные. По смыслу задачи разность уровней

$$E_\alpha^* - E_\beta^* = E_{\alpha\beta} \quad (16.11)$$

надо считать заданной, но расстояние $R = |R_\alpha - R_\beta|$ может изменяться произвольно — с учетом лишь ограничения, в рамках которого получена формула (16.3). При этом, как всегда в системе со случайным полем, нас интересует не условие устойчи-

ности само по себе, а лишь вероятность \mathcal{P} его реализации. С аналогичной математической задачей мы уже встречались в § 7 (см. (7.49) — (7.51)); разница состоит лишь в том, что здесь нас интересует вероятность реализации неравенства

$$E_{\alpha\beta} - V(\alpha, \beta) \geq 0 \quad (16.12)$$

при любом заданном значении $E_{\alpha\beta}$.

Искомая вероятность есть

$$\mathcal{P} = \langle \theta(E_{\alpha\beta} - V(\alpha, \beta)) \rangle_{\mathbf{R}}, \quad (16.13)$$

где символ $\langle \dots \rangle_{\mathbf{R}}$ обозначает усреднение по всем возможным векторам $\mathbf{R} = \mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{R}_{\beta}$ при фиксированной величине $E_{\alpha\beta}$. При знаке точного неравенства в (16.12) можно написать, как и в § 7,

$$\mathcal{P} = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds}{s - i\epsilon} e^{isE_{\alpha\beta}} \langle e^{-is|V_{\alpha\beta}|} \rangle_{\mathbf{R}} \Big|_{\epsilon \rightarrow +0}. \quad (16.13')$$

Обозначим через $\Psi(E_{\alpha}^*, E_{\beta}^*; \mathbf{R}_{\alpha}, \mathbf{R}_{\beta})$ условную вероятность того, что вблизи точки \mathbf{R}_{β} возникнет потенциальная яма с уровнем E_{β}^* , если вблизи точки \mathbf{R}_{α} имеется яма с уровнем E_{α}^* (*). В макроскопически однородной системе это есть функция только от разности $\mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{R}_{\beta} = \mathbf{R}$; при этом вероятность возникновения какой-либо одной ямы в элементе объема $d\mathbf{R}$ есть просто $d\mathbf{R}/\Omega$, где, как и раньше, Ω — полный объем системы. Таким образом,

$$\langle e^{-is|V_{\alpha\beta}|} \rangle_{\mathbf{R}} = \int \frac{d\mathbf{R}}{\Omega} \Psi(E_{\alpha}^*, E_{\beta}^*; \mathbf{R}) e^{-is|V_{\alpha\beta}|}. \quad (16.14)$$

По определению функция Ψ должна удовлетворять условию нормировки

$$\int \frac{d\mathbf{R}}{\Omega} \Psi(E_{\alpha}^*, E_{\beta}^*; \mathbf{R}) = 1. \quad (16.15)$$

Следовательно, равенство (16.14) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \langle \exp(-is|V_{\alpha\beta}|) \rangle_{\mathbf{R}} &= \\ &= 1 + \int \frac{d\mathbf{R}}{\Omega} \Psi(E_{\alpha}^*, E_{\beta}^*; \mathbf{R}) [\exp(-is|V_{\alpha\beta}|) - 1]. \end{aligned} \quad (16.14')$$

Как уже отмечалось, функция $V(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$, а потому и $V_{\alpha\beta}$, неизбежно представляет собой энергию экранированного взаимодействия. Это означает, что при $\Omega \rightarrow \infty$

$$\int d\mathbf{R} |V_{\alpha\beta}(\mathbf{R})| < \infty. \quad (16.16)$$

*) Функция Ψ называется двухуровневой функцией корреляции — см. ниже, § III.3. В рассматриваемой сейчас задаче явный вид ее оказывается несущественным.

Следовательно, с точностью до членов порядка $1/\Omega$ правая часть (16.14') равна единице, т. е.

$$\mathcal{P} = \theta(E_\alpha^* - E_\beta^*). \quad (16.13'')$$

Видим, что при $E_\alpha^* > E_\beta^*$ условие устойчивости выполняется с вероятностью единица. Смысл этого результата ясен: в большой системе уровни со сравнительно близкими энергиями с подавляющей вероятностью расположены далеко друг от друга в пространстве, а на больших расстояниях эффект экранирования подавляет кулоновскую корреляцию. С другой стороны, при $E_{\alpha\beta} = 0$ ситуация меняется: здесь сколь угодно слабое взаимодействие типа притяжения уже достаточно для нарушения условия устойчивости. Таким образом, в рассматриваемой нами неупорядоченной системе кулоновская щель конечных размеров не возникает, однако случай $E_\alpha^* = E_\beta^*$ должен быть исключен. Это означает, что корреляционные эффекты должны привести к невозможности реализации точных равенств в соотношениях (16.7). Иначе говоря, плотность состояний $\rho(E)$ должна обратиться в нуль при $E = F_0$, оставаясь, однако, конечной при $E \neq F_0$ (об этом иногда говорят как о «мягкой щели» (А. Л. Эфрос, Б. И. Шкловский, 1975)). В указанных условиях простейшее выражение, описывающее плотность состояний вблизи F_0 — уровня Ферми при $T = 0$, имеет вид

$$\bar{\rho}(E) = \text{const} (E - F_0)^2. \quad (16.17)$$

Очевидно, $\text{const} = 1/2\bar{\rho}''(F_0)$.

Интервал энергий, \bar{E} , в котором может быть справедливо выражение (16.17), иногда называют «шириной щели». Значение \bar{E} с трудом поддается надежной оценке. Ясно лишь, что, определяясь сравнительно слабыми корреляционными эффектами, оно должно быть невелико по сравнению с другими характерными энергетическими расстояниями в запрещенной зоне (например, по сравнению с $E_c - F_0$ и $F_0 - E_v$). Подчеркнем, что формула (16.17), как и все предыдущее рассмотрение в этом параграфе, относится, строго говоря, к случаю $T = 0$. При $T \neq 0$ (но $T < \bar{E}$) следует ожидать лишь более или менее глубокого минимума плотности состояний вблизи точки $E = F$, где F — уровень Ферми при данной температуре.

Формула (16.17) действительно получается в результате приближенного расчета плотности состояний. Не вполне ясно, однако, не изменится ли картина в результате многочастичных корреляций. В настоящее время этот вопрос еще должным образом не изучен. В дальнейшем мы примем формулу (16.17) в качестве гипотезы и изучим некоторые вытекающие из нее экспериментально проверяемые следствия. Будем предполагать

при этом, что локализованные состояния — в основном одно-электронные. Это не противоречит сделанному выше выводу о роли корреляционных эффектов, ибо они учитываются самой формулой (16.17).

§ 17*. Экранирование локализованными носителями заряда при наличии мягкой щели

Рассмотрим задачу об экранировании электростатического поля (в частности, потенциала взаимодействия между локализованными зарядами) в условиях (16.17). Будем исходить из обычного самосогласованного уравнения для среднего потенциала электрического поля φ , создаваемого точечным источником:

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{4\pi}{\epsilon} q[\varphi]. \quad (17.1)$$

Здесь ϵ , как и раньше, есть диэлектрическая проницаемость вещества, а $q[\varphi]$ — объемная плотность заряда. Она должна удовлетворять известному условию, выражающему нейтральность образца в целом:

$$\int dx q[\varphi] = 0. \quad (17.2)$$

В отсутствие источников поля потенциал φ в макроскопически однородной системе есть константа, которую мы будем считать равной нулю. Интересуясь только влиянием кулоновской щели, пренебрежем возможной «технологической» корреляцией в пространственном распределении заряженных центров. Фактически это может быть оправдано или не оправдано в зависимости от условий приготовления образца. Если такая корреляция на самом деле заметна и экранирование, связанное с ней, существенно, то рассматриваемая ниже задача становится беспредметной. Будем считать также, что температура достаточно мала:

$$T < \bar{E}, \quad T \ll E_c - F_0, \quad T \ll F_0 - E_v. \quad (17.3)$$

Первое из неравенств (17.3) играет здесь роль условия вырождения; вторые два неравенства позволяют пренебречь наличием свободных носителей заряда. Таким образом, остается только механизм экранирования, обусловленный перераспределением локализованных электронов и дырок в пространстве.

Для вычисления $q[\varphi]$ заметим, что концентрации электронов, локализованных на донорах, n_d и дырок, локализованных на акцепторах, p_a даются выражениями типа (I.5.3), (I.5.4):

$$n_d = \int \bar{\rho}_d(E) n_F(E) dE, \quad p_a = \int \bar{\rho}_a(E) [1 - n_F(E)] dE.$$

Здесь $\bar{\rho}_d$ и $\bar{\rho}_a$ — сглаженные плотности состояний донорного и акцепторного типов (для обоих направлений спина). Замена ρ_d, ρ_a на $\bar{\rho}_d, \bar{\rho}_a$ оправдана здесь в силу (I.6.2): речь идет о вычислении термодинамических величин.

Полная плотность состояний складывается из плотностей состояний донорного и акцепторного типов:

$$\bar{\rho}(E) = \bar{\rho}_d(E) + \bar{\rho}_a(E). \quad (17.4)$$

При этом в отсутствие электрического поля справедливо условие нейтральности

$$\int_0^{\infty} \bar{\rho}_a(E) n_F(E) dE = \int_0^{\infty} \bar{\rho}_d(E) [1 - n_F(E)] dE. \quad (17.5)$$

Мы совместили здесь начало отсчета энергии с потолком валентной зоны и приняли во внимание условия (17.3). Пользуясь формулами (17.4) и (17.5), легко привести выражение для $q[\varphi]$ к виду ($r \neq 0$)

$$q = e \{n_0 - n[\varphi]\},$$

где

$$n[\varphi] = \int_0^{\infty} \bar{\rho}(E) n_F(E) dE, \quad n_0 = n[\varphi] |_{\varphi=0}. \quad (17.6)$$

При $T = 0$ мы имеем

$$n - n_0 = \int_{F_0}^{F_0 + e\varphi} \bar{\rho}(E) dE = \quad (17.7)$$

$$= e\varphi \bar{\rho}(F_0) + \frac{1}{2} (e\varphi)^2 \bar{\rho}'(F_0) + \frac{1}{6} (e\varphi)^3 \bar{\rho}''(F_0) + \dots \quad (17.7')$$

В случае (16.17) первые два слагаемых в правой части (17.7') обращаются в нуль и экранирование оказывается существенно нелинейным. Фактически, однако, всякий опыт производится при конечной температуре. Соответствующая поправка к правой части (17.7) легко находится по общим правилам вычисления фермиевских интегралов в условиях сильного вырождения [17] и составляет (с точностью до экспоненциально малых членов) *) $(\pi^2/6) \bar{\rho}''(F_0) e\varphi T^2$.

*) При вычислении следует учесть, что температурная поправка к уровню Ферми в случае (16.17) дает вклад высшего порядка малости по сравнению с сохраняемыми нами членами (см. § 18). Мы пренебрегаем также возможным изменением плотности состояний с температурой ($T \ll E$).

Введем обозначения

$$r_0^{-2} = \frac{2\pi^3 e^2}{3\epsilon} T^2 \bar{\rho}''(F_0), \quad a = \frac{2\pi e^4}{3\epsilon} \bar{\rho}''(F_0). \quad (17.8)$$

Тогда уравнение (17.1) принимает вид (при $r \neq 0$)

$$\nabla^2 \varphi = r_0^{-2} \varphi + a \varphi^3. \quad (17.9)$$

В слабом поле, когда

$$(e\varphi/\pi T)^2 \ll 1, \quad (17.10)$$

в правой части (17.9) доминирует первое слагаемое*). При этом для потенциала остается в силе обычное дебаевское выражение; роль дебаевского радиуса, однако, играет величина r_0 . Полагая $\varphi = \frac{e}{\epsilon r} \exp(-r/r_0)$ и подставляя это выражение в (17.10), получаем условие применимости линейной теории экранирования в рассматриваемой задаче:

$$2\pi \frac{e^6}{\epsilon^3} \bar{\rho}''(F_0) \frac{r_0^2}{r^2} \exp(-2r/r_0) \ll 1. \quad (17.10')$$

В левой части (17.10') фигурирует безразмерный параметр, который будет встречаться и в дальнейшем:

$$\eta = \frac{e^6}{\epsilon^3} \bar{\rho}''(F_0). \quad (17.11)$$

В типичных условиях он невелик. Так, полагая для оценки $\epsilon = 10$, $\bar{\rho}''(F_0) = 10^{22} \text{ см}^{-3} \text{ ЭВ}^{-3}$ (это, видимо, завышенное значение), мы получаем $\eta = 0,1$. В этом случае неравенство (17.10') удовлетворяется уже при $r = r_0$.

При меньших расстояниях, когда выполняется неравенство, обратное (17.10), в правой части (17.9) доминирует второе слагаемое. Полагая

$$\varphi = U(r)/r$$

и пренебрегая первым слагаемым в правой части (17.9), мы получаем

$$U'' = a(U^3/r^2). \quad (17.12)$$

При $r \rightarrow \infty$ интересующее нас решение должно удовлетворять стандартным условиям:

$$E_r \equiv -\frac{d\varphi}{dr} \rightarrow +0, \quad U \rightarrow 0. \quad (7.13)$$

*) Неравенство (17.10) лишь по форме совпадает с известным условием применимости теории Дебая в задаче об экранировании невырожденным электронным газом.

С другой стороны, при $r = 0$ мы не вправе накладывать вытекающее из (17.2) обычное для точечного источника условие

$$U(0) = e/\epsilon. \quad (7.13')$$

Действительно, в уравнении (17.12) точка $r = 0$ — особая, и мы можем требовать лишь ограниченности решения при $r \rightarrow 0$.

Решения соответствующего вида легко найти прямой подстановкой. При $r \rightarrow 0$ и $r \rightarrow \infty$ мы получаем, соответственно *),

$$U = \frac{r}{r_1} \left(1 + \frac{ar^2}{6r_1^2} \right), \quad U \sim \frac{1}{\sqrt{2a \ln(r/r_2)}}. \quad (17.14)$$

Здесь r_1 и r_2 — постоянные; первое решение имеет смысл при $r \ll r_1$, второе — при $r \gg r_2$.

Причина очень слабого убывания функции $U(r)$ (а потому и потенциала) при $r \rightarrow \infty$ понятна: при уменьшении потенциала нелинейное экранирование резко ослабляется.

Заметим, однако, что в применении к уравнению (17.12), взятому само по себе, выражение «на бесконечности» вообще лишено точного смысла. Действительно, указанное уравнение инвариантно относительно изменения масштаба длины. По этой причине невозможно, оставаясь в рамках только этого уравнения, определить, например, постоянную r_2 . Ее можно найти, лишь рассматривая более общее уравнение (17.9).

Заметим, далее, что в нашей задаче ситуация в области малых r , описываемая решениями (17.14), оказывается физически неудовлетворительной. Действительно, согласно первой из формул (17.14) напряженность электрического поля при $r \rightarrow 0$ есть

$$E_r = -d\varphi/dr = -ar/3r_1^3.$$

Согласно (17.14) при $U > 0$ мы имеем $r_1 > 0$. Следовательно, знак E_r при $r \rightarrow 0$ оказывается противоположным тому, который должен получиться на бесконечности. Легко убедиться, что так же обстоит дело и при уточнении первой из формул (17.14) путем учета следующих членов разложения по r/r_1 : в области достаточно малых r напряженность поля, будучи отрицательной, монотонно возрастает по модулю с ростом r . В то же время при $r \rightarrow \infty$ величина E_r оказывается положительной и монотонно убывает с ростом r . Это означает, что где-то в промежуточной области значений r напряженность электрического поля, согласно уравнению (17.12), должна обратиться в бесконечность. Та же трудность возникает и при $r_1 < 0$ (неправильным оказывается знак функции $U(r)$ при $r \rightarrow 0$).

*) Уравнение (17.12) исследовалось (Ж. Калуччи, 1976) в связи с одной модельной задачей квантовой теории поля.

Фактически появление такой сингулярности означает лишь, что мы выходим за пределы применимости как решения (17.14), так и самого разложения (17.7'). Действительно, последнее оправдано, лишь если

$$e\varphi \ll \bar{E}.$$

В противном случае надо пользоваться непосредственно выражением (17.7). Характер экранирования при этом будет зависеть от вида плотности состояний не только вблизи уровня Ферми.

§ 18*. Низкотемпературная термодинамика носителей заряда при наличии мягкой щели

а) *Температурная поправка к уровню Ферми.* Для вычисления поправки к уровню Ферми, возникающей при конечных температурах в условиях сильного вырождения, воспользуемся условием сохранения числа частиц. Вычисляя полную концентрацию электронов n по формуле (17.6) при $T = 0$ и $T \neq 0$ и приравнявая результаты, мы получаем

$$\int_0^{\infty} \bar{\rho}(E) n_F(E) dE = \int_0^{F_0} \bar{\rho}(E) dE. \quad (18.1)$$

При этом функция Ферми, фигурирующая в левой части (18.1), содержит уровень Ферми при $T \neq 0$:

$$F(T) = F_0 + \delta F. \quad (18.2)$$

Обозначим через $N(E)$ полное число дискретных уровней в единице объема с энергией ниже E :

$$N(E) = \int_0^E \bar{\rho}(E') dE'. \quad (18.3)$$

Тогда интеграл в левой части (18.1) преобразуется обычным способом:

$$\int_0^{\infty} \bar{\rho}(E) n_F(E) dE = - \int_0^{\infty} N(E) \frac{dn_F}{dE} dE + N(E) n_F(E) \Big|_0^{\infty}. \quad (18.4)$$

В условиях (17.3) функция Ферми при $E \rightarrow \infty$ экспоненциально мала; с другой стороны, при $E = 0$ дискретных уровней уже нет. Поэтому вторым слагаемым в правой части (18.4) можно пренебречь. Интеграл с производной от функции Ферми вычисляется стандартным способом [17]. При этом, как и в § 17,

будем пренебрегать возможной зависимостью плотности состояний от температуры.

При $\bar{\rho}'(F_0) = \bar{\rho}(F_0) = 0$ мы получаем

$$-\int_0^{\infty} N(E) \frac{dn_F}{dE} dE = \int_0^F \bar{\rho}(E) dE + \frac{7\pi^4}{360} T^4 \bar{\rho}'''(F). \quad (18.5)$$

В последнем слагаемом в правой части можно заменить F на F_0 , а интеграл от плотности состояний можно переписать в виде

$$\int_0^{F_0} \bar{\rho}(E) dE + \frac{1}{6} \bar{\rho}''(F_0) (\delta F)^3. \quad (18.6)$$

Собирая формулы, получаем

$$\delta F = - \left(\frac{7\pi^4}{360} \frac{\bar{\rho}'''(F_0)}{\bar{\rho}''(F_0)} T^4 \right)^{1/3}. \quad (18.7)$$

По порядку величины

$$\frac{\bar{\rho}'''(F_0)}{\bar{\rho}''(F_0)} \sim \frac{1}{E}, \quad (18.8)$$

где E — введенная в § 16 характерная энергия, определяющая область применимости формулы (16.17). В частности, ограничиваясь формулой (16.17), мы получили бы $\delta F = 0$.

б) *Теплоемкость системы локализованных электронов.* Воспользуемся термодинамическими переменными T , F , v . Тогда теплоемкость при постоянном объеме c_v , отнесенная к единице объема, дается выражением

$$c_v = T \left\{ \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_F - \frac{(\partial n / \partial T)_F^2}{(\partial n / \partial F)_T} \right\}. \quad (18.9)$$

Здесь S — энтропия, отнесенная к единице объема. Выражение для $n(T, F)$ получается из формул (18.3) — (18.5), в которых теперь величины F и T надо рассматривать как независимые:

$$n = \int_0^F \bar{\rho}(E) dE + \frac{7\pi^4}{360} T^4 \bar{\rho}'''(F). \quad (18.10)$$

Как видно из формулы (18.10), второе слагаемое в фигурных скобках в (18.9) — порядка T^4 , и им следует пренебречь. Для вычисления первого слагаемого воспользуемся термодинамическим соотношением

$$\left(\frac{\partial S}{\partial F} \right)_T = \left(\frac{\partial n}{\partial T} \right)_F.$$

С учетом (18.10) это дает

$$\left(\frac{\partial S}{\partial F}\right)_T = \frac{7\pi^4}{90} T^3 \bar{\rho}'''(F),$$

и, следовательно,

$$\left(\frac{\partial c_v}{\partial F}\right)_T = \frac{7\pi^4}{30} T^3 \bar{\rho}'''(F). \quad (18.11)$$

Соотношение (18.11) есть не что иное, как дифференциальное уравнение для функции $c_v(F)$ — теплоемкости электронов, занимающих дискретные уровни в щели для подвижности (теплоемкость валентных электронов нас здесь не интересует). Граничное условие к нему имеет вид $c_v \rightarrow 0$ при $F \rightarrow -\infty$. Действительно, при $F < E_v$ дискретных уровней нет и соответствующий вклад в теплоемкость отсутствует. Интегрируя (18.11) по F от какого-либо (безразлично какого) отрицательного значения до F_0 , мы получаем

$$c_v = \frac{7\pi^4}{30} T^3 \bar{\rho}''(F_0). \quad (18.12)$$

Видим, что при наличии мягкой щели электронная теплоемкость при низких температурах зависит от температуры не линейно, как это обычно бывает в вырожденном газе, а кубично. По этой причине ее, может быть, нелегко отличить от теплоемкости атомной матрицы.

в) *Спиновая парамагнитная восприимчивость.* Обозначим через μ_B магнетон Бора (может быть, содержащий дополнительный гиромагнитный фактор, если играет роль спин-орбитальное взаимодействие).

Пусть, далее, напряженность магнитного микрополя есть \mathbf{h} , а соответствующий ей вектор-потенциал равен \mathbf{a} . Тогда в аддитивной части гамильтониана (16.1) появляются дополнительные слагаемые

$$- \mu_B (\lambda | \boldsymbol{\sigma} \mathbf{h} | \lambda') a_\lambda^\dagger a_\lambda -$$

$$- \frac{ie\hbar}{mc} (\lambda | \nabla \mathbf{a} + \mathbf{a} \nabla | \lambda') a_\lambda^\dagger a_\lambda + \frac{e}{2mc^2} (\lambda | \mathbf{a}^2 | \lambda') a_\lambda^\dagger a_\lambda. \quad (18.13)$$

Здесь $\boldsymbol{\sigma}$ — спиновый вектор Паули.

Второе и третье слагаемые в (18.13) обуславливают орбитальный магнетизм связанных электронов и дырок. Этот эффект может быть заметным или незаметным — в зависимости от природы центров локализации. Для нас здесь существенно, что при малой спин-орбитальной связи спиновый и орбитальный магнетизм можно рассматривать независимо друг от друга. По этой причине, интересуясь только спиновыми эффектами, мы вправе пренебречь последними двумя слагаемыми в (18.13). Тогда для

учета однородного поля \mathbf{h} , параллельного оси z , достаточно заменить величины E_λ в (16.1) на $E_\lambda \pm \mu_B h$ (знаки «+» и «-» соответствуют двумя разным ориентациям спина). Соответственно концентрации электронов со спинами «вверх» (вдоль магнитного поля) и «вниз» (противоположно магнитному полю) будут

$$n_+ = \frac{1}{2} \int_0^\infty \bar{\rho}(E) n_F(E - \mu_B h) dE \quad (18.14a)$$

и

$$n_- = \frac{1}{2} \int_0^\infty \bar{\rho}(E) n_F(E + \mu_B h) dE. \quad (18.14б)$$

Здесь $\bar{\rho}(E)$ есть, как и раньше, сглаженная плотность состояний для электронов с обеими компонентами спина, с чем и связан множитель $1/2$ перед знаком интеграла. Заметим, что мы пренебрегли здесь влиянием магнитного поля на сглаженную плотность состояний. Очевидно, это оправдано, коль скоро $\mu_B h \ll \bar{E}$ — характерной энергии, на которой заметно меняется функция $\bar{\rho}(E)$.

Итак, для z -компоненты спинового магнитного момента единицы объема M мы получим

$$M = \frac{1}{2} \mu_B \int_0^\infty \bar{\rho}(F) \{n_F(E - \mu_B h) - n_F(E + \mu_B h)\} dE. \quad (18.15)$$

Ограничимся достаточно слабыми магнитными полями, полагая

$$\mu_B h \ll \bar{E}, \quad \mu_B h \ll F - E_v, \quad E_c - F. \quad (18.16)$$

Соотношения между $\mu_B h$ и T могут быть различными. Мы рассмотрим два предельных случая: $\mu_B h \ll T$ и $\mu_B h \gg T$.

При $\mu_B h \ll T$ выражение в фигурных скобках в (18.15) можно разложить в ряд по степеням $\mu_B h$, ограничиваясь первым членом разложения. При этом

$$M = -2\mu_B^2 h \frac{1}{2} \int_0^\infty n'_F(E) \bar{\rho}(E) dE = \mu_B^2 h \left[\bar{\rho}(F) + \frac{\pi^2}{6} \bar{\rho}''(F) T^2 \right]. \quad (18.17)$$

Согласно (18.7) температурной поправкой к уровню Ферми можно пренебречь даже в первом слагаемом в квадратных скобках: учет ее дает член порядка $T^{5/3}$. В линейном по h приближении можно пренебречь и сдвигом уровня Ферми в магнитном поле. Таким образом,

$$M = \frac{\pi^2}{6} \mu_B^2 \bar{\rho}''(F_0) T^2 h. \quad (18.18)$$

Если бы в области локализации было достаточно много «магнитных» электронов, то вектор \mathbf{h} можно было бы сразу заменить магнитной индукцией \mathcal{B} . В системе, описываемой гамильтонианом (16.1), это условие не выполняется. Однако в рассматриваемой нами неупорядоченной системе величина \mathbf{h} случайна, и выражение (18.18) надлежит дополнительно усреднить по всем конфигурациям случайного поля. Поскольку это эквивалентно (§ I.7) усреднению по объему, вектор \mathbf{h} в (18.17) и (18.18) все равно заменяется на \mathcal{B} . Далее, в системе со слабым магнетизмом различие между векторами \mathcal{B} и \mathbf{h} несущественно, равно как и различие между \mathcal{B} и напряженностью магнитного поля \mathcal{H} . Соответственно для удельной восприимчивости $\chi = (\partial M / \partial \mathcal{H})^T$ при $\mu_B h \ll T$ мы получаем

$$\chi = \frac{\pi^2}{6} \mu_B^2 \bar{\rho}''(F_0) T^2. \quad (18.19)$$

При $\mu_B h \gg T$ в правой части (18.15) можно сразу положить $T = 0$. Тогда

$$M = \frac{1}{2} \mu_B \int_{F - \mu_B h}^{F + \mu_B h} \bar{\rho}(E) dE \quad (18.20)$$

или, с учетом (16.17),

$$M = \frac{\mu_B}{12} \bar{\rho}''(F_0) [(F - F_0 + \mu_B h)^3 - (F - F_0 - \mu_B h)^3]. \quad (18.21)$$

Для вычисления магнитного сдвига уровня Ферми

$$\delta F_{\mathcal{F}} = F - F_0$$

воспользуемся, как и в п. а), условием сохранения числа частиц. Полагая

$$n = n_+ + n_- \quad (18.22)$$

и вычисляя n в отсутствие магнитного поля, мы получаем

$$0 = (\delta F_{\mathcal{F}} + \mu_B h)^3 + (\delta F_{\mathcal{F}} - \mu_B h)^3, \quad (18.22')$$

откуда в принятом приближении

$$\delta F_{\mathcal{F}} = 0. \quad (18.23)$$

Таким образом, при $\mu_B \mathcal{H} \gg T$

$$M = \frac{\mu_B^4}{6} \bar{\rho}''(F_0) h^3. \quad (18.24)$$

Поскольку зависимость (18.24) нелинейна, здесь, вообще говоря, уже нельзя заменить \mathbf{h} на \mathcal{B} и пренебречь различием между

\mathcal{B} и \mathcal{H} . Можно утверждать лишь, что с точностью до трудно определяемого численного коэффициента

$$\chi \sim \mu_B^4 \bar{\rho}''(F_0) \mathcal{H}^2. \quad (18.25)$$

Видим, что в системе с мягкой щелью (16.17) обычный парамагнетизм Паули отсутствует. В зависимости от соотношения между T и $\mu_B \mathcal{H}$ спиновая магнитная восприимчивость зависит либо от температуры (случай (18.19)), либо от напряженности магнитного поля (случай (18.25)). В частности, в области предельно низких температур линейный режим намагничивания вообще отсутствует.

§ 19. Термодинамика локализованных носителей заряда при наличии двухэлектронных уровней

Обратимся к исследованию термодинамических свойств системы локализованных электронов в условиях, когда на одном центре локализации могут находиться два электрона с противоположными ориентациями спина.

Мы пренебрегаем в настоящем параграфе взаимодействием электронов, расположенных на разных центрах, т. е. рассмотренными выше эффектами, которые могут привести к образованию кулоновской щели. Поскольку электроны, попадающие на один и тот же центр, взаимодействуют сильнее, естественно ожидать, что рассматриваемые ниже внутрицентровые корреляции останутся существенными при более высоких температурах, когда наличие кулоновской щели уже не проявляется.

Кулоновское взаимодействие электронов, попавших на один и тот же центр, может привести к заметному расщеплению состояний, отвечающих одно- и двукратному заполнению центров. Эффект кулоновского отталкивания электронов, находящихся на одном центре, можно описать в рамках известной модели Хаббарда. Последняя основывается на гамильтониане (16.1') с дополнительным упрощением: учитывается только взаимодействие между электронами, находящимися на одном и том же центре. Это означает, что во втором слагаемом в правой части (16.1') остаются только члены с $R = R'$ и $\sigma = -\sigma'$. Полагая при этом $V(\lambda, \lambda') = V$, мы имеем

$$H_{ee} = V \sum_m \hat{n}_{m\uparrow} \hat{n}_{m\downarrow}. \quad (19.1)$$

Здесь $\hat{n}_{m\sigma} = a_{m\sigma}^+ a_{m\sigma}$, а σ , как и раньше, есть спиновое квантовое число, принимающее два значения: $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Строго говоря, величина V могла бы зависеть и от номера узла, и от энергии электронов на нем. Для точного количественного исследования

учет этих факторов, видимо, необходим. Суть дела, однако, можно понять и с помощью простейшей аппроксимации (19.1) с $V = \text{const}$.

Заметим, что гамильтонианом (19.1) можно пользоваться и в тех случаях, когда взаимодействие электронов, находящихся на одном и том же узле, носит характер эффективного притяжения (§ 5). В условиях притяжения $V = -V_0 < 0$.

В гамильтониане (16.1) с членом взаимодействия в виде (19.1) вклады отдельных центров аддитивны. В самом деле, добавляя для удобства в правой части (19.1) слагаемое $-\sum_{m, \sigma} F \hat{n}_{m\sigma}$, мы получаем

$$H = \sum_m H_m, \quad (19.2)$$

где

$$H_m = \sum_{\sigma} (E_{m\sigma} - F) \hat{n}_{m\sigma} + V \hat{n}_{m\uparrow} \hat{n}_{m\downarrow}, \quad (19.3)$$

а через F по-прежнему обозначен электрохимический потенциал *).

Соответственно статистическая сумма есть

$$Z = \text{Sp} \exp(-\beta H) = \prod_m z_m, \quad (19.4)$$

где

$$z_m = 1 + \exp[-\beta(E_{m\uparrow} - F)] + \exp[-\beta(E_{m\downarrow} - F)] + \exp[-\beta(E_{m\uparrow} + E_{m\downarrow} - 2F + V)], \quad (19.5)$$

а $\beta = 1/T$. Для среднего числа заполнения состояния m мы получаем

$$\begin{aligned} n_m &= \sum_{\sigma} n_{m\sigma} = Z^{-1} \sum_{\sigma} \text{Sp} e^{-\beta H} \hat{n}_{m\sigma} = \\ &= z_m^{-1} \{ \exp[-\beta(E_{m\uparrow} - F)] + \exp[-\beta(E_{m\downarrow} - F)] + \\ &\quad + 2 \exp[-\beta(E_{m\uparrow} + E_{m\downarrow} - 2F + V)] \}. \end{aligned} \quad (19.6)$$

Функция $n_{m\sigma}$ в отсутствие корреляции ($V = 0$) переходит в обычную функцию Ферми; с другой стороны, при $V > 0$ (и при низких температурах) n_m имеет две ступеньки, расположенные при энергиях $E = F$ и $E = F - V$ (рис. 9). При $T = 0$ все центры с энергиями, меньшими $F - V$, двукратно заполнены, цен-

*) В отличие от обычной ситуации, уровень электрохимического потенциала при $T = 0$ не служит здесь границей между заполненными и пустыми состояниями. По этой причине мы предпочитаем использовать здесь термин «электрохимический потенциал» вместо «уровень Ферми».

тры с энергиями между $F - V$ и F заполнены однократно, а центры с $E_{m\sigma} > F$ пусты. Именно такое распределение отвечает минимальной энергии: если, например, перенести один электрон с однократно заполненного центра с энергией, близкой к F (но меньшей F), на центр с энергией $E_{m\sigma} > F - V$, образуя двукратно заполненный центр, то выигрыш в энергии за счет уменьшения энергии электрона будет недостаточен для того, чтобы компенсировать энергию отталкивания V . При $T \neq 0$ ступеньки

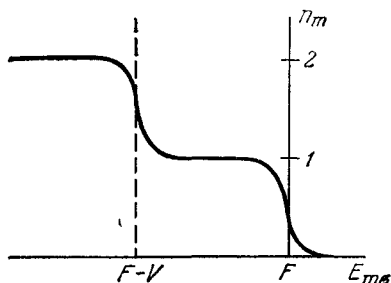


Рис. 9. Функция заполнения локальных состояний при наличии отталкивания между электронами, попадающими на один и тот же центр.

размываются (рис. 9); ширина областей размытия, как и ширина размытия обычной фермиевской ступеньки, порядка T .

Полную концентрацию электронов можно найти с помощью функции (19.6):

$$\begin{aligned}
 n &= \sum_{m, \sigma} n_{m\sigma} = \\
 &= \int dE_m \bar{\rho}(E_m) z_m^{-1} \{ \exp[-\beta(E_{m\uparrow} - F)] + \exp[-\beta(E_{m\downarrow} - F)] + \\
 &\quad + 2 \exp[-\beta(E_{m\uparrow} + E_{m\downarrow} - 2F + V)] \}. \quad (19.7)
 \end{aligned}$$

Соотношение (19.7) определяет электрохимический потенциал в системе как функцию концентрации и температуры. Пусть энергия не зависит от спина: $E_{m\downarrow} = E_{m\uparrow} \equiv E_m$. Тогда F_0 — значение F при $T = 0$ — находится из выражения

$$n = 2 \int_0^{F_0 - V} \bar{\rho}(E) dE + \int_{F_0 - V}^{F_0} \bar{\rho}(E) dE, \quad (19.8)$$

а сдвиг электрохимического потенциала с температурой

определяется из соотношения

$$\begin{aligned}
 n &= 2 \int_0^{F-V} \bar{\rho}(E) dE + \int_{F-V}^F \bar{\rho}(E) dE = \\
 &= \int_0^{F-V} dE_m \bar{\rho}(E_m) \frac{\exp[-\beta(E_m - F)]}{z_m} + \\
 &+ \int_{F-V}^F dE_m \bar{\rho}(E_m) \frac{\exp[-\beta(2E_m - 2F + V)] - 1}{z_m} + \\
 &+ 2 \int_F^\infty dE_m \bar{\rho}(E_m) \frac{\exp[-\beta(E_m - F)] + \exp[-\beta(2E_m - 2F + V)]}{z_m}. \quad (19.9)
 \end{aligned}$$

Отсюда при низких температурах получаем (Т. А. Каплан, С. Д. Маханги, В. М. Хартман, 1971)

$$F - F_0 = -T \ln 2 \frac{\bar{\rho}(F_0) - \bar{\rho}(F_0 - V)}{\bar{\rho}(F_0) + \bar{\rho}(F_0 - V)}. \quad (19.10)$$

Здесь и в дальнейшем мы не делаем специальных предположений о значении $\bar{\rho}(F_0)$.

Видим, что в данном случае уровень электрохимического потенциала линейно зависит от температуры — в отличие от того, что мы имеем в отсутствие корреляции и в газе делокализованных электронов.

Электронный вклад в теплоемкость также легко вычисляется. Мы получаем

$$c_v = \frac{\partial}{\partial T} \left[T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} \right] \quad (19.11)$$

или, с учетом (19.4) и (19.5),

$$\begin{aligned}
 c_v &= \sum_m \frac{\frac{\partial}{\partial T} \left(T^2 \frac{\partial z_m}{\partial T} \right) - T^2 \left(\frac{\partial z_m}{\partial T} \right)^2}{z_m^2} = \\
 &= \int_0^\infty dE \bar{\rho}(E) z^{-2}(E) \left[\frac{\partial}{\partial T} \left(T^2 \frac{\partial z(E)}{\partial T} \right) - T^2 \left(\frac{\partial z(E)}{\partial T} \right)^2 \right],
 \end{aligned}$$

где $z_m = z(E_m)$. Отсюда получаем (полагая $E - F = Tx$)

$$\begin{aligned}
 c_v &= T \int_{-F/T}^\infty dx \bar{\rho}(F + Tx) \frac{2x^2 e^{-x} + (2x + \beta V)^2 e^{-(2x + \beta V)} + 2(x + \beta V)^2 e^{-(3x + \beta V)}}{[1 + 2e^{-x} + e^{-(2x + \beta V)}]^2} \approx \\
 &\approx 2T [\bar{\rho}(F) + \bar{\rho}(F - V)] B, \quad (19.12)
 \end{aligned}$$

где постоянная B есть

$$B = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^2 e^{-x}}{(1 + 2e^{-x})^2} = \frac{\pi^2 + 3 \ln^2 2}{6} \approx 1,9. \quad (19.13)$$

Таким образом, электронный вклад в теплоемкость — того же порядка, что и соответствующий вклад зонных электронов в металле (при той же плотности состояний), и также линейно меняется с температурой. Такая же зависимость характеризует, однако, и вклад в теплоемкость, связанный с особенностями спектра низкоэнергетических колебаний атомной матрицы неупорядоченной системы (см. § 4). Последний вклад, по-видимому, преобладает, коль скоро плотность локализованных электронных состояний в окрестности уровня Ферми не слишком велика (меньше $\sim 10^{20} \div 10^{21} \text{ см}^{-3} \text{ эВ}^{-1}$).

При наличии внешнего магнитного поля напряженности \mathcal{H} состояния с противоположными спинами расщепляются:

$$\begin{aligned} E_{m\uparrow} &= E_m - \frac{1}{2} \mu_B \mathcal{H}, \\ E_{m\downarrow} &= E_m + \frac{1}{2} \mu_B \mathcal{H}. \end{aligned} \quad (19.14)$$

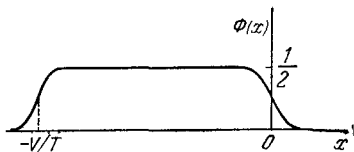


Рис. 10. Функция $\Phi(x) = \frac{\exp(-x)}{1 + 2 \exp(-x) + \exp(-2x - \beta V)}$.

При этом термодинамические функции зависят от \mathcal{H} . Рассчитаем спиновую магнитную восприимчивость системы в слабых магнитных полях. Свободная энергия \mathcal{F} системы, отнесенная к одной частице, есть

$$\mathcal{F} = F - T \ln Z.$$

Отсюда для магнитной восприимчивости находим

$$\begin{aligned} \chi &= - \left(\frac{\partial \mathcal{F}^2}{\partial \mathcal{H}^2} \right)_T \Big|_{\mathcal{H}=0} = T \sum_m \frac{z_m \frac{\partial^2 z_m}{\partial \mathcal{H}^2} - \left(\frac{\partial z_m}{\partial \mathcal{H}} \right)^2}{z_m^2} = \\ &= \frac{\mu_B}{2T} \int_{-\infty}^{\infty} dx \bar{\rho}(Tx) \frac{e^{-x}}{1 + 2e^{-x} + e^{-2x - \beta V}}. \end{aligned} \quad (19.15)$$

Функция $\Phi(x)$, на которую множится плотность состояний в подинтегральном выражении, имеет вид, изображенный на рис. 10. Вклад от «полочки», простирающейся от $F - V$ до F ,

равен

$$\frac{\mu_B^2}{4T} \int_{\beta(F-V)}^{\beta F} dx \bar{\rho}(F+xT),$$

и всю восприимчивость можно представить в виде (И. П. Звягин, 1977)

$$\chi = \frac{\mu_B^2}{4T} \int_{\beta(F_0-V)}^{\beta F_0} dx \bar{\rho}(xT) + \frac{\mu_B^2}{4} [\bar{\rho}(F_0) + \bar{\rho}(F_0 - V)] \ln 2. \quad (19.16)$$

Первый член в правой части (19.16) описывает обычный закон Кюри, а второй член дает поправку, не зависящую от температуры. Заметим, что выражение (19.16) пропорционально числу неспаренных спинов, определяющему сигнал ЭПР.

Происхождение закона Кюри здесь не вполне тривиально, ибо спектр локализованных состояний — всюду плотный. Это

есть следствие динамической корреляции между электронами, локализованными вблизи одного и того же центра. В отсутствие такой корреляции (§ 18) (равно как и в случае обычного зонного парамагнетизма) вклад, соответствующий закону Кюри, отсутствует. Действительно, тогда уровни дважды вырождены по спину и число неспаренных спинов пропорционально ширине размытия фермиевской ступеньки, обращаясь в нуль при $T = 0$. Существование «полочки», обусловленной корреляцией, означает, что число неспаренных спинов отлично от нуля при любых температурах, что и приводит к появлению слагаемого, отвечающего закону Кюри.

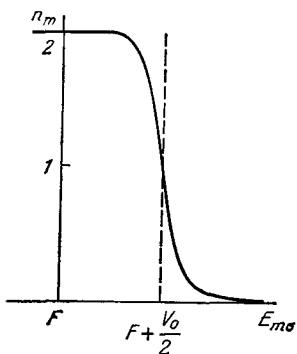


Рис. 11. Функция заполнения локальных состояний при наличии притяжения между электронами, попадающими на один и тот же центр.

При взаимодействии типа притяжения ($V = -V_0 < 0$) функция распределения имеет лишь одну размытую ступеньку, расположенную при $E_m = F + V_0/2$ (рис. 11). Величина $F - F_0$ при этом квадратично зависит от температуры:

$$F - F_0 = \frac{\pi^2}{24} \frac{d \ln \bar{\rho}(E)}{dE} \Big|_{E=F_0+V_0/2} T^2, \quad (19.17)$$

а магнитная восприимчивость при низких температурах дается

выражением

$$\chi = \frac{\mu_B^2 \pi}{8} \bar{\rho} (F_0 + V_0/2) \exp(-V_0/2T). \quad (19.18)$$

Таким образом, магнитная восприимчивость в условиях спаривания экспоненциально зависит от температуры. Это связано с соответствующей температурной зависимостью числа неспаренных спинов ν (определяющего и интенсивность сигнала ЭПР):

$$\nu \approx \frac{\pi}{4} \bar{\rho} (F_0 + V_0/2) T \exp(-V_0/2T). \quad (19.19)$$

Формула (19.19) для числа неспаренных спинов аналогична формуле для собственной концентрации носителей в полупроводниках, причем энергия связи пары V_0 играет роль ширины запрещенной зоны. Эта аналогия не случайна. Она отражает лишь тот очевидный факт, что спаривание электронов с противоположными спинами вызывает появление щели ширины V_0 в спектре элементарных возбуждений.

Подчеркнем, что эта щель обусловлена взаимодействием электронов, локализованных на одном и том же центре, — в отличие от дальнего взаимодействия, изучавшегося в §§ 15—18.

ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ И ДВУХУРОВНЕВАЯ ФУНКЦИЯ КОРРЕЛЯЦИИ

§ 1. Введение

Явное вычисление плотности состояний, электропроводности, функции корреляции уровней и других равновесных и кинетических характеристик системы электронов в случайном поле $U(\mathbf{r})$ неизбежно связано с использованием аппроксимаций того или иного характера. Они могут быть связаны с особенностями конкретной физической системы. Так, например, если случайное поле в ней с подавляющей вероятностью медленно изменяется в пространстве на расстояниях порядка всех характерных электронных длин, то адекватным способом описания служит квазиклассический. Изложению его посвящен обзор [35] (там же указана соответствующая литература); для удобства читателя мы приводим в Приложениях XII, XIV сводку основных результатов этого метода, касающихся расчета плотности состояний и нужных для последующего рассмотрения оптических свойств неупорядоченных полупроводников (см. ниже, §§ V. 2, V. 3).

Метод расчета и характер используемых в нем приближений может обуславливаться также характером той информации, которую мы хотим получить о системе. Так, если нас интересуют электронные свойства, в формировании которых играет роль значительная область энергий, в которой плотность состояний отлична от нуля, то удобным оказывается представление одночастичной функции Грина $G(\mathbf{r}, t)$ в виде фейнмановского континуального интеграла по траекториям [36]. Так обстоит дело, например, при исследовании поведения усредненной функции Грина $\langle G(\mathbf{r}, t) \rangle$ при больших временах [37] или при расчете статистической суммы невырожденной системы электронов. Этим вопросам посвящены §§ 5, 6 настоящей главы. Для указанных метода и круга задач характерно то, что для гауссова случайного поля усреднение по ансамблю случайных полей, эквивалентное интегрированию по функциональному пространству случайных функций $U(\mathbf{r})$, выполняется точно, в замкнутом виде. Аппроксимации необходимы лишь в дальнейшем, на этапе континуального интегрирования по траекториям. Это означает, что не возникает необходимости выделять какой-либо подкласс случайных полей $U(\mathbf{r})$, ответственных за искомые характеристики системы.

Существуют, однако, задачи, в которых можно заранее указать наиболее актуальные конфигурации случайного поля. Так, например, обстоит дело, когда нас интересует область энергий глубоко на хвосте плотности состояний, где она мала (а в отсутствие случайного поля — равна нулю). В этой области энергий плотность состояний отлична от нуля лишь благодаря сравнительно маловероятным конфигурациям случайного поля. Именно, важными оказываются конфигурации, в которых имеются достаточно глубокие потенциальные ямы, способные создать дискретный уровень E на интересующей нас глубине. Аналогичное положение имеет место, когда нас интересует вероятность существования двух глубоких локализованных состояний с заданным конечным расстоянием между центрами локализации [37]. В указанных задачах существенной при функциональном интегрировании по $U(\mathbf{r})$ оказывается лишь малая область конфигурационного пространства $U(\mathbf{r})$ вблизи некоторой оптимальной конфигурации $U_0(\mathbf{r})$. Соответствующий метод расчета плотности состояний развит в работах И. М. Лифшица (1967) и Б. И. Гальперина и М. Лэкса (1966), ему посвящены §§ 2 и 3 данной главы.

В настоящей главе принята та же постановка задачи, что и в §§ II.1—II.13. Вдобавок мы рассматриваем лишь одну ветвь энергетического спектра электронов (для определенности — зону проводимости) и пользуемся в качестве вспомогательного изотропным параболическим законом дисперсии $E(\mathbf{p}) = p^2/2m$. Нуль отсчета энергии совмещен с границей зоны E_c , сдвинутой на среднее по ансамблю значение случайного потенциала. Таким образом, как и раньше (в гл. II), $\langle U(\mathbf{r}) \rangle = 0$. Далее, пренебрегая динамической корреляцией между электронами, мы считаем статистические характеристики случайного поля не зависящими от состояния системы электронов. Фактически такая зависимость потенциала $U(\mathbf{r})$ может войти, например, благодаря электронному экранированию; радиус экранирования может играть роль характерной длины убывания используемой ниже бинарной корреляционной функции.

Последняя определяется обычным выражением (см. (II.7.5)):

$$\Psi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \langle U(\mathbf{r})U(\mathbf{r}') \rangle. \quad (1.1)$$

В этой формуле явно указано, что роль аргумента функции Ψ играет модуль разности радиус-векторов \mathbf{r} и \mathbf{r}' . Это есть выражение макроскопической однородности и изотропии системы.

Принятые в такой постановке задачи упрощения несколько ограничивают круг систем, к которым могли бы относиться результаты теории. Все же многие закономерности и эффекты, обусловленные именно случайным характером поля, таким путем удается установить.

Наконец, будем рассматривать только гауссово случайное поле. При этом все характеристики поля выражаются только через бинарную корреляционную функцию $\Psi(\mathbf{r})$. Как отмечалось в § II.7, гауссова статистика случайного поля реализуется во многих физических интересных системах. С другой стороны, это — едва ли не простейший пример случайного поля [38].

§ 2. Метод оптимальной флуктуации

В настоящем параграфе указанный в заглавии метод будет применен к отысканию плотности состояний $\rho(E)$ в области больших по абсолютной величине отрицательных значений энергии, т. е. глубоко под дном зоны проводимости. Те же результаты справедливы и для дырок, с очевидными изменениями смысла некоторых величин. Согласно сказанному в § I.6, мы должны найти следующее среднее по ансамблю полей $U(\mathbf{r})$:

$$\rho(E) = \frac{1}{\Omega} \left\langle \sum_{\lambda} \delta(E - E_{\lambda}[U(\mathbf{r})]) \right\rangle, \quad (2.1)$$

где E_{λ} — собственные значения уравнения Шредингера в конкретном поле $U(\mathbf{r})$. Операция усреднения производится путем функционального интегрирования по полям $U(\mathbf{r})$ с плотностью распределения (II.7.12')

$$\mathcal{P}[U(\mathbf{r})] = N \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}) B(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) U(\mathbf{r}') \right\}. \quad (2.2)$$

Здесь $B(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ — положительно определенное ядро, N — (формально бесконечный) нормировочный множитель, такой, что

$$\int \mathcal{D}[U(\mathbf{r})] \mathcal{P}[U(\mathbf{r})] = 1, \quad (2.3)$$

а символом $\int \mathcal{D}[f] A[f]$ здесь и в дальнейшем обозначается операция функционального интегрирования некоторого функционала $A[f]$ по пространству функций f . Ядро $B(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ непосредственно связано с бинарной функцией $\Psi(\mathbf{r})$:

$$\int B(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \Psi(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|) d\mathbf{r}' = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}''). \quad (2.4)$$

Коль скоро нас интересует область хвоста плотности состояний, вклад в $\rho(E)$ для таких энергий может проистечь лишь от конфигураций $U(\mathbf{r})$, в которых имеются не слишком узкие ямы глубиной не менее $|E|$. Подобные ямы вносят большой вклад в фигурирующий в (2.2) интеграл, при котором стоит знак «минус», т. е. они весьма маловероятны. В этих условиях вероятность того, что в данной яме ниже рассматриваемого уровня имеется

какой-то еще, пренебрежимо мала. Иначе говоря, основной вклад в $\rho(E)$ происходит от нижних, основных уровней в ямах. Поскольку уровней с такими энергиями мало, все такие ямы можно считать изолированными друг от друга. Это означает, что мы вправе исследовать задачу о нахождении вклада от одной отдельной ямы, в которой основной уровень $E_0[U(\mathbf{r})] = E$. Искомая величина $\rho(E)$ равна плотности вероятности флуктуации $U(\mathbf{r})$, обеспечивающей появление наинизшего уровня с энергией E . Таким образом,

$$\rho(E) \sim \int \mathcal{D}[U(\mathbf{r})] \mathcal{P}[U(\mathbf{r})] \delta(E_0[U(\mathbf{r})] - E). \quad (2.5)$$

Иначе говоря, в функциональном пространстве $U(\mathbf{r})$ интегрирование ведется по гиперповерхности, на которой аргумент δ -функции равен нулю. Главный вклад в интеграл в правой части (2.5) происходит от окрестности той «точки» $U_0(\mathbf{r})$, в которой величина $\mathcal{P}[U(\mathbf{r})]$ максимальна. Записав гауссово распределение в виде

$$\mathcal{P}[U(\mathbf{r})] = N \exp\{-S[U(\mathbf{r})]\}, \quad (2.6)$$

мы приходим к задаче о нахождении минимума функционала S при условии $E_0[U(\mathbf{r})] = E$. Решение этой задачи даст нам основную, экспоненциальную зависимость плотности состояний от энергии. Интересуясь только ею, мы можем считать предэкспоненциальный множитель в формуле для плотности состояний просто константой ρ_0 соответствующей размерности. Тогда

$$-\ln \frac{\rho(E)}{\rho_0} = \min S[U(\mathbf{r})] |_{E_0[U(\mathbf{r})]=E}. \quad (2.7)$$

Обозначим через $U_0(\mathbf{r})$ ту оптимальную флуктуацию случайного поля, для которой достигается искомый минимум:

$$S_0 = S[U_0(\mathbf{r})] = \min S[U(\mathbf{r})] |_{E_0[U(\mathbf{r})]=E}. \quad (2.8)$$

Оптимальную флуктуацию $U_0(\mathbf{r})$ будем искать из задачи на условный экстремум:

$$\delta\{S[U(\mathbf{r})] + \beta E_0[U(\mathbf{r})]\} = 0, \quad (2.9)$$

где β — неопределенный множитель. Согласно (2.2) и (2.6) вариация δS по $\delta U = U - U_0$ есть

$$\delta S[U(\mathbf{r})] = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' B(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) U_0(\mathbf{r}') \delta U(\mathbf{r}). \quad (2.10)$$

Вариация функционала $E_0[U(\mathbf{r})]$ определяется известной формулой для поправки к первому собственному значению уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_0(\mathbf{r}) + U_0(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r}) = E_0 \psi_0(\mathbf{r}). \quad (2.11)$$

Эта поправка под действием возмущения $\delta U(\mathbf{r})$ дается выражением

$$\delta E_0 = \frac{\int \psi_0^*(\mathbf{r}) \delta U(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}{\int \psi_0^*(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}. \quad (2.12)$$

Здесь $\psi_0(\mathbf{r})$ — волновая функция, отвечающая низшему уровню E_0 в яме $U_0(\mathbf{r})$. Поскольку функция $U_0(\mathbf{r})$ вещественна, мы можем и ψ_0 считать вещественной. Сверх того, она по условию не имеет узлов. Используя формулы (2.10) и (2.12), находим из (2.9)

$$\int d\mathbf{r}' B(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) U_0(\mathbf{r}') + \beta \frac{\psi_0^2(\mathbf{r})}{\int d\mathbf{r}' \psi_0^2(\mathbf{r}')} = 0. \quad (2.13)$$

С помощью (2.4) отсюда непосредственно получается выражение для оптимальной флуктуации $U_0(\mathbf{r})$ через неизвестную пока волновую функцию ψ_0 основного состояния с энергией E_0 в яме $U_0(\mathbf{r})$:

$$U_0(\mathbf{r}) = \frac{-\beta}{\int \psi_0^2(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'} \int d\mathbf{r}'' \Psi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|) \psi_0^2(\mathbf{r}''). \quad (2.14)$$

Функция ψ_0 должна удовлетворять уравнению (2.11), а множитель β определяется из условия $E_0 = E$.

Итак, мы получили нелинейное уравнение типа уравнения Шредингера, но с потенциалом, зависящим от искомой функции. Очевидно, его решение можно искать в сферически симметричной форме: $\psi_0(\mathbf{r}) = \psi_0(r)$. Действительно, такой выбор формы искомого решения, с одной стороны, согласуется с приведенными после формулы (2.4) соображениями о доминирующем вкладе в $\rho(E)$ основных состояний в ямах. С другой стороны, это предположение самосогласовано, поскольку $\Psi(\mathbf{r})$ зависит лишь от $|\mathbf{r}|$, так что, согласно (2.14), оптимальная флуктуация $U_0(\mathbf{r})$ оказывается сферически симметричной одновременно с $\psi_0(r)$. Параметр β можно исключить, введя вместо $\psi_0(r)$ новую неизвестную

$$y(r) = \sqrt{\beta} \psi_0(r) \left\{ \int \psi_0^2(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right\}^{-1/2} \quad (2.15)$$

и включив условие $E_0 = E$ в уравнение (2.11). Получим

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta y(r) - \left[\int d\mathbf{r}' \Psi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) y^2(\mathbf{r}') \right] y(r) = E y(r). \quad (2.16)$$

Граничные условия к этому уравнению таковы:

$$y(r) \rightarrow 0, \quad U_0(r) \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad r \rightarrow \infty, \quad (2.17a)$$

где

$$U_0(r) = - \int d\mathbf{r}' \Psi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) y^2(r'). \quad (2.17b)$$

Заметим, что функция $y(r)$ не нормирована. Как видно из равенства (2.17b), через нее непосредственно выражается оптимальная флуктуация потенциальной энергии $U_0(\mathbf{r})$; следовательно, искомая плотность состояний, согласно (2.7), (2.8) и (2.17b), определяется формулой

$$- \ln \frac{\rho(E)}{\rho_0} \approx S_0 = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' y^2(r) \Psi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) y^2(r'). \quad (2.18)$$

Здесь целесообразно конкретизировать форму бинарной функции $\Psi(r)$. Пусть характерная длина убывания ξ_0 функции $\Psi(r)$ мала по сравнению с длиной затухания функции $y(r)$ в интересующей нас области энергий. Иначе говоря, пусть

$$\hbar^2/2m\xi_0^2 \gg |E|. \quad (2.19)$$

Это условие подлежит проверке в дальнейшем.

В этом случае в качестве $\Psi(r)$ достаточно взять выражение (II. 7.37в):

$$\Psi(r) = \Phi_0 \delta(r). \quad (2.20)$$

Это — случай так называемого «белого гауссова» шума. Ввиду его относительной простоты этот пример особенно популярен. В одномерной задаче в такой модели получен ряд точных численных и аналитических результатов (Х. Л. Фриш и С. П. Ллойд, 1960; Б. И. Гальперин, 1965; Г. Циттарц и Дж. С. Лэнджер, 1967; см. также обзоры [21, 39]).

Подставив выражение (2.20) в (2.16) и (2.18), получим

$$- \frac{\hbar^2}{2m} \Delta y(r) - \Phi_0 y^3(r) = E y(r), \quad (2.21)$$

$$- \ln \frac{\rho(E)}{\rho_0} \approx \frac{1}{2} \Phi_0 \int y^4(r) dr. \quad (2.22)$$

Теперь удобно ввести безразмерную координату

$$x = \frac{r}{\hbar} \sqrt{2m|E|} \quad (2.23)$$

и безразмерную неизвестную функцию

$$z(x) = \sqrt{\Phi_0/|E|} y(r). \quad (2.24)$$

Тогда, учитывая еще сферическую симметрию задачи, находим, что искомая функция $z(x)$ удовлетворяет нелинейному дифференциальному уравнению без параметров

$$\frac{1}{x^2} \frac{d}{dx} \left(x^2 \frac{dz}{dx} \right) - z + z^3 = 0, \quad z \rightarrow 0 \text{ при } x \rightarrow \infty; \quad (2.25)$$

при этом энергетическая зависимость плотности состояний

$$-\ln \frac{\rho(E)}{\rho_0} = \frac{\sqrt{|E|}}{\Phi_0} \frac{\hbar^3}{16m^{3/2}} c \quad (2.26)$$

оказывается явно вычисленной с точностью до числа

$$c = 4\pi \int_0^\infty x^2 dx z^4(x). \quad (2.27)$$

Значение c можно определить численными методами или путем приближенного решения уравнения (2.25). К этому вопросу мы вернемся ниже.

В более общей постановке эта задача решалась в указанных выше работах. В работе И. М. Лифшица (1967) было исследовано поведение плотности состояний для системы с большой флуктуирующей концентрацией примесных атомов — источников короткодействующего потенциала. Статистика конфигураций концентрации примеси бралась не обязательно гауссовой. В работе Б. И. Гальперина и М. Лэкса (1966) рассмотрено гауссово случайное поле, обусловленное высокой концентрацией заряженной и экранированной примеси, так что бинарная функция имела вид (II.7.37а):

$$\Psi(r) = \psi_1 e^{-r/\xi_0}, \quad (2.28)$$

где $\xi_0 = r_0$ — радиус экранирования.

В этих условиях из (2.17б) вытекает, что

$$\begin{aligned} U_0(xr_0) &= \\ &= \text{const} \int dx' x' y^2(x') \{ e^{-|x-x'|} (x+x'+1) - e^{-(x+x')} (|x-x'|+1) \}, \end{aligned} \quad (2.29)$$

где $x = r/r_0$, $x' = r'/r_0$. Уравнение (2.16) с функцией U_0 из (2.29) решалось численно для различных соотношений между энергией E и параметрами ψ_1 , r_0 . Результат для $\ln \rho(E)$ таков: зависимость $\ln \rho(E) \sim \sqrt{|E|}$ (сравните с (2.26)) с ростом $|E|$ плавно переходит в более сильную, когда неравенство (2.19) перестает удовлетворяться. В области $|E| > \sqrt{\psi_1}$, $|E| > \hbar^2/2m\xi_0^2$ мы имеем

$$-\ln \frac{\rho(E)}{\rho_0} = \frac{E^2}{2\psi_1}. \quad (2.30)$$

Последний результат для асимптотического хода плотности состояний не есть следствие аппроксимаций: как показано Л. А. Пастуром (1972), он оказывается математически строгим в довольно общих предположениях.

Возвращаясь к исследованию уравнения с самосогласованным потенциалом (2.16), отметим, что оно выражает собой условие минимума положительно определенного функционала:

$$\Theta[y(\mathbf{r})] = \frac{\left[\frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} (\nabla y(\mathbf{r}))^2 - E \int d\mathbf{r} y^2(\mathbf{r}) \right]^2}{\int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' y^2(\mathbf{r}) \Psi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) y^2(\mathbf{r}')}. \quad (2.31)$$

В этом нетрудно убедиться, непосредственно варьируя функционал $\Theta[y(\mathbf{r})]$ по $y(\mathbf{r})$. Использование этого функционала представляет определенное удобство, поскольку с его помощью приближенное решение (2.16) легко найти прямым вариационным методом. Это было проделано (Р. Эймар, Г. Дюрафур, 1973) для бинарной функции вида (2.28) с использованием простейших однопараметрических водородоподобных пробных функций $\psi_0 \sim \exp(-\alpha r)$. Результаты для плотности состояний, полученные столь несложным образом, оказались весьма близкими к полученным Б. И. Гальпериным и М. Лэксом (1966) путем громоздкого численного расчета.

Как уже упоминалось в § 1 настоящей главы, под функциональными методами здесь понимаются конкретное интегрирование по пространству случайных функций $U(\mathbf{r})$ и интегрирование по траекториям в фейнмановской лагранжевой записи квантовомеханической функции Грина. Можно, однако, вместо второй из этих операций проводить функциональное интегрирование по пространству волновых функций $\psi(\mathbf{r})$. Понятно, что эта процедура эффективна лишь тогда, когда интеграл можно приближенно вычислять по методу перевала. Так, например, ограничиваясь пространством вещественных функций $\psi(\mathbf{r})$ в области больших по модулю E , удобно рассмотреть следующий функционал:

$$\tilde{X}[\psi(\mathbf{r}), U(\mathbf{r})] = L[\psi(\mathbf{r}), U(\mathbf{r})] + S[U(\mathbf{r})], \quad (2.32)$$

где

$$L[\psi(\mathbf{r}), U(\mathbf{r})] = \frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} (\nabla \psi)^2 + \int d\mathbf{r} U(\mathbf{r}) \psi^2(\mathbf{r}) - E \int d\mathbf{r} \psi^2(\mathbf{r}). \quad (2.33)$$

Он выбран таким образом, что при заданном распределении $U(\mathbf{r})$ точка стационарности L по ψ дает решение обычного уравнения Шредингера, а величина $-S[U(\mathbf{r})]$ есть логарифм вероятности реализации $U(\mathbf{r})$. Определим теперь точку стационар-

ности функционала X одновременно по переменным $\|\psi(\mathbf{r})\|^2 = \int d\mathbf{r} \psi^2(\mathbf{r})$ и полю $U(\mathbf{r})$. Результат для $U_0(\mathbf{r})$ совпадает с (2.176), а значение X_0 в найденной таким образом точке передела совпадает с функционалом (2.31), уже, очевидно, не содержащим U и не зависящим от нормировки $y(\mathbf{r})$.

§ 3. Функция корреляции уровней

Метод оптимальной флуктуации, описанный в предыдущем параграфе, был развит для расчета одной из существенных характеристик системы — плотности состояний $\rho(E)$. Она, однако, зависит лишь от одной энергетической переменной E . Между тем бывают важны задачи, при решении которых оказывается необходимо усреднять по случайному полю выражения, зависящие от характеристик сразу двух или большего числа уровней. К числу таких задач относится, например, расчет электропроводности вещества.

Таким образом, надо ввести плотность вероятности того, что вблизи точек R' и R'' возникнут потенциальные ямы, содержащие, соответственно, уровни в интервалах $\Delta E'$ и $\Delta E''$ около точек E' и E'' . Обозначим эту величину через

$$p_2(E', E''; R', R'') \Delta E' \Delta E''. \quad (3.1)$$

Тогда среднее (по случайному полю) значение любой функции F , зависящей от энергий и центров локализации двух уровней, можно записать в виде

$$\langle F \rangle = \int dR' dR'' \sum_{E', E''} p_2(E', E''; R', R'') F \Delta E' \Delta E''. \quad (3.2)$$

Если в функции F существенны лишь достаточно малые разности уровней, на которых величина p_2 практически не изменяется, то суммирование по E' и E'' можно заменить интегрированием. При этом

$$\langle F \rangle = \int dR' dR'' \int dE' dE'' p_2(E', E''; R', R'') F. \quad (3.3)$$

Если бы события, состоящие в возникновении уровней E' и E'' с центрами локализации в точках R' и R'' , были статистически независимы, то функция p_2 давалась бы просто произведением «одноуровневых» плотностей вероятности $p(E')$ и $p(E'')$. Из принципа ослабления корреляции следует, что именно так и должно обстоять дело на достаточно больших расстояниях $R = |R' - R''|$. Положение, однако, меняется, когда значение R становится сравнимым с суммой радиусов локализации электро-

нов на рассматриваемых уровнях. Действительно*), будем мысленно сближать ямы, которые при $R \rightarrow \infty$ содержали бы одинаковые уровни. Как известно из квантовой механики, перекрытие волновых функций, возникающее при конечных R , приводит к их гибридизации и расщеплению уровней. По этой причине разность $E' - E''$ при достаточно малых значениях $|R' - R''|$ неизбежно оказывается конечной. Иначе говоря, условная вероятность того, что вблизи точки R'' возникнет потенциальная яма с уровнем E'' , если вблизи точки R' имеется яма с уровнем E' , оказывается отнюдь не постоянной в пространстве. Соответственно представим функцию p_2 в виде

$$p_2(E', E''; R', R'') = \bar{p}(E') \bar{p}(E'') \Psi(E', E''; R', R''). \quad (3.4)$$

Функция Ψ по определению безразмерна и неотрицательна. В макроскопически однородной системе она зависит только от разности $R' - R'' = R$; в отсутствие каких-либо физически выделенных направлений фактически остается только зависимость от $|R| \equiv R$.

Мы будем называть Ψ функцией корреляции (или корреляционной функцией) двух уровней. Аналогично можно ввести и функции корреляции трех, четырех и т. д. уровней.

В соответствии со сказанным выше функция Ψ должна обладать следующими свойствами:

$$\Psi(E', E'', R) \rightarrow \begin{cases} 1, & R \rightarrow \infty, \\ 0, & E'' \rightarrow E', \quad R \rightarrow 0, \\ 1, & |E' - E''| \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (3.5)$$

Условия $R \rightarrow \infty$ и $|E' - E''| \rightarrow \infty$ здесь следует понимать в смысле неравенств

$$[\gamma(E') + \gamma(E'')]R \gg 1, \quad |E' - E''| \gg \sqrt{E'E''}, \quad (3.6)$$

где $\gamma(E')$, $\gamma(E'')$ — обратные радиусы локализации соответствующих состояний.

Явный расчет функций корреляции представляет собой задачу большой сложности. В настоящее время используются следующие приближенные выражения для Ψ :

А) *исчезающе малая корреляция*:

$$\Psi = 1 \quad \text{при всех } R, E', E''. \quad (3.7)$$

Б) δ -корреляция:

$$\Psi = \bar{E}\delta(|E' - E''| - \bar{E}), \quad (3.8)$$

*) Приводимая ниже трактовка квантовой корреляции в существенных чертах принадлежит Н. Ф. Мотту [40]; возможна и классическая корреляция, также учитываемая функцией Ψ в (3.4).

где \bar{E} — некоторое среднее расстояние между уровнями. Его можно определить, замечая, что число уровней в интервале энергии ΔE с центрами локализации, лежащими в пределах шара с радиусом R , есть $(4\pi/3)R^3\bar{\rho}(E)\Delta E$. Отсюда

$$\bar{E} = \frac{3}{4\pi R^3 \bar{\rho}(E)}. \quad (3.9)$$

В) «Ступенчатая» корреляция:

$$\Psi = \theta(R - R_0), \quad (3.10)$$

где

$$R_0 = \frac{1}{\gamma(E') + \gamma(E'')} \ln \frac{\sqrt{E'E''}}{|E' - E''|}. \quad (3.11)$$

Г) Дайсоновская корреляция:

$$\Psi = [1 - Y_2(E' - E'')] \Phi(R), \quad (3.12)$$

где $\Phi(R)$ — какая-нибудь подходящая функция расстояния, Y_2 — одна из функций, вычисленных Дайсоном [41] в его статистической теории уровней сложных ядер; $Y_2(E' - E'') \rightarrow 1$ при $E' - E'' \rightarrow 0$.

Первая аппроксимация, строго говоря, не может быть правильной, ибо не удовлетворяет второму из условий (3.5). Использование ее может быть в какой-то мере оправдано, только если выражение, усредняемое с помощью функции (3.7), по каким-либо специальным причинам очень мало в области малых значений R .

Вторая аппроксимация представляет собой предельный случай более сложного выражения, полученного для одномерной системы в работе В. Л. Покровского (1966). Она также не может быть строго правильной, ибо не удовлетворяет первому из условий (3.5). Видимо, ее применение имеет известный смысл, если в усредняемом с ее помощью выражении главную роль играют малые расстояния R , а большие расстояния несущественны (аппроксимация, обратная случаю (3.7)).

Выражение (3.10) получается как следствие резко упрощенного варианта соображений Мотта (1969). Именно, будем рассматривать уровни с энергиями E' и E'' как результат расщепления двух уровней, которые были бы одинаковы при бесконечном удалении соответствующих ям. Тогда по порядку величины

$$|E' - E''| \sim \sqrt{E'E''} \exp\{-R[\gamma(E') + \gamma(E'')]\}. \quad (3.13)$$

При заданном значении $|E' - E''|$ эта формула определяет минимально возможное расстояние между центрами локализации R_0 (см. (3.11)). Заметим, что правая часть (3.11) может ока-

заться и отрицательной. При этом корреляция между уровнями в принятом приближении исчезает.

Оценка (3.13) может иметь смысл, если расстояние R , с одной стороны, столь мало, что влияние всех остальных ям несущественно, а с другой — столь велико, что $[\gamma(E') + \gamma(E'')]R \gg \gg 1$ (при этом можно воспользоваться асимптотическим видом собственных функций дискретного спектра).

Наконец, функция (3.12) получена в предположении, что плотность состояний постоянна, а полное число уровней в системе конечно. Это означает, что данная аппроксимация может быть оправдана лишь при рассмотрении уровней, достаточно близких друг к другу: энергетическое расстояние между ними должно быть мало по сравнению с характерной энергией, на которой заметно изменяется плотность состояний. Далее, большие значения R не должны играть роли при усреднении. При этом объем пространства, по которому надо усреднять, оказывается эффективно ограниченным; число уровней в этом объеме и в рассматриваемом интервале энергии действительно конечно. Явный вид функции Φ в этих условиях, видимо, не играет особой роли, и можно просто положить $\Phi = 1$.

Следует подчеркнуть, что формулы (3.7), (3.8) и (3.10) не выведены строгим образом, а угаданы. Соответственно даже в указанных выше условиях ими можно пользоваться лишь в целях ориентировки. Формула (3.11) в рамках определенных предположений получена строго; однако справедливость самих предположений, на которых основано выражение (3.10), в рассматриваемых нами условиях не вполне очевидна.

§ 4*. Функция корреляции уровней электрона в гауссовом случайном поле

Определенный интерес представляет расчет функции корреляции уровней $\Psi(E', E''; R)$ или условной вероятности $p_2(E', E''; R)$ (см. (3.4)) методом оптимальной флуктуации. Как видно из § 2, при рассмотрении гауссова случайного поля влияние его удастся учесть точно, и основная сложность состоит в решении нелинейной квантовомеханической задачи с соответствующим самосогласованным оптимальным потенциалом.

Как и в случае (2.5), ограничимся логарифмической точностью и уровнями, глубоко лежащими в хвосте плотности состояний. Теперь, однако, нас будет интересовать величина

$$p_2(E', E''; R) = \langle \delta(E_1[U(\mathbf{r})] - E') \delta(E_2[U(\mathbf{r})] - E'') \rangle. \quad (4.1)$$

Здесь E_1 и E_2 — два самых низких дискретных собственных значения уравнения Шредингера. Им отвечают взаимно ортогональные вещественные волновые функции $\psi_1(\mathbf{r})$ и $\psi_2(\mathbf{r})$, локализо-

заться и отрицательной. При этом корреляция между уровнями в принятом приближении исчезает.

Оценка (3.13) может иметь смысл, если расстояние R , с одной стороны, столь мало, что влияние всех остальных ям не существенно, а с другой — столь велико, что $[\gamma(E') + \gamma(E'')]R \gg \gg 1$ (при этом можно воспользоваться асимптотическим видом собственных функций дискретного спектра).

Наконец, функция (3.12) получена в предположении, что плотность состояний постоянна, а полное число уровней в системе конечно. Это означает, что данная аппроксимация может быть оправдана лишь при рассмотрении уровней, достаточно близких друг к другу: энергетическое расстояние между ними должно быть мало по сравнению с характерной энергией, на которой заметно изменяется плотность состояний. Далее, большие значения R не должны играть роли при усреднении. При этом объем пространства, по которому надо усреднять, оказывается эффективно ограниченным; число уровней в этом объеме и в рассматриваемом интервале энергии действительно конечно. Явный вид функции Φ в этих условиях, видимо, не играет особой роли, и можно просто положить $\Phi = 1$.

Следует подчеркнуть, что формулы (3.7), (3.8) и (3.10) не выведены строгим образом, а угаданы. Соответственно даже в указанных выше условиях ими можно пользоваться лишь в целях ориентировки. Формула (3.11) в рамках определенных предположений получена строго; однако справедливость самих предположений, на которых основано выражение (3.10), в рассматриваемых нами условиях не вполне очевидна.

§ 4*. Функция корреляции уровней электрона в гауссовом случайном поле

Определенный интерес представляет расчет функции корреляции уровней $\Psi(E', E''; R)$ или условной вероятности $p_2(E', E''; R)$ (см. (3.4)) методом оптимальной флуктуации. Как видно из § 2, при рассмотрении гауссова случайного поля влияние его удастся учесть точно, и основная сложность состоит в решении нелинейной квантовомеханической задачи с соответствующим самосогласованным оптимальным потенциалом.

Как и в случае (2.5), ограничимся логарифмической точностью и уровнями, глубоко лежащими в хвосте плотности состояний. Теперь, однако, нас будет интересовать величина

$$p_2(E', E''; R) = \langle \delta(E_1[U(\mathbf{r})] - E') \delta(E_2[U(\mathbf{r})] - E'') \rangle. \quad (4.1)$$

Здесь E_1 и E_2 — два самых низких дискретных собственных значения уравнения Шредингера. Им отвечают взаимно ортогональные вещественные волновые функции $\psi_1(\mathbf{r})$ и $\psi_2(\mathbf{r})$, локализо-

ванные в ямах, центры которых расположены, соответственно, в точках \mathbf{R}' и $\mathbf{R}'' = \mathbf{R}' - \mathbf{R}$. (Этим в известной мере предопределяется вид оптимальной функции $U_0(\mathbf{r})$.) В отличие от задачи о плотности состояний, волновые функции ψ_1 и ψ_2 уже не обладают сферической симметрией. Однако по-прежнему это — функции с минимальным числом узлов.

Используем общий вариационный подход § 2, несколько видоизменив его применительно к настоящей задаче. Нетрудно установить, что три искомые функции — волновые функции ψ_1 и ψ_2 и оптимальная потенциальная энергия $U_0(\mathbf{r})$ — составляют вместе точку стационарности функционала

$$X[U(\mathbf{r}), \psi_1(\mathbf{r}), \psi_2(\mathbf{r})] = S[U(\mathbf{r})] + L[E', U(\mathbf{r}), \psi_1(\mathbf{r})] + L[E'', U(\mathbf{r}), \psi_2(\mathbf{r})]. \quad (4.2)$$

При этом функционал S определен формулами (2.2), (2.6), а

$$L[E, U(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{r})] = \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{1}{2} (\nabla\psi)^2 + [U(\mathbf{r}) - E] \psi^2 \right\}. \quad (4.3)$$

Здесь и далее в этом параграфе использована система единиц, в которой $\hbar = m = 1$. Волновые функции ψ_1 и ψ_2 в функционале (4.2) не нормированы, но должны удовлетворять очевидному требованию ортогональности

$$\int d\mathbf{r} \psi_1(\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r}) = 0. \quad (4.4)$$

Очевидно, уравнения Лагранжа при варьировании X по ψ_1 и ψ_2 дают соответствующие уравнения Шредингера. Удобно, однако, начать с использования третьего из условий стационарности X , отвечающего равенству нулю вариации функционала X по случайному полю $U(\mathbf{r})$. Это сразу дает выражение для оптимальной флуктуации $U_0(\mathbf{r})$ через искомые волновые функции $\psi_1(\mathbf{r})$ и $\psi_2(\mathbf{r})$:

$$U_0(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{r}' \Psi(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) [\psi_1^2(\mathbf{r}') + \psi_2^2(\mathbf{r}')]. \quad (4.5)$$

Таким образом, остается найти ψ_1 и ψ_2 , удовлетворяющие условию (4.4) и такие, чтобы определяемая ими потенциальная энергия (4.5) имела две ямы на расстоянии R друг от друга.

Используя (4.5), преобразуем функционал (4.2):

$$X[U_0[\psi_1, \psi_2], \psi_1, \psi_2] \equiv Z[\psi_1, \psi_2], \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned} Z[\psi_1, \psi_2] &= \\ &= - \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' [\psi_1^2(\mathbf{r}) + \psi_2^2(\mathbf{r})] \Psi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) [\psi_1^2(\mathbf{r}') + \psi_2^2(\mathbf{r}')] + \\ &\quad + \int d\mathbf{r} \left[\frac{1}{2} (\nabla\psi_1)^2 + \frac{1}{2} (\nabla\psi_2)^2 - E' \psi_1^2 - E'' \psi_2^2 \right]. \quad (4.7) \end{aligned}$$

Здесь полезно отметить, что первое слагаемое в правой части выражения (4.7), взятое с обратным знаком, дает искомую величину (4.1):

$$-\ln p_2(E', E''; R) = S[U_0(\mathbf{r})] = \\ = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' [\psi_1^2(\mathbf{r}) + \psi_2^2(\mathbf{r})] \Psi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) [\psi_1^2(\mathbf{r}') + \psi_2^2(\mathbf{r}')]. \quad (4.8)$$

Теперь функция p_2 выражена через волновые функции ψ_1 и ψ_2 , на которых стационарен функционал Z (4.7). Можно было бы решать систему двух нелинейных уравнений типа Шредингера, отвечающую условиям стационарности Z , однако удобнее использовать прямой вариационный метод. Прежде всего, подобно тому, что было сказано в конце § 2, найдем точку стационарности функционала Z по переменным $\|\psi_1\|$ и $\|\psi_2\|$ (нормам указанных функций. При этом мы явно используем то обстоятельство, что функционалы X и Z построены на ненормированных волновых функциях. Возникающая система уравнений для амплитуд волновых функций без труда решается. После подстановки найденных значений в соотношения (4.7) и (4.8) мы получаем

$$\min_{\|\psi_1\|, \|\psi_2\|} Z[\psi_1, \psi_2] \equiv Q[\psi_1, \psi_2] = -\ln p_2(E', E''; R), \quad (4.9)$$

$$Q[\psi_1(\mathbf{r}), \psi_2(\mathbf{r})] = \frac{\mu_1^2 J_{11}^{-1} + \mu_2^2 J_{22}^{-1} - 2\mu_1 \mu_2 J_{12} J_{11}^{-1} J_{22}^{-1}}{1 - J_{12}^2 J_{11}^{-1} J_{22}^{-1}}. \quad (4.10)$$

Здесь

$$\mu_1[\psi_1(\mathbf{r}_1)] = \int d\mathbf{r} \left[\frac{1}{2} (\nabla \psi_1)^2 - E' \psi_1^2 \right], \quad (4.11)$$

$$\mu_2[\psi_2(\mathbf{r})] = \int d\mathbf{r} \left[\frac{1}{2} (\nabla \psi_2)^2 - E'' \psi_2^2 \right], \quad (4.12)$$

$$J_{ij}[\psi_1, \psi_2] = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \psi_i^2(\mathbf{r}') \Psi(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|) \psi_j^2(\mathbf{r}''). \quad (4.13)$$

Основное преимущество, достигнутое при переходе к функционалу Q , состоит в том, что он непосредственно дает логарифм искомой условной вероятности $p_2(E', E''; R)$ в результате минимизации его по формам произвольно нормированных функций ψ_1 и ψ_2 . Действительно, функционал Q положительно определен; легко убедиться, что он не сингулярен и по способу получения не зависит от нормировки функций ψ_1 и ψ_2 . Далее, легко видеть, что функционал Q допускает правильный предельный переход к случаю $R \rightarrow \infty$. Действительно, сравнивая (4.10) с (2.31), мы видим, что

$$Q(E', E'', R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \Theta(E') + \Theta(E'') = -\ln \rho(E') - \ln \rho(E''). \quad (4.14)$$

Наконец, принятый нами вариационный подход удобен и в том отношении, что он позволяет естественным образом учесть требование должной локализации волновых функций. Именно, минимизацию Q следует проводить на классе пробных пар функций, нужным образом локализованных, скажем, в точках $\mathbf{R}' = 0$ и $\mathbf{R}'' = \mathbf{R}$. Тогда оптимальная флуктуация потенциальной энергии $U_0(\mathbf{r})$ (4.5) будет обладать двумя ямами. В соответствии со сказанным в § 2, при отыскании интересующих нас решений вполне удовлетворительным приближением могут служить простые водородоподобные функции. Однако в настоящей задаче, в связи с наличием двух ям, надо использовать линейные комбинации двух таких «атомных» функций, локализованных в точках $\mathbf{R}' = 0$ и $\mathbf{R}'' = \mathbf{R}$. Иными словами, искомые волновые функции будем искать в виде линейных комбинаций функций $e^{-\gamma_1 r}$ и $e^{-\gamma_2 |r - \mathbf{R}|}$, причем вариационными параметрами будут служить коэффициенты этих линейных комбинаций и длины убывания: γ_1^{-1} и γ_2^{-1} . Естественно, названные вариационные параметры должны удовлетворять условию ортогональности (4.4). При явном расчете были использованы следующие выражения для ψ_1 и ψ_2 :

$$\begin{aligned}\psi_1(\mathbf{r}) &= \chi_1(\mathbf{r}) \cos \eta - \chi_2(\mathbf{r}) \sin \eta, \\ \psi_2(\mathbf{r}) &= \chi_1(\mathbf{r}) \sin \eta + \chi_2(\mathbf{r}) \cos \eta;\end{aligned}\quad (4.15)$$

$$\begin{aligned}\chi_1(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{2(1+s)}} [\varphi_1(\mathbf{r}) + \varphi_2(\mathbf{r})], \\ \chi_2(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{2(1-s)}} [\varphi_2(\mathbf{r}) - \varphi_1(\mathbf{r})];\end{aligned}\quad (4.16)$$

$$\begin{aligned}\varphi_1(\mathbf{r}) &= (\gamma_1^3/\pi)^{1/2} e^{-\gamma_1 r}, \\ \varphi_2(\mathbf{r}) &= (\gamma_2^3/\pi)^{1/2} e^{-\gamma_2 |r - \mathbf{R}|};\end{aligned}\quad (4.17)$$

$$\int \varphi_1^2(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int \varphi_2^2(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1;\quad (4.18)$$

$$s = \int \varphi_1(\mathbf{r}) \varphi_2(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.\quad (4.19)$$

Очевидно, функции φ_1 и φ_2 суть просто атомные функции, нормированные и локализованные у двух разных центров, находящихся на заданном расстоянии R друг от друга. Функции χ_1 и χ_2 представляют собой симметричную и антисимметричную их комбинации; они также нормированы и, сверх того, взаимно ортогональны. Параметр гибридизации η определяет вклад χ_1 и χ_2 в искомые функции ψ_1 и ψ_2 таким образом, что последние также оказываются ортонормированными. Как уже отмечалось, условия нормировки функций (4.15) не обязательны и приняты для удобства. Более интересна роль вариационного параметра η ,

характеризующего смешивание атомных функций. Минимизацию функционала Q по этому параметру гибридизации удается выполнить аналитически (А. Г. Миронов, 1976). Мы приведем результаты расчета.

Рассмотрим для конкретности случай δ -корреляции (II. 7.37в):

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Phi_0 \delta(\mathbf{r}). \quad (4.20)$$

При этом фигурирующие в функционале Q (см. (4.10)) интегралы μ_i и J_{ij} с функциями (4.15) просто, хотя и громоздко вычисляются аналитически, и минимизировать надо явную функцию параметров γ_1 , γ_2 , η и R . Эта минимизация осуществима уже лишь численно, и мы приведем только результаты для случая близких энергий E' и E'' . Именно, положим

$$E = \frac{1}{2}(E' + E''), \quad \Delta = \frac{|E' - E''|}{|E|} \quad (4.21)$$

и будем считать, что $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$ и

$$\Delta \ll 1 \quad (4.22)$$

(фактически рассматривались значения $\Delta < 0,15$). Далее, введем безразмерное расстояние

$$x = \gamma R. \quad (4.23)$$

Расчет показывает, что характер гибридизации атомных волновых функций оказывается своеобразным: оптимальный параметр гибридизации η_0 определяется следующими соотношениями:

а) на больших расстояниях

$$\cos 2\eta_0(x) = \Delta/\kappa(x) < 1, \quad x > x_0; \quad (4.24)$$

б) на малых расстояниях

$$\cos 2\eta_0(x) = \kappa(x)/\Delta < 1, \quad x < x_0. \quad (4.25)$$

Здесь x_0 — корень уравнения

$$\kappa(x_0) = \Delta; \quad (4.26)$$

функция $\kappa(x)$ вычислена численно при $x \leq 4$, а при $x \geq 4$ в пренебрежении членами $\sim e^{-2x}$ мы имеем

$$\kappa(x) = 2e^{-x}(x^2/3 - 2x + 10 - 6/x). \quad (4.27)$$

Правая часть (4.27) при $4 \leq x \leq 8$ удовлетворительно аппроксимируется следующим простым выражением:

$$\kappa(x) \approx 4,3 \exp(-x/1,3). \quad (4.28)$$

Таким образом, мы имеем

$$x_0(\Delta) \approx 1,3 \ln(4,3/\Delta). \quad (4.29)$$

При $x \gg x_0$ каждая из волновых функций $\psi_1(\mathbf{r})$ и $\psi_2(\mathbf{r})$ практически совпадает с атомной, включая лишь экспоненциально малую добавку от «чужой» ямы. При $x \approx x_0$ функции ψ_1 и ψ_2 становятся равными, соответственно, симметричной и антисимметричной линейным комбинациям атомных функций χ_1 и χ_2 . В обеих указанных ситуациях параметры γ_1 и γ_2 близки друг к другу и к оптимальному значению $\gamma_0(E)$ для «одночастичной» задачи:

$$\gamma_0(E) = \sqrt{6|E|}. \quad (4.30)$$

Наконец, при дальнейшем сближении ям, при $x < x_0$, гибридизация атомных орбиталей снова уменьшается, но начинает возрастать общий для ψ_1 и ψ_2 параметр γ .

Результаты в аналитической форме удается получить лишь для больших значений x ($x \geq 4$) и $\Delta \ll 1$. В этом случае явная зависимость Ψ от Δ отсутствует — разность энергий определяет лишь степень гибридизации атомных функций. Мы имеем в указанной области

$$\Psi(E', E''; R) \approx \Psi(E, x) = 1 - e^{-2x} \left(\frac{x^4}{9} - \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{3}x^2 + 2x + 1 - \frac{6}{x} \right). \quad (4.31)$$

Более наглядны результаты численного расчета, представленные в виде таблицы (см. табл. III).

Таблица III

$x = \gamma R$	0,75	1,0	1,25	1,5	2,0	2,5
$R\sqrt{ E }$	0,344	0,428	0,510	0,594	0,681	0,774
$-\ln \Psi$	0,45	0,35	0,25	0,22	0,17	0,13
$x = \gamma R$	3,0	3,5	4,0	4,5	5	6
$R\sqrt{ E }$	0,971	1,18	1,59	1,82	2,03	2,46
$-\ln \Psi$	0,072	0,038	0,011	0,0053	0,0026	0,0007

Очевидно, на расстояниях $R \geq 4\gamma_0^{-1}(E)$ корреляция уровней уже пренебрежимо мала. С другой стороны, на меньших расстояниях она заметна и, очевидно, обусловлена в первую очередь квантовомеханическим «отталкиванием» уровней — перекрытием волновых функций; поскольку оптимальная флуктуация U_0 выражается через квадратичные комбинации ψ_1 и ψ_2 , характерные «размеры» ям вдвое меньше радиусов локализации волновых функций.

§ 5*. Представление функции Грина в виде континуального интеграла

Рассмотрим направление исследований, связанное с представлением функций Грина в виде интегралов по траекториям [36, 37]. Возможные преимущества этого метода видны из следующих соображений.

Во-первых, в любой из задач об электроне в случайном поле мы сталкиваемся с двумя на первый взгляд разнородными проблемами. Необходимо решить квантовомеханическую задачу о вычислении той или иной физической величины (например, одночастичной функции Грина) при заданной потенциальной энергии электронов. Далее надо выполнить статистическое ее усреднение по ансамблю случайных полей, что сводится к континуальному интегрированию с весом $\mathcal{P}[U]$. Однако такое четкое разделение расчета на два этапа не всегда удобно и не всегда нужно. Дело в том, что при усреднении по случайному полю различные его конфигурации входят с разным весом; поэтому часть информации, получаемой на квантовомеханическом этапе решения задачи, может оказаться ненужной.

Во-вторых, две названные выше проблемы только кажутся разнородными. Действительно, в рамках развитой Фейнманом лагранжевой формулировки решение квантовомеханической части задачи также сводится к континуальному интегрированию. Отличие от усреднения по случайному полю состоит лишь в использовании другой меры в функциональном пространстве.

Заметим, что само по себе фейнмановское представление для функции Грина отнюдь еще не облегчает решение задачи при каком-либо конкретном виде $U(\mathbf{x})$. Исключение составляют лишь простейшие примеры, когда континуальный интеграл сводится к бесконечному произведению гауссовых интегралов, и только в этом случае он находится точно. Однако в настоящей задаче мы получаем возможность перестановки однородных операций континуального интегрирования по $U(\mathbf{x})$ и по траекториям. Из дальнейшего будет видно, что при этом может заметно упроститься квантовомеханическая часть расчета. Выполнив сначала усреднение по $U(\mathbf{x})$, мы фактически внесем в расчет конкретную информацию, связанную с такими статистическими характеристиками случайного поля, как средний его квадрат $\langle U^2(\mathbf{x}) \rangle$, функция корреляции $\langle U(\mathbf{x})U(\mathbf{x}') \rangle$ и т. д. Тем самым в задачу войдут новые физические параметры типа средней интенсивности случайного поля или характерной длины корреляции. Это позволяет развивать приближенные методы расчета сообразно малой или большой величине подобных параметров.

Второе обстоятельство, привлекающее интерес к указанному подходу, состоит в том, что приближенное вычисление бесконечнократных континуальных интегралов может быть проведено с помощью современной вычислительной техники.

Ограничимся одноэлектронной постановкой задачи (в смысле, указанном в § II. 1). Согласно [36], запаздывающую антикоммутаторную одночастичную функцию Грина $G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t)$ для электрона, движущегося в заданном поле $U(\mathbf{x})$, можно записать в виде континуального интеграла по всем траекториям $\mathbf{x}(\tau)$, проходимым за время t из точки \mathbf{x} в точку \mathbf{x}' :

$$G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) = \\ = \frac{i\theta(t)}{(2\pi it)^{3/2} N} \int \mathcal{D}[\mathbf{x}(\tau)] \exp \left\{ \frac{i}{2} \int_0^t \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) d\tau - i \int_0^t U[\mathbf{x}(\tau)] d\tau \right\}. \quad (5.1)$$

При этом

$$\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}, \quad \mathbf{x}(t) = \mathbf{x}', \quad \dot{\mathbf{x}}(\tau) = d\mathbf{x}(\tau)/d\tau. \quad (5.2)$$

Мы пользуемся здесь системой единиц, в которой $\hbar = m = 1$; через $\theta(t)$ обозначена ступенчатая функция, а N есть нормировочный множитель. Его легко найти, замечая, что при $U = 0$ мы должны получить известное выражение для свободной функции Грина:

$$G_r^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) = \frac{i\theta(t)}{(2\pi it)^{3/2} N} \int \mathcal{D}[\mathbf{x}(\tau)] \exp \left\{ \frac{i}{2} \int_0^t \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) d\tau \right\} = \\ = \frac{i\theta(t)}{(2\pi it)^{3/2}} \exp \left[i \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2}{2t} \right]. \quad (5.3)$$

Это условие, однако, еще не полностью определяет вид N . Действительно, явное выполнение континуального интегрирования требует того или иного способа задания семейства допустимых траекторий $\mathbf{x}(\tau)$, относительно которых не выдвигается никаких условий, помимо непрерывности и фиксирования концов. Для описания этого семейства требуется бесконечный набор параметров, по которым и производится интегрирование. Названными параметрами могут быть, например, значения компонент вектора $\mathbf{x}(\tau)$ в моменты времени nt/k при $k \rightarrow \infty$, $n = 1, 2, \dots, k-1$, как это было принято в исходной формулировке Фейнмана, или же коэффициенты разложения функции $\mathbf{x}(\tau)$ по какой-либо полной системе функций на интервале $(0, t)$. Выбор способа параметризации семейства $\mathbf{x}(\tau)$ определяется соображениями удобства. Для вычисления плотности состояний $\rho(E)$ надо знать усредненную функцию Грина при совпадающих пространственных аргументах: $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$, причем после усреднения

можно положить $\mathbf{x} = \mathbf{x}' = 0$. Это означает, что еще до усреднения величины (5.1) мы должны вычислять ее как интеграл лишь по замкнутым траекториям: $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}(t) = 0$. Подобные траектории удобно представлять в виде рядов Фурье

$$\mathbf{x}(\tau) = \sum_{n=0}^M \left[\mathbf{a}_n \cos \frac{2\pi n \tau}{t} + \mathbf{b}_n \sin \frac{2\pi n \tau}{t} \right], \quad (5.4)$$

причем коэффициенты разложения должны удовлетворять условию

$$\mathbf{a}_0 = - \sum_{n=1}^M \mathbf{a}_n. \quad (5.5)$$

Соответствующий нормировочный множитель N_M нетрудно найти, вычислив фигурирующий в (5.3) интеграл:

$$\begin{aligned} N_M &= \oint \mathcal{D}[\mathbf{x}(\tau)] \exp \left\{ \frac{i}{2} \int_0^t \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) d\tau \right\} = \\ &= \prod_{n=1}^M \int d\mathbf{a}_n \int d\mathbf{b}_n \exp \left\{ i \frac{\pi^2 n^2}{t} (\mathbf{a}_n^2 + \mathbf{b}_n^2) \right\} = \prod_{n=1}^M \left(\frac{it}{\pi n^2} \right)^3. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Знак \oint указывает на то, что континуальное интегрирование проводится по замкнутым траекториям, выходящим в момент времени $\tau = 0$ из точки \mathbf{x} и возвращающимся в нее же в момент времени $\tau = t$. На форму этих непрерывных траекторий не накладывается никаких дальнейших ограничений — они могут быть сколь угодно ломаными, самопересекающимися и т. д. Окончательный результат определяется как предельное значение $6M$ -кратного интеграла по переменным $\mathbf{a}_n, \mathbf{b}_n$ с нормировочным множителем N_M при $M \rightarrow \infty$. На доказательстве существования такого предельного значения при расчете конкретных физических величин мы останавливаться не будем.

Подынтегральное выражение в (5.1) содержит потенциальную энергию $U(\mathbf{x})$ только в виде линейного функционала в экспоненте:

$$\exp \left\{ -iz \int d\mathbf{x}' U(\mathbf{x}') l(\mathbf{x}') \right\}, \quad (5.7)$$

где

$$z l(\mathbf{x}') = \int_0^t d\tau \delta[\mathbf{x}' - \mathbf{x}(\tau)]. \quad (5.8)$$

Это означает, что усреднение функции Грина по случайному полю сводится просто к замене (5.7) характеристическим функционалом (см. (II. 7.8))

$$A(zI) = \left\langle \exp \left\{ -iz \int dx U(x) I(x) \right\} \right\rangle = \\ = \int \mathcal{D}[U] \mathcal{P}[U] \exp \left\{ -iz \int dx U(x) I(x) \right\}. \quad (5.9)$$

В ряде случаев функционал $A(zI)$ оказывается достаточно простым, с чем и связана практическая эффективность данного метода расчета.

В дальнейшем мы будем рассматривать случай гауссова поля. Охватывая довольно широкий круг физических условий, этот случай вместе с тем интересен и с чисто методической точки зрения. Дело в том, что характеристический функционал здесь имеет особенно простой вид, что позволяет сравнительно легко исследовать различные аппроксимации, используемые на квантовомеханическом этапе решения задачи.

Ограничимся также макроскопически однородными и изотропными системами. Тогда можно положить

$$\langle U(\mathbf{x}) \rangle = 0, \quad (5.10)$$

и характеристический функционал имеет вид (сравните с (II. 7.20))

$$A(zI) = \exp \left\{ -\frac{z^2}{2} \int dx dx' I(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') I(\mathbf{x}') \right\}, \quad (5.11)$$

где $\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ есть бинарная корреляционная функция случайного поля:

$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \langle U(\mathbf{x}) U(\mathbf{x}') \rangle.$$

В рассматриваемых условиях

$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \Psi(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|). \quad (5.12)$$

Заметим, что в силу (5.10) начало отсчета энергии совпадает у нас с перенормированной границей зоны проводимости (или дырочной), отвечающей вспомогательной задаче об идеальном материале. («Перенормировка» состоит в добавлении к E_c (или E_v) среднего значения потенциальной энергии электрона (дырки) в случайном поле.)

С учетом формулы (5.8) для $I(\mathbf{x})$ находим окончательно

$$A = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' \Psi(|\mathbf{x}(\tau) - \mathbf{x}(\tau')|) \right\}. \quad (5.13)$$

Соответственно, усредненная функция Грина от совпадающих пространственных аргументов принимает вид [37]

$$\langle G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}; t) \rangle = \frac{i\theta(t)}{(2\pi i t)^{3/2} N} \oint \mathcal{D}[\mathbf{x}(\tau)] \times \\ \times \exp \left\{ \frac{i}{2} \int_0^t \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) d\tau - \frac{1}{2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' \Psi(|\mathbf{x}(\tau) - \mathbf{x}(\tau')|) \right\} \quad (5.14)$$

В формуле (5.14) мы указали символически нормировочный множитель N для континуума траекторий $\mathbf{x}(\tau)$, подразумевая при этом выполнение описанного выше предельного перехода для интегралов, вычисленных по конечномерному пространству траекторий.

§ 6*. Качественное исследование усредненной одночастичной функции Грина

Ряд выводов относительно временной зависимости усредненной одночастичной функции Грина $\langle G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}; t) \rangle$ иногда удается сделать, не вычисляя полностью континуальный интеграл; явный вид корреляционной функции Ψ при этом также не играет роли. Так обстоит дело в тех случаях, когда можно указать наиболее существенные траектории, дающие основной вклад в интеграл в правой части (5.14). Для этой цели достаточно проанализировать сравнительную роль двух слагаемых в показателе экспоненты в (5.14):

$$Q_k = \frac{i}{2} \int_0^t \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) d\tau, \quad Q_p = -\frac{1}{2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' \Psi(|\mathbf{x}(\tau) - \mathbf{x}(\tau')|). \quad (6.1)$$

Величины Q_k и Q_p можно назвать кинетической и потенциальной частями действия (разумеется, последнее наименование носит несколько условный характер, ибо слагаемое $Q_p[\mathbf{x}(\tau)]$ отвечает мнимому и нелокальному потенциалу взаимодействия). Качественный анализ роли функционала $Q_p[\mathbf{x}(\tau)]$ требует задания лишь общих характеристик корреляционной функции Ψ . (Заметим, кстати, что именно эту функцию удобно задавать при феноменологическом подходе к задаче.)

Будем считать, что $\Psi(\mathbf{x})$ удовлетворяет следующим условиям:

- а) $\Psi(0) = \psi_1 = \langle U^2 \rangle < \infty$;
- б) $\Psi(\mathbf{x})$ монотонно убывает с ростом $|\mathbf{x}|$;
- в) убывание $\Psi(\mathbf{x})$ характеризуется единственной длиной $\xi_0 = 1/\alpha$; на этой длине функция Ψ убывает на величину порядка ее самой;

$$\text{г) } \Psi(\mathbf{x}) \geq 0;$$

$$\text{д) } \int_0^{\infty} \Psi(|\mathbf{x}|) d|\mathbf{x}| < \infty.$$

Условие а) в гауссовом поле выполняется всегда; условия б), в) и г) несколько ограничивают постановку задачи, но все же охватывают достаточно широкий круг физических систем. Простыми примерами могут служить выражения

$$\Psi = \psi_1 e^{-\alpha|\mathbf{x}|} \quad \text{и} \quad \Psi = \psi_1 e^{-\alpha^2 x^2}.$$

Итак, в соответствии со сказанным в предыдущем параграфе, мы пришли к задаче об исследовании континуального интеграла от сравнительно простого выражения, в котором вместо случайного потенциала $U(\mathbf{x})$ фигурирует регулярная функция $\Psi(\mathbf{x})$. Характеризующие ее параметры ψ_1 и $\xi_0 = \alpha^{-1}$ позволяют классифицировать различные ситуации по величине соответствующих характерных энергий или времен, а также по характерным размерам существенных орбит — замкнутых траекторий. Выделить существенные траектории позволяет следующее соображение. Траекториям, проходимым с большими скоростями $|\dot{\mathbf{x}}|$, отвечают большие по модулю значения мнимого функционала Q_k , что приводит к быстрым осцилляциям подынтегрального выражения в (5.14) в случае близких траекторий. В результате конечный вклад в свободную функцию Грина $G_r^0(t)$ дают лишь орбиты, линейные размеры которых по порядку величины не превышают \sqrt{l} . Однако при учете взаимодействия со случайным полем, описываемым с помощью функционала Q_p , подобные траектории могут оказаться невыгодными. Действительно, пусть характерный размер траектории есть L . Если $\alpha L \ll 1$, то для всех таких траекторий аргумент корреляционной функции $\Psi(|\mathbf{x}(\tau) - \mathbf{x}(\tau')|)$ практически равен нулю, а именно вблизи точки $\mathbf{x} = 0$ слагаемое с $\Psi(|\mathbf{x}|)$ дает наибольший по модулю отрицательный вклад в выражение под знаком экспоненты в (5.14). Таким образом, оптимальные траектории должны отвечать условию компенсации обеих тенденций — с увеличением размеров орбит «кинетическое» слагаемое Q_k приводит к убыванию, а «потенциальное» Q_p — к возрастанию их вклада в $G_r(t)$.

В связи со сказанным важно отметить, что в ряде задач слагаемое Q_p необходимо удерживать в экспоненте даже тогда, когда оно по тем или иным причинам мало. Действительно, разложение функции Грина по степеням Q_p означало бы переход к обычной теории возмущений; хорошо известно, однако, что хвост плотности состояний не улавливается ни в каком конечном ее порядке.

Для дальнейшего удобно воспользоваться представлением траекторий $x(\tau)$ в виде (5.4). Подставляя его в выражения (6.1) и полагая $\tau = \varphi t/2\pi$, $\tau' = \varphi' t/2\pi$, мы получаем

$$Q_k = i \frac{\pi^2}{t} \sum_{n \geq 1} n^2 (a_n^2 + b_n^2), \quad Q_\pi = -\frac{t^2}{2} \psi_1 A, \quad (6.2)$$

где

$$A = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2\pi} d\varphi' \tilde{\Psi}(\alpha u), \quad (6.3)$$

$\tilde{\Psi} = \Psi/\psi_1$ есть корреляционная функция, выраженная в единицах ψ_1 и зависящая от безразмерного аргумента αu , а

$$u = 2 \left| \sum_{n \geq 1} \sin \left(n \frac{\varphi - \varphi'}{2} \right) \left[-a_n \sin \left(n \frac{\varphi + \varphi'}{2} \right) + b_n \cos \left(n \frac{\varphi + \varphi'}{2} \right) \right] \right|. \quad (6.4)$$

Здесь принято во внимание условие а).

В силу условий а) и б) безразмерный функционал $A \leq 1$. С учетом условия в) видим, что поведение функционала

$$Q = Q_k + Q_\pi$$

определяется двумя независимыми параметрами:

$$\lambda_1 = \psi_1 t^2, \quad \lambda_2 = \alpha \sqrt{t}. \quad (6.5)$$

В обычных единицах выражения (6.5) принимают вид

$$\lambda_1 = \psi_1 t^2 / \hbar^2, \quad \lambda_2 = (\alpha^2 \hbar t / m)^{1/2}. \quad (6.6)$$

Иногда удобно вводить комбинации этих параметров

$$\lambda_3 = \lambda_2^4 / \lambda_1 = \alpha^4 / \psi_1, \quad \lambda_4 = (\lambda_1 \lambda_2^2)^{-1/3} \equiv t_c / t, \quad (6.7)$$

где

$$t_c = (\psi_1 \alpha^2)^{-1/3}, \quad (6.8)$$

или, в обычных единицах,

$$t_c = (m \hbar / \alpha^2 \psi_1)^{1/3}. \quad (6.9)$$

Рассматривая не саму функцию Грина (5.14), а ее фурье-образ по времени, следует заменить аргумент t в (6.5)–(6.7) на E^{-1} , где E — интересующее нас значение энергии.

Соотношения между параметрами λ_1 , λ_2 и т. д. определяют условия применимости различных приближенных способов вычисления континуального интеграла (5.14). Отметим несколько характерных случаев.

а) «Классический» случай. Пусть

$$\lambda_3 \ll 1, \quad \lambda_2 \ll 1, \quad \lambda_1 \lambda_2 \ll 1. \quad (6.10)$$

Эти неравенства определяют область параметров, в которой квантовые эффекты относительно невелики. Второе и третье неравенства (6.10) позволяют заменить нулем аргумент αi в формуле (6.3)*) (второе обеспечивает возможность разложения Ψ в ряд по αi , третье — возможность пренебречь соответствующими поправочными членами в функционале Q_{Π}). Первое из неравенств (6.10) появляется при вычислении плотности состояний, когда аргумент t заменяется фактически существенным его значением (см. ниже). Заметим, что неравенства (6.10) могут быть не независимы. Для дальнейшего, однако, удобно выписать их все.

В условиях (6.10) выбор оптимальных траекторий тривиален: все они близки к точке $\mathbf{x} = 0$. Полагая $A = 1$, мы приходим к известному «квазиклассическому» приближению [35]; поправки к нему получаются за счет небольших отклонений A от единицы (они рассматриваются ниже).

б) *Случай больших времен.* Пусть

$$\lambda_1 \gg 1, \quad \lambda_2 \gg 1. \quad (6.11)$$

Очевидно, при этом $\lambda_4 \ll 1$, т. е. $t \gg t_c$. С такой ситуацией приходится сталкиваться, например, при вычислении плотности состояний в области малых энергий, т. е. вблизи перенормированной границы зоны. Значения αi здесь для большинства траекторий велики. Как мы увидим, это обстоятельство позволяет выделить оптимальные траектории, по возможности уменьшая значение интеграла A .

в) *Аппроксимация «сильного случайного поля».* Ослабим условия (6.11), сохраняя только первое из них:

$$\lambda_1 \equiv \psi_1 t^2 \gg 1. \quad (6.12)$$

Очевидно, это означает, что флуктуации случайного поля в некотором смысле велики. Так, в задаче о плотности состояний неравенство (6.12) принимает вид

$$\sqrt{\langle U^2 \rangle} \gg |E|. \quad (6.13)$$

Второе из неравенств (6.11) при этом может выполняться или не выполняться; возможен также и случай, когда неравенство (6.12) комбинируется с (6.10).

*) Исключение могли бы составить траектории с очень большими значениями коэффициентов a_n и b_n . Они, однако, не дают заметного вклада в интеграл (5.14), ибо для них $Q_k \sim \lambda_2^{-2}$.

Условие (6.12) позволяет приближенно вычислять континуальный интеграл (5.14) по методу перевала.

г) «Локальная» аппроксимация. Ослабим теперь условия (6.11), сохраняя только второе из них:

$$\lambda_2 = \alpha \sqrt{t} \gg 1. \quad (6.14)$$

При этом главную роль в интеграле A играют малые (по модулю π) значения разности $|\varphi - \varphi'|$, и мы получаем

$$Q_{\pi} = - \frac{2t^2 \psi_1 c}{\alpha (2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{\left| \sum_{n \geq 1} n (-a_n \cos n\varphi + b_n \sin n\varphi) \right|}, \quad (6.15)$$

где

$$c = \int_0^{\infty} dy \tilde{\Psi}(y). \quad (6.16)$$

Здесь использовано условие д) (стр. 174).

Заметим, что в знаменателе подынтегрального выражения в (6.15) стоит не что иное, как модуль скорости $|\dot{\mathbf{x}}(\tau)|$. Аппроксимация (6.14), (6.15) сводится, в сущности, к замене

$$\Psi(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \rightarrow c_1 \delta(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|), \quad (6.17)$$

где $c_1 = c\psi_1/\alpha$. С этим и связано название «локальная».

Рассмотрим несколько подробнее случай больших времен (см. (6.11)). Очевидно, оптимальными здесь будут траектории, точки которых максимально удалены друг от друга. Это — круговые орбиты, проходящие через точку $\mathbf{x} = 0$ и произвольно ориентированные в пространстве. (В дальнейшем (§ 7) это утверждение будет доказано непосредственно.) Радиусы R указанных кругов должны быть велики по сравнению с α^{-1} .

В этих условиях нетрудно выделить основную часть зависимости функции Грина от времени. Действительно, возьмем, например, круговую орбиту $\xi(\tau)$, лежащую в плоскости xy . Это означает, что мы должны приравнять нулю все коэффициенты \mathbf{a}_n и \mathbf{b}_n в (5.4), кроме a_{0x} , a_{1x} и b_{1y} ; последние имеют вид

$$a_{0x} = a_{1x} = b_{1y} = R,$$

и

$$\xi(\tau) = R \left\{ \mathbf{a}_1 \left(\cos \frac{2\pi\tau}{t} - 1 \right) + \mathbf{b}_1 \sin \frac{2\pi\tau}{t} \right\}. \quad (6.18)$$

При этом

$$|\dot{\xi}(\tau)| = \frac{2\pi R}{t}, \quad u = 2\alpha R \left| \sin \frac{\varphi - \varphi'}{2} \right|.$$

Функционал Q превращается теперь просто в функцию радиуса R :

$$Q(R) = \frac{2\pi^2 i R^2}{t} - \frac{\lambda_1}{\pi} \int_0^{\pi/2} \tilde{\Psi}(2\alpha R \sin \chi) d\chi. \quad (6.19)$$

В силу (6.11) естественно ожидать, что существенные значения радиуса R здесь будут велики. Соответственно допустим, что $\alpha R \gg 1$ (справедливость этого допущения будет вскоре доказана непосредственной проверкой). В указанных условиях достаточно взять лишь асимптотическое выражение для интеграла, фигурирующего в (6.19):

$$F(\kappa) = \int_0^{\pi/2} d\chi \Psi(\kappa \sin \chi), \quad \kappa = 2\alpha R. \quad (6.20)$$

При $|\kappa| \gg 1$ и $\text{Re } \kappa > 0$ мы имеем

$$F(\kappa) \approx c/\kappa. \quad (6.20')$$

Здесь использованы условия γ (стр. 174) и равенство (6.16). Соответственно функция $Q(R)$ принимает вид

$$Q(R) = \frac{2\pi^2 i R^2}{t} - \frac{ct^2 \psi_1}{2\pi \alpha R}. \quad (6.21)$$

Помимо прочих параметров, описывающих траектории, интегрирование должно вестись и по переменной R . В указанных выше условиях последний интеграл можно вычислять методом перевала, распространяя интегрирование по R в комплексную плоскость. Положение седел функции

$$\exp\{Q(R)\} \quad (6.22)$$

определяется уравнением

$$0 = \frac{dQ}{dR} \Big|_{R=R_0} = \frac{4\pi^2 i R_0}{t} + \frac{ct^2 \psi_1}{2\pi \alpha R_0^2}. \quad (6.23)$$

Интересующий нас корень (6.23) имеет вид

$$R_0(t) = \frac{t}{2\pi} \left(\frac{\psi_1 c}{\alpha} \right)^{1/3} e^{i\pi/6}. \quad (6.24)$$

Сравнивая это с (6.8), видим, что условие $\alpha R \gg 1$ сводится к неравенству $t \gg t_c$, которое в рассматриваемом случае заведомо выполняется.

Подставляя выражение (6.24) в (6.21), находим основную зависимость функции Грина от времени в случае (6.11):

$$G_r(t) \sim \exp\left\{ -\frac{3}{2} e^{-i\pi/6} t \left(\frac{\psi_1 c}{\alpha} \right)^{2/3} \right\}. \quad (6.25)$$

Видим, что при больших временах ($t \gg t_c$) имеет место экспоненциальное затухание функции Грина со временем.

С другой стороны, при малых временах, когда $\lambda_1 \lambda_2 \ll 1$, $\lambda_2 \ll 1$, мы имели бы

$$Q_{II} \approx -l^2 \psi_1 / 2$$

и

$$G_r(t) \sim \exp(-l^2 \psi_1 / 2). \quad (6.26)$$

Вывод о том, что при больших временах ($t \gg t_c$) оптимальными траекториями оказались круги большого радиуса ($|\alpha R| \gg 1$), позволяет нам одновременно указать и конкретный способ интегрирования по всем траекториям в данном случае. Именно, поскольку для оптимальной траектории $\zeta(\tau)$ (6.18) величина $u = u_0$ велика почти при всех τ и τ' для достаточно широкого класса траекторий, близких к $\zeta(\tau)$, допустимо разложение функционала Q_{II} в ряд по $\delta u / u_0$. Это позволяет свести весь континуальный интеграл к гауссову, после чего он вычисляется до конца (пример такого расчета приведен в § 7).

Геометрические соображения относительно оптимальной роли круговых орбит остаются в силе и при произвольном соотношении между t и t_c , если только велик параметр λ_1 (т. е. в случае (6.12)). Соответственно остается в силе и выражение (6.19), и можно определить комплексный оптимальный радиус R_0 как соответствующий корень уравнения

$$\frac{4\pi i R}{t} - \frac{\lambda_1}{\pi} \frac{d}{dR} F(2\alpha R) = 0. \quad (6.23')$$

Будучи интегралом от непрерывной корреляционной функции $\tilde{\Psi}$, $F(x)$ есть достаточно гладкая функция своего аргумента. Следовательно, при $|x| \ll 1$ справедливо разложение

$$F(x) = \pi/2 - c_2 x, \quad (6.27)$$

где c_2 — величина порядка единицы, не зависящая от x .

Подчеркнем, что это сводится к разложению функции $\tilde{\Psi}(\alpha u)$ по ее аргументу, т. е. по $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, а не по компонентам вектора $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Это обстоятельство существенно. Так, при $\alpha u \ll 1$ разложение функции $e^{-\alpha u}$ по ее аргументу, очевидно, оправдано; в то же время производные от нее по компонентам вектора $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ имеют особенности при $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}$.

Подставляя выражение (6.27) в (6.23'), мы получаем

$$R_0(t) = i \frac{\alpha \psi_1 c_2}{4\pi^3} l^3. \quad (6.28)$$

Отсюда следует, что условие малости аргумента x сводится к неравенству $t \ll t_c$.

Равенство (6.21) дает теперь, с учетом (6.9),

$$Q[R_0(t)] = -\frac{\psi_1 t^2}{2} \left[1 - \frac{3ic_2^2}{8\pi^4} \left(\frac{t}{t_c} \right)^3 \right]. \quad (6.29)$$

Очевидно, в условиях $t \ll t_c$ существенно лишь первое слагаемое в (6.29), и мы имеем выражение (6.26). Таким образом, при малых t оптимальные орбиты почти стягиваются в точку $u = 0$. Это означает, в частности, что интегрирование по траекториям, близким к оптимальным, уже нельзя проводить так, как это было сделано в случае больших времен. Действительно, разложение функционала $Q_{\text{п}}$ по отклонениям du/u_0 здесь может оказаться неоправданным. Положение облегчается, если выполняется еще условие

$$\lambda_2 \ll 1. \quad (6.30)$$

Действительно, при этом для всех существенных траекторий, включая оптимальные и близкие к ним, функционал $Q_{\text{п}}$ слабо отклоняется от значения $-\psi_1 t^2/2$. Вклад траекторий больших размеров мал в силу быстрых осцилляций величины $\exp Q_{\text{к}}$. Отсюда вытекает, что под знаком континуального интеграла допустимо разложение по величине $Q_{\text{п}} - (-\psi_1 t^2/2)$. Заметим, что основное слагаемое $-\psi_1 t^2/2$ сохраняется при этом в показателе экспоненты. Таким образом, мы наметили также и путь расчета для случая $t \ll t_c$. В области промежуточных времен $t \sim t_c$ можно использовать решение уравнения (6.23) для построения интерполяционной формулы, дающей основную зависимость функции Грина от времени, или же просто приближенно сшить выражения, полученные для малых и больших времен.

§ 7*. Вычисление континуального интеграла для $G_r(t)$. Плотность состояний

При явном расчете функции Грина целесообразно задать конкретный вид корреляционной функции $\Psi(\mathbf{r})$. Возьмем ее в простейшем виде:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \psi_1 e^{-\alpha r}. \quad (7.1)$$

Это выражение удовлетворяет условиям а) — д) (стр. 173—174). Оно имеет и непосредственный физический смысл. Так, корреляционная функция вида (7.1) возникает в задаче о сильно легированном полупроводнике с некоррелированным распределением атомов примеси в пространстве (см. Приложение IV)*). При

*) Как мы видели в § II.7, случайное поле в такой системе при известных условиях можно рассматривать как гауссово.

этом роль характерной длины α^{-1} играет радиус экранирования r_0 , а

$$\psi_1 = 2\pi n_i^* e^4 r_0 / \epsilon^2. \quad (7.2)$$

Будем считать для простоты, что

$$\lambda_3 = \alpha^4 / \psi_1 \ll 1. \quad (7.3)$$

В задаче о примесном полупроводнике это есть обычное условие «сильного легирования» [35]. Заметим, однако, что область применимости данного метода отнюдь не ограничивается этим условием.

Обратимся сначала к сравнительно простому, но важному случаю «малых времен»:

$$t \ll t_c. \quad (7.4)$$

Тогда, как объяснено в конце предыдущего параграфа, при разложении функции Грина по отклонениям от основного члена $\exp(-\psi_1 t^2/2)$ для функции Грина получается приближенное выражение

$$\begin{aligned} G_r(t) &\approx \\ &\approx G_r^{(0)}(t) \exp(-\psi_1 t^2/2) \left\{ 1 + \frac{\psi_1 t^2}{2} - \frac{\psi_1}{2N} \int \mathcal{D}[\mathbf{r}(\tau)] \exp\{Q_k[\mathbf{r}(\tau)]\} \times \right. \\ &\quad \left. \times \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' \exp[-\alpha |\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}(\tau')|] \right\}. \quad (7.5) \end{aligned}$$

Здесь фигурирует уже сравнительно простой континуальный интеграл. Положим

$$J(t) = -\frac{\psi_1}{2N} \int \mathcal{D}[\mathbf{r}(\tau)] \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' \exp\{Q_k[\mathbf{r}(\tau)] - \alpha |\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}(\tau')|\} \quad (7.6)$$

и перейдем к фурье-образу $\Psi(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} J(t) &= -\frac{\psi_1}{2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' \frac{\alpha}{\pi^2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(k^2 + \alpha^2)^2} \times \\ &\quad \times \frac{1}{N} \int \mathcal{D}[\mathbf{r}(\tau)] \exp\{Q_k[\mathbf{r}(\tau)] + i\mathbf{k}\mathbf{r}(\tau) - i\mathbf{k}\mathbf{r}(\tau')\} \equiv \\ &\quad \equiv -\frac{4\alpha\psi_1}{\pi} \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{(k^2 + \alpha^2)^2} J_1(k, \tau - \tau', t). \quad (7.6') \end{aligned}$$

Континуальный интеграл J_1 берется элементарно:

$$J_1(k, \tau - \tau', t) = \exp\left[-\frac{i}{2} k^2 t \beta (1 - \beta)\right], \quad \beta = \frac{|\tau - \tau'|}{t}. \quad (7.6'')$$

Введем новые переменные:

$$s = k/\alpha, \quad y = 2(\tau - \tau')/t - 1, \quad z^2 = (1/8)\alpha^2 t (1 - y^2). \quad (7.7)$$

Тогда после несложных преобразований получим

$$J(t) = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^1 dy \int_0^\infty ds s^2 \exp\left[-\frac{s^2}{2} - (s + i)zs\right]. \quad (7.8)$$

Здесь уже допустимо разложение по $zs \sim (t/t_c)\lambda_3^{1/2}$. В результате несложного интегрирования находим, отбрасывая слагаемые высшего порядка малости по t/t_c :

$$G_r(t) = G_r^{(0)}(t) \exp\left(-\frac{1}{2}\psi_1 t^2\right) + \frac{\alpha t}{16\pi} \psi_1 \left[1 - \frac{\alpha\sqrt{it}}{\sqrt{2\pi}}\right] \exp\left(-\frac{1}{2}\psi_1 t^2\right). \quad (7.9)$$

Формула (7.9) получена при $t < t_c$. Легко убедиться, однако, что при вычислении фурье-образа

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty e^{iEt} G_r(t) dt$$

существенны следующие значения аргумента t :

$$\begin{aligned} t \sim |E|/\psi_1 & \text{ при } E^2 \gg \psi_1 \text{ («большие энергии»),} \\ t \lesssim \psi_1^{-1/2} & \text{ при } E^2 \ll \psi_1 \text{ («малые энергии»).} \end{aligned}$$

Выражением (7.9) можно пользоваться, если указанные величины меньше t_c . В области малых энергий это условие сводится к неравенству (7.3); с другой стороны, в области больших энергий принятое приближение оказывается справедливым, если

$$1 \ll \frac{E^2}{\psi_1} \ll \left(\frac{\psi_1}{\alpha^4}\right)^{1/3}. \quad (7.10)$$

Видим, таким образом, что условие применимости квазиклассического приближения определяется не только параметрами материала ψ_1 и α , но и той энергией, при которой вычисляется плотность состояний. Видимо, так же обстоит дело и при использовании других приближений.

Рассмотрим сначала случай $|E| \ll \psi_1^{1/2}$. Здесь допустимо разложение

$$e^{iEt} \approx 1 + iEt. \quad (7.11)$$

Отсюда для плотности состояний при малых энергиях имеем, отбрасывая второе слагаемое в квадратных скобках в (7.9):

$$\rho(E) = \psi_1^{1/4} \frac{\Gamma(3/4)}{2^{1/4}\pi^{5/2}} + \frac{E}{\psi_1^{1/4}} \frac{\Gamma(1/4)}{2^{7/4}\pi^{5/2}} + \frac{\alpha E}{\psi_1^{1/2}} \frac{1}{8\sqrt{2}\pi^{3/2}}, \quad (7.12)$$

или, в обычных единицах,

$$\rho(E) = \frac{\Gamma(3/4)}{2^{1/4}\pi^{5/2}} \frac{m^{3/2}\psi_1^{1/4}}{\hbar^3} \left\{ 1 + \frac{\Gamma(1/4)}{2^{3/2}\Gamma(3/4)} \frac{E}{\psi_1^{1/2}} + \frac{2^{3/4}\pi}{16\Gamma(3/4)} \frac{E\alpha\hbar}{m^{1/2}\psi_1^{3/4}} \right\}. \quad (7.12')$$

Первые два слагаемых в фигурных скобках в правой части (7.12') представляют собой хорошо известный результат квазиклассического приближения [13], последнее слагаемое определяет квантовую поправку к плотности состояний. Поправка такого вида была получена А. Л. Эфросом (1970) иным методом.

Согласно сказанному выше, выражение (7.12') оправдано при

$$|E| \ll \psi_1^{1/2}. \quad (7.13)$$

С другой стороны, при $E < 0$ и $|E| \gg \psi_1^{1/2}$ формула (7.9) дает

$$\rho(E) = \frac{\psi_1 \exp(-E^2/2\psi_1)}{2\pi^2 |E|^{3/2}} + \frac{\alpha \exp(-E^2/2\psi_1)}{8\sqrt{2}\pi^{3/2}\sqrt{\psi_1}} \left(E - \frac{\alpha |E|^{3/2}}{\sqrt{\psi_1}\sqrt{2\pi}} \right). \quad (7.14)$$

Первое и второе слагаемые здесь представляют собой, соответственно, результат квазиклассического приближения и квантовую поправку к нему.

Обратимся теперь к исследованию поведения функции Грина на больших временах $t \gg t_c$. Здесь надо прежде всего доказать, что круговая орбита радиуса $R_0(t)$ (см. (6.24)) действительно представляет собой точку стационарности функционала $Q[\mathbf{r}(\tau)]$. Далее надо будет вычислить континуальный интеграл по всем траекториям, близким к оптимальным. При этом вблизи точки стационарности $\zeta(\tau)$ естественно разложить функционал $Q[\mathbf{r}(\tau)]$ по отклонениям от нее. По поводу намеченной программы следует сделать одно замечание.

Прежде всего следует учесть, что точка стационарности функционала Q сильно вырождена. Действительно, в силу (5.12) рассматриваемый функционал инвариантен относительно произвольного поворота траектории как целого. Это вырождение надо учесть с самого начала, проинтегрировав $\exp Q[\mathbf{r}(\tau)]$ по угловым переменным, характеризующим положение отдельной орбиты. Согласно (6.18) интересующим нас круговым орбитам отвечают коэффициенты ряда (5.4), удовлетворяющие условиям

$$|\mathbf{a}_0| = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{b}_1|, \quad \mathbf{a}_0 = -\mathbf{a}_1, \quad (\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1) = 0, \quad \mathbf{a}_n = \mathbf{b}_n = 0, \quad n \geq 2. \quad (7.15)$$

Если принять векторы \mathbf{a}_1 , \mathbf{b}_1 и $[\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1]$ за базисные в пространстве векторов \mathbf{a}_n , \mathbf{b}_n при $n \geq 2$, то интегрирование по положениям траектории как целого сведется к интегрированию по положе-

ниям жестко связанных между собой векторов \mathbf{a}_1 и \mathbf{b}_1 . Интеграл по направлениям одного из них, скажем \mathbf{a}_1 , равен 4π , а интеграл по азимутальному углу второго вектора, \mathbf{b}_1 , относительно оси, проходящей через первый, даст еще множитель 2π . (Фактически последнее интегрирование ведется по положениям вектора $\mathbf{b}_\perp = \mathbf{b}_1 - \mathbf{a}_1 \frac{(\mathbf{a}_1 \mathbf{b}_1)}{a_1^2}$.) В результате от пространства первых гармоник \mathbf{a}_1 и \mathbf{b}_1 мы получаем

$$\frac{4\pi \cdot 2\pi}{N_1} \int_0^\infty a_1^2 da_1 \int_0^\infty b_\perp db_\perp \int_{-\infty}^\infty db_\parallel (\dots), \quad N_1 = \left(\frac{it}{\pi}\right)^3, \quad (7.16)$$

где $b_\parallel = \frac{(\mathbf{b}_1 \mathbf{a}_1)}{|\mathbf{a}_1|}$, а точками обозначены интегралы по всем остальным переменным. Удобно ввести новые переменные, в которых прежние векторы \mathbf{a}_1 и \mathbf{b}_1 входят симметрично и, кроме того, явно выделена существенная для нас величина, отвечающая радиусу орбиты:

$$R = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{a_1^2 + b_\perp^2 + b_\parallel^2}, \quad a_1 = R \sqrt{2} \cos(\psi + \pi/4),$$

$$b_\parallel = R \sqrt{2} \sin(\psi + \pi/4) \sin \varphi,$$

$$b_\perp = R \sqrt{2} \sin(\psi + \pi/4) \cos \varphi. \quad (7.17)$$

При этом вместо (7.16) мы получим

$$\frac{64\pi^2}{N_1} \int_0^\infty R^5 dR \int_{-\pi/4}^{\pi/4} d\psi \sin^2\left(\psi + \frac{\pi}{4}\right) \cos^2\left(\psi + \frac{\pi}{4}\right) \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi \cos \varphi (\dots). \quad (7.16')$$

Очевидно, чисто круговой орбите отвечают значения $\psi = 0$, $\varphi = 0$. При этом вблизи круговых орбит можно считать малыми углы ψ и φ , а также все коэффициенты \mathbf{a}_n , \mathbf{b}_n при $n \geq 2$. Малые (но не равные нулю) значения ψ отвечают превращению круга в эллипс за счет различия $|\mathbf{a}_1|$ и $|\mathbf{b}_1|$; малые (но не равные нулю) значения φ ведут к эллиптичности за счет изменения угла между векторами \mathbf{a}_1 и \mathbf{b}_1 . При анализе роли высших гармоник учтем, что мы описываем их теперь в системе координат, заданной векторами \mathbf{a}_1 и \mathbf{b}_1 . Пусть ось Ox направлена вдоль \mathbf{a}_1 , а ось Oy — вдоль \mathbf{b}_1 . Тогда, очевидно, z -компоненты векторов \mathbf{a}_n , \mathbf{b}_n ($n \geq 2$) отвечают отклонениям от круговой орбиты, нормальным к ее плоскости.

Мы можем теперь вернуться к аналитическому исследованию функционала Q вблизи оптимальных орбит. Согласно сказанному выше представим Q вблизи точки стационарности приближенным выражением, квадратичным по отклонениям $\delta \mathbf{r}(\tau) =$

$= \mathbf{r}(\tau) - \xi(\tau)$. При этом континуальный интеграл сведется к бесконечномерному гауссову, который можно вычислить факторизацией интегралов. Для этого надо лишь диагонализировать квадратичную форму

$$\delta^2 Q[\mathbf{r}(\tau)] = Q[\mathbf{r}(\tau)] - Q[\xi(\tau)]. \quad (7.18)$$

Разложение (уже квадратичного) функционала $Q_{\kappa}[\mathbf{r}(\tau)]$ труда не представляет. Обратимся к рассмотрению функционала $Q_{\Pi}[\mathbf{r}(\tau)]$. Введем величины

$$p(\tau, \tau') = |\mathbf{p}(\tau, \tau')| = |\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}(\tau')|, \quad (7.19)$$

$$p_0(\tau, \tau') = |\xi(\tau) - \xi(\tau')| = 2R_0 \left| \sin \frac{\pi}{t} (\tau - \tau') \right| \quad (7.20)$$

и составим разность

$$\delta p(\tau, \tau') = \mathbf{p}(\tau, \tau') - \mathbf{p}_0(\tau, \tau'). \quad (7.21)$$

Будем считать малой величину $|\delta p|/p_0$. Разложив по ней функционал $Q_{\Pi}[\mathbf{r}(\tau)]$ в ряд с точностью до членов второго порядка включительно, получим

$$\begin{aligned} \Delta Q_{\Pi} &\equiv Q_{\Pi}[\mathbf{r}(\tau)] - Q_{\Pi}[\xi(\tau)] = \delta^{(1)} Q_{\Pi} + \delta^{(2)} Q_{\Pi} = \\ &= -\frac{\psi_1 \alpha}{4} \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' \frac{1}{p_0} e^{-\alpha p_0} \left\{ -2(\delta \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}_0) - \right. \\ &\quad \left. - (\delta p)^2 + \frac{(\delta \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}_0)^2}{p_0^2} + \alpha p_0 \frac{(\delta \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}_0)^2}{p_0^2} \right\}. \quad (7.22) \end{aligned}$$

Первый член в фигурных скобках описывает первую вариацию Q_{Π} вблизи точки $\xi(\tau)$ и взаимно уничтожается с первой вариацией Q_{κ} . Действительно, вблизи точки $\xi(\tau)$ мы имеем

$$\begin{aligned} \frac{\delta Q_{\kappa}}{\delta \mathbf{r}} \Big|_{\mathbf{r}=\xi} &= -\ddot{\xi}(\tau) = \frac{4\pi^2 i (R_0 \mathbf{x}_0 + \xi)}{t^2}, \\ \frac{\delta Q_{\Pi}}{\delta \mathbf{r}} \Big|_{\mathbf{r}=\xi} &= -\frac{2\alpha \psi_1 t}{\pi R_0} F'(2\alpha R_0) (R_0 \mathbf{x}_0 + \xi), \end{aligned} \quad (7.23)$$

где функция F дается формулой (6.20). В рассматриваемом случае (при $2\alpha |R_0| \gg 1$)

$$F'(2\alpha R_0) \approx -\frac{1}{(2\alpha R_0)^2}. \quad (7.24)$$

Приравняв нулю первую вариацию $Q = Q_{\kappa} + Q_{\Pi}$, мы вновь получаем прежний результат (6.24), причем, в согласии с (7.1) и (6.20), $c = 1$.

Диагонализация функционала $\delta^2 Q$ выполнена в Приложении VIII. Удобно ввести переменные

$$l = \frac{\pi}{\sqrt{it}} (R - R_0), \quad c_1 = \frac{\pi R_0 \sqrt{2}}{\sqrt{it}} \psi, \quad g_1 = \frac{\pi R_0}{\sqrt{2it}} \varphi, \quad (7.25)$$

$$e_n = \frac{n\pi}{\sqrt{2it}} (a_{nx} + b_{ny}), \quad c_n = \frac{n\pi}{\sqrt{2it}} (a_{nx} - b_{ny}), \quad n \geq 2, \quad (7.26)$$

$$g_n = \frac{n\pi}{\sqrt{2it}} (a_{ny} + b_{nx}), \quad h_n = \frac{n\pi}{\sqrt{2it}} (a_{ny} - b_{nx}), \quad n \geq 2, \quad (7.27)$$

$$z_n = \frac{n\pi}{\sqrt{it}} a_{nz}, \quad \tilde{z}_n = \frac{n\pi}{\sqrt{it}} b_{nz}, \quad n \geq 2. \quad (7.28)$$

При этом, очевидно, углы ψ и φ в (7.25) считаются малыми по сравнению, соответственно, с $\pi/4$ и $\pi/2$, а $|R - R_0| \ll |R_0|$. Вид переменных (7.26) — (7.28), содержащих множитель n , указывает на то, что фактически интегрирование ведется по отклонениям скоростей, а не самих траекторий. Множители $n\pi/\sqrt{it}$ добавлены для упрощения нормировочного множителя (он равен теперь $\sqrt{\pi}$ для интеграла по каждой переменной). Это отвечает повороту осей интегрирования на углы $\pi/4$ в соответствующих комплексных плоскостях. (Это преобразование допустимо: сходимость соответствующих интегралов обеспечивается большим отрицательным членом Q_{κ} .) В выбранных переменных мы имеем

$$\begin{aligned} \delta^2 Q = & -2l^2 \left(1 - \frac{b_1 - \tilde{b}_1}{2b_1}\right) + (e_2^2 + h_2^2) \left(1 - \frac{b_2 - \tilde{b}_2}{8b_1}\right) - \\ & - \sum_{n=2}^{\infty} (z_n^2 + \tilde{z}_n^2) \left(1 - \frac{b_n}{n^2 b_1}\right) - \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ (c_n^2 + g_n^2) \left(1 - \frac{b_n - \tilde{b}_n}{2n^2 b_1}\right) - \right. \\ & \left. - \frac{b_n + \tilde{b}_n - b_1 - \tilde{b}_1}{n(n+2)b_1} (c_n e_{n+2} + g_n h_{n+2}) + (h_{n+2}^2 + e_{n+2}^2) \left[1 - \frac{b_{n+2} - \tilde{b}_{n+2}}{2(n+2)^2 b_1}\right] \right\}. \end{aligned} \quad (7.29)$$

Фигурирующие здесь величины $b_n(\kappa)$, $\tilde{b}_n(\kappa)$ берутся при значении аргумента $\kappa = \kappa_0 = 2\alpha R_0$ и определяются равенствами

$$b_n(\kappa) = 2 \int_0^{\pi/2} dy \frac{\sin^2 ny}{\sin y} e^{-\kappa \sin y}, \quad \tilde{b}_n(\kappa) = -\kappa \frac{db_n(\kappa)}{d\kappa}. \quad (7.30)$$

При интересных для нас значениях $|\kappa| \gg 1$, $\text{Re } \kappa > 0$ справедливо асимптотическое представление

$$b_n(\kappa) = 1/2 \ln(1 + 4n^2/\kappa^2) + 2n^2/\kappa^2 (4n^2 + \kappa^2) + O(\kappa^{-4}). \quad (7.31)$$

Пользуясь им, нетрудно убедиться, что, несмотря на наличие множителя n^{-2} в коэффициентах формы (7.29), последние при-

ближаются к единице лишь при $n \gg \kappa$. (Это отвечает учету только слагаемого $\delta^2 Q_\kappa$.) При меньших значениях n существенна роль слагаемого $\delta^2 Q_n$, причем коэффициенты при квадратах переменных малы. Так, при z_n^2 стоит множитель

$$-(1 - b_n/n^2 b_1) \approx -2(n^2 - 1)/\kappa^2, \quad n \ll |\kappa|. \quad (7.32)$$

Это означает, что учитывать искажения формы траектории за счет высших гармоник необходимо, и существенный вклад дает большое число гармоник. При этом упрощенный подход, использующий разложения типа (7.32) при всех n , также недопустим, ибо при $n \gg |\kappa|$ он приводил бы к существенному завышению результата от каждой гармоники и, в конце концов, к расходимости континуального интеграла.

С другой стороны, переменная R характеризует при фиксированном l среднюю скорость движения. По переменной l , отвечающей отклонениям R от R_0 , седло оказывается достаточно крутым. Действительно, коэффициент при переменной l^2 в формуле (7.29) имеет вид

$$-2 \left(1 - \frac{b_1 - \tilde{b}_1}{2b_1} \right) \approx -3. \quad (7.33)$$

Обратимся теперь к интегрированию экспоненты от квадратичной формы (7.29). Прежде всего выпишем «рецепт» интегрирования с учетом выполненных выше замен. Поскольку убывание подынтегрального выражения $\exp[\delta^2 Q]$ с ростом l , c_1 и g_1 происходит достаточно быстро (как $\exp(-3l^2 - 3c_1^2/2 - 3g_1^2/2)$), возьмем в (7.16) сразу «оптимальные» значения $R = R_0$, $\psi = 0$, $\varphi = 0$, а интегрирование по названным переменным распространим на всю ось. Получим

$$G_r(t) = G_r^{(0)}(t) \frac{32\pi^2 R_0^3}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dl}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dg_1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dc_1}{\sqrt{\pi}} e^{Q(R_0)} \times \\ \times \prod_{n=2}^{\infty} \left[\frac{1}{\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} dc_n de_n dg_n dh_n dz_n d\tilde{z}_n e^{\delta^2 Q} \right]. \quad (7.34)$$

Здесь множитель π^{-3} относится к каждой шестерке переменных при данном значении n . Если проинтегрировать по этому рецепту функцию $\exp[\delta^2 Q_\kappa]$ в пространстве гармоник с $n \geq 2$, то мы получим, конечно, единицу.

Подставим теперь выражение (7.29) в правую часть (7.34). Интеграл по l дает $1/\sqrt{3}$, интегралы по e_2 и g_2 , с учетом равенства

$$1 - (b_2 - \tilde{b}_2)/8b_1 \approx 3/2, \quad (7.35)$$

дают вместе $2/3$. Интегралы по переменным z_n и \bar{z}_n уже факторизованы и в совокупности дают множитель

$$\Pi_{\perp}(\kappa) = \prod_{n=2}^{\infty} [1 - b_n(\kappa)/n^2 b_1(\kappa)]. \quad (7.36)$$

Наконец, интегрирование по остальным переменным легко провести, заметив, что мы имеем здесь произведение независимых интегралов по парам переменных c_n, l_{n+2} и g_n, h_{n+2} . Произведение одинаковых интегралов от двух последних пар есть

$$\omega(n+1) = \left[1 - \frac{b_n - \tilde{b}_n}{2n^2 b_1}\right] \left[1 - \frac{b_{n+2} - \tilde{b}_{n+2}}{2(n+2)^2 b_1}\right] - \left[\frac{b_n + \tilde{b}_n - b_1 - \tilde{b}_1}{2n(n+2)b_1}\right]^2, \quad (7.37)$$

а произведение их по всем парам переменных, отвечающих отклонениям от оптимальной орбиты, лежащим в ее плоскости, дает величину

$$\Pi_{\parallel} = \prod_{n=1}^{\infty} \omega(n+1). \quad (7.38)$$

Оценка величин Π_{\perp} и Π_{\parallel} приведена в Приложении IX (с точностью до постоянных численных множителей a_{\perp} и a_{\parallel}) при $|\kappa| \gg 1$. Она показывает, что

$$\Pi_{\perp} = a_{\perp} \kappa^{-3} \exp(\nu \kappa), \quad \Pi_{\parallel} = a_{\parallel} \kappa^{-3} \exp\left[\kappa \left(\nu - \frac{\sqrt{3}-1}{2}\right)\right]. \quad (7.39)$$

Здесь

$$\nu = -\frac{1}{2} \int_0^{\infty} dx \ln \left[1 - \frac{1}{x^2} \ln(1+x^2)\right] \quad (7.40)$$

есть положительное число, близкое к двум.

Собирая формулы, находим

$$G_r(t) = iB \gamma^{1/3} (t/t_c)^{-2/3} \times \\ \times \exp\left\{-\frac{t}{t_c} \left[\frac{3}{2} \gamma e^{-i\pi/6} - \frac{1}{\pi} e^{i\pi/6} \left(2\nu - \frac{\sqrt{3}-1}{2}\right)\right]\right\}. \quad (7.41)$$

Здесь B — численная постоянная, равная $8\pi^{1/2} a_{\perp} a_{\parallel} / 3 \sqrt{3}$, а $\gamma = \lambda_3^{-1/3}$, где λ_3 — параметр из (6.7). В рассматриваемом случае $\lambda_3 \ll 1$ и $\gamma \gg 1$. Поскольку в наших условиях $|\kappa| = 2\alpha |R_0| = t/(\pi t_c)$, выражение (7.41) справедливо при $t \gg t_c$.

С другой стороны, при $t \ll t_c$ функция Грина дается формулой (7.9). Разумно поставить вопрос о сшивании этих выражений на каком-либо едином контуре в комплексной плоскости

сти переменной t , идущем от нуля и возвращающемся к ∞ на вещественной оси t . Такой контур пригоден для определения фурье-образа по времени. Сшивание подчиним условиям равенства как самих выражений для функции Грина, так и ее производных. Для простоты будем учитывать лишь основное слагаемое в (7.9) и только экспоненту $\exp\left(-\frac{t}{t_c} \frac{3\gamma}{2} e^{-i\pi/6}\right)$ в (7.41). Тогда точка сшивания есть

$$t_0 = \frac{3}{2} t_c e^{-i\pi/6}. \quad (7.42)$$

Поскольку $|t_0/t_c| \sim 1$, $\text{Re}(t_0/t_c) > 0$, это значение дает разумную границу применимости обоих выражений для $G_r(t)$ на контуре, идущем из точки $t=0$ в $t=t_0$ и оттуда к $t \rightarrow \infty$ при $\text{Im} t > 0$. На этом контуре мы имеем

$$\frac{G_r(t)}{G_r^{(0)}(t)} = \begin{cases} \exp\left[-\frac{\gamma}{2} \left(\frac{t}{t_c}\right)^2\right], & |t| < |t_0|, \\ \left(\frac{t_0}{t}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{\gamma}{2} \left(\frac{t_0}{t_c}\right)^2 - \frac{t-t_0}{t_c} \frac{3\gamma}{2} e^{-i\pi/6}\right], & |t| > |t_0|. \end{cases} \quad (7.43)$$

Теперь можно определить поправки к плотности состояний, проистекающие вследствие отличия поведения функции Грина (7.43) на больших временах от ее поведения при $t \ll t_c$ (см. (7.9)). Это различие приводит к следующей поправке к $\rho(E)$ при $|E| \ll \sqrt{\psi_1}$:

$$\Delta\rho(E) = \frac{1}{2}\pi^{-3/2} (\psi_1 \alpha^2)^{1/6} \exp(-9\gamma/16) \times \\ \times \left[\left(\frac{2}{3}\right)^{5/2} \frac{1}{\gamma} \sin\left(\frac{\pi}{6} - \frac{9\gamma\sqrt{3}}{16}\right) - \frac{E\gamma^{-3/2}}{(\psi_1 \alpha^2)^{1/3}} \left(\frac{2}{3}\right)^{3/2} \cos\left(\frac{9\gamma\sqrt{3}}{16}\right) \right]. \quad (7.44)$$

Эта поправка экспоненциально мала по сравнению с последним членом в правой части (7.12).

Таким образом, мы видим, что квазиклассическое приближение дает лучшие результаты, чем можно было бы ожидать. С другой стороны, следует помнить, что условие его применимости выражается не только первым, но и вторым неравенством (7.10).

ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА

§ 1. Основные механизмы переноса

Из вышеизложенного ясно, что в неупорядоченных системах со случайным полем последнее может существенно менять электронный спектр и характер электронных состояний. При этом могут потерять смысл сами представления стандартной кинетической теории. Действительно, кинетическое уравнение Больцмана основано на представлении о почти свободно движущихся частицах (квазичастицах), испытывающих сравнительно редкие столкновения. Необходимое условие применимости уравнения Больцмана есть

$$\tau_c \ll \tau. \quad (1.1)$$

Здесь $\tau_c \sim \hbar/\bar{E}$, где \bar{E} — характерная энергия квазичастицы, а τ — время релаксации импульса.

Время релаксации связано с подвижностью μ и длиной свободного пробега l обычными соотношениями:

$$\mu = \frac{e}{m} \tau, \quad l = \bar{v} \tau,$$

где \bar{v} — характерная скорость, а m — эффективная масса квазичастиц, отвечающая системе без рассеяния. Таким образом, ограничения на время релаксации связаны с соответствующими ограничениями, накладываемыми на подвижность или на длину свободного пробега. В условиях, когда $\tau \leq \tau_c$, т. е. $\mu \leq \mu_c = \frac{e\hbar}{m\bar{E}}$, длина свободного пробега квазичастиц становится

сравнимой с длиной волны де Бройля или меньше ее, и основные представления, лежащие в основе вывода кинетического уравнения, оказываются неприменимыми. Именно, движение рассматриваемых квазичастиц в таких условиях сопровождается сильным рассеянием, что может означать необходимость учета случайного поля при определении спектра самих квазичастиц.

Как мы видели в гл. II, при учете случайного поля в некоторой области энергий квазичастицы могут оказаться локализованными. В силу случайности потенциала, однако, спектр энергий локализованных состояний может оставаться всюду

плотным. Свойства локализации волновых функций в случайном поле и распределение состояний по энергиям очень существенны в явлениях переноса — согласно первой теореме о корреляции (§ I.5) проводимость системы при $T = 0$ отлична от нуля, только если уровень Ферми попадает в область делокализованных состояний, где точная (не сглаженная) плотность состояний $\rho(E)$ (§ II.1) отлична от нуля и непрерывна. Смысл этого утверждения очень прост: делокализованные волновые функции охватывают весь образец, что и обуславливает возможность безактивационного переноса заряда, энергии и т. д. Однако, в отличие от идеальных кристаллов, компоненты квазимульса в рассматриваемых системах не являются хорошими квантовыми числами (не сохраняются), а волновые функции могут весьма существенно отличаться от блоховских.

С другой стороны, в области локализованных состояний электрон с заданной энергией вообще не может достаточно далеко удалиться от своего центра локализации. Это означает, что, хотя и имеется перекрытие волновых функций некоторых состояний, отвечающих достаточно близким потенциальным ямам, его, однако, недостаточно для того, чтобы статическая проводимость системы была отлична от нуля. Для безактивационного переноса требуется существование бесконечно длинных (проходящих через всю систему) цепочек изоэнергетических переходов между различными ямами. Локализация же означает отсутствие таких цепочек, так что в области локализованных состояний стационарный перенос заряда может происходить лишь благодаря перескокам («прыжкам») частиц между состояниями с различными энергиями. Для подобных перескоков принципиально необходимо наличие системы (резервуара), которая могла бы обеспечить выполнение закона сохранения энергии при перескоках. Например, в случае статической прыжковой проводимости изменение энергии электронов при перескоках обычно компенсируется энергиями испускаемых и поглощаемых фононов. Однако фононы играют роль лишь при температуре, отличной от нуля. При $T \rightarrow 0$ статическая проводимость в слабом поле в условиях, когда уровень Ферми попадает в область локализованных состояний, должна обращаться в нуль, поскольку переходы на нижележащие уровни (с $E < F$) запрещены принципом Паули, а возбуждение на пустые уровни (с $E > F$) требует активации. Таким образом, в области локализованных состояний, т. е. при $E_0 < E < E_c$ проводимость обращается в нуль при $T = 0$.

Как известно, в области делокализованных состояний можно ввести представление о подвижности, зависящей от энергии, определяя ее соотношением $\mu(E) = (e/m)\tau(E)$, где $\tau(E)$ — время релаксации импульса, зависящее от энергии. Это — непосред-

ственно измеряемая на опыте величина: при низких температурах, когда электронный газ вырожден, играет роль только подвижность электронов на уровне Ферми $\mu(F) = (e/m)\tau(F)$. Соответственно в таких условиях зависимость $\mu(E)$ можно найти, например, изменяя положение уровня Ферми. Иногда говорят и о подвижности локализованных носителей с энергией, близкой к энергии Ферми, называя порог локализации E_c (§ II. 1) порогом подвижности, а запрещенную зону $E_v < E < E_c$ — щелью для подвижности. Заметим, однако, что при конечных температурах, когда проводимость в области локализованных состояний отлична от нуля, процедура введения подвижности, зависящей от энергии, отнюдь не очевидна. Действительно, энергия электрона не сохраняется при перескоках, и прыжковая подвижность должна представлять собой некоторую величину, усредненную по энергетическому слою, толщина которого — порядка характерного изменения энергии при перескоках. Кроме того, вообще неясно, всегда ли целесообразно говорить о прыжковой подвижности, поскольку не всегда легко разделить проводимость на произведение концентрации и подвижности; в дальнейшем мы, как правило, не будем проводить такого разделения, говоря о прыжковой проводимости (или о плотности тока).

При рассмотрении проводимости на переменном токе участие фононов в принципе уже не обязательно: выполнение закона сохранения энергии может быть обусловлено поглощением и испусканием квантов поля, с чем и связан отличный от нуля бесфононный вклад в проводимость (см. ниже, § 11). Заметим, что и статическая бесфононная проводимость может быть отличной от нуля при $T \rightarrow 0$, если система находится в существенно неравновесных условиях. Так, подсветка неравновесным электромагнитным излучением может стимулировать прыжковую проводимость при сколь угодно низких температурах (В. Л. Бонч-Бруевич, В. Чапек, 1972; Р. Кайпер, Р. Шухардт, 1974).

Роль различных механизмов проводимости в неупорядоченном полупроводнике зависит от положения уровня Ферми и от температуры. Если уровень Ферми лежит высоко в зоне проводимости, то естественно ожидать, что поведение электронов не будет очень сильно отличаться от того, что было бы в отсутствие случайного поля. Случайное поле выступает здесь лишь как причина рассеяния, которое должно быть слабым в смысле условия (1.1) для того, чтобы можно было воспользоваться методом обычной кинетической теории. Так строится, например, теория сопротивления жидких металлов, где уточнения касаются лишь более тонкого учета особенностей процесса рассеяния (Дж. М. Займан, 1961). Предположение о том, что случайное поле, вызывающее рассеяние носителей, гауссово и плавно меняется в пространстве, также позволяет довести расчеты до

конца (П. Г. Жуматий, 1976). Получаемые при этом результаты аналогичны формулам для зонных кинетических коэффициентов; в этих формулах, однако, вероятность рассеяния выражается через характеристики случайного поля.

Ситуация существенно меняется, когда уровень Ферми падает в запрещенную зону, где электронные состояния локализованы. Такая ситуация часто встречается в аморфных материалах. Измеряемую на опыте зависимость проводимости от температуры при этом часто удается описать суммой нескольких экспонент, отвечающих прямолинейным участкам на кривых $\ln \sigma - (1/T)$ и характеризующихся достаточно хорошо определенными энергиями активации. В области более низких температур проводимость может и не характеризоваться определенной энергией активации. Часто наблюдается зависимость (I.3.7). Так, для аморфных германия и кремния можно записать

$$\sigma = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_h. \quad (1.2)$$

Здесь

$$\sigma_{1,2} = B_{1,2} \exp(-\epsilon_{1,2}/T), \quad (1.3)$$

где B_1 и B_2 — сравнительно медленно меняющиеся функции температуры, а энергия активации $\epsilon_2 < \epsilon_1$. Слагаемое σ_h соответствует указанной выше низкотемпературной составляющей.

Модель плотности состояний, которая может объяснить подобное изменение проводимости с температурой, схематически представлена на рис. 4, б (стр. 69).

Вклад σ_1 связан с активационным забросом электронов в область делокализованных состояний, $E > E_c$, где, согласно проведенным выше рассуждениям, подвижность электронов существенно больше, чем при $E < E_c$. Соответственно энергия активации ϵ_1 в этом случае равна $E_c - F$. При смещении уровня Ферми и изменении энергии активации в ряде случаев величина $B_1 \equiv \sigma_{\min}$ не меняется: зависимости $\ln \sigma$ от $1/T$ аппроксимируются прямыми, сходящимися в одной точке при $T \rightarrow \infty$ *). Величина σ_{\min} получила название «минимальной металлической проводимости» (Н. Ф. Мотт, 1970). Минимальная металлическая проводимость характеризует проводимость системы вырожденных делокализованных электронов в условиях, когда уровень Ферми лежит вблизи порога подвижности. Величину σ_{\min} можно оценить [5], исходя из выражения для проводимости вырожденного газа почти свободных электронов:

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m} = \frac{S_F e^2 l}{12 \pi^3 \hbar}. \quad (1.4)$$

*) Положением уровня Ферми относительно порога подвижности можно управлять с помощью внешнего поля, например, в слое объемного заряда, образующемся на границе раздела окисел — полупроводник.

Здесь $S_F = 4\pi k_F^2$ есть площадь поверхности Ферми, а k_F — волновое число на поверхности Ферми. Если принять, что число делокализованных электронов на атом — порядка единицы, т. е. что $k_F \sim \pi/a$, где a — межатомное расстояние, и положить длину свободного пробега равной ее минимальному значению $l \sim a$, то мы получим

$$\sigma_{\min} = A \frac{e^2}{\hbar a}, \quad (1.5)$$

где A — численная постоянная. Значение A определяется видом волновых функций делокализованных электронов вблизи порога подвижности. Приближенный расчет (Н. Ф. Мотт, 1972) дает $A \approx 0,026$.

В двумерном случае аналогичные рассуждения дают $\sigma_{\min}^{(2)} = A_1 e^2/\hbar$, где A_1 — постоянная, отличная от A ; это подтверждается и результатом модельного численного расчета (Д. Я. Личчарделло, Д. Дж. Таулес, 1975). Заметим, однако, что изложенные выше рассуждения опираются, в сущности, на представление о системе носителей заряда в неупорядоченном полупроводнике как об обычном вырожденном электронном газе. По этой причине возможность ввести представление о минимальной металлической проводимости как об универсальной характеристике материала кажется не вполне очевидной, особенно если существенна роль крупномасштабных флуктуаций потенциала (см. также § II. 1).

Вклад σ_2 в (1.2) связывается с прыжковой проводимостью электронов по локализованным состояниям, расположенным выше уровня Ферми, но ниже порога локализации. Заметный вклад этих состояний может быть связан с их большой плотностью и сравнительно слабой локализацией. В этом случае энергия активации определяется положением указанной области относительно уровня Ферми. Вклад σ_2 становится сравнимым с σ_1 лишь при достаточно низких температурах, когда активация в область $E > E_c$ становится несущественной.

Наконец, при еще более низких температурах основной вклад могут давать перескоки вблизи уровня Ферми, описываемые членом σ_h , несмотря на то, что плотность локализованных состояний при $E \sim F$ может быть мала.

Для кристаллических компенсированных образцов при низких температурах экспериментальная зависимость проводимости от температуры часто содержит три экспоненциальных участка (Г. Фриче, 1958):

$$\sigma = c_1 e^{-\epsilon_1/T} + c_2 e^{-\epsilon_2/T} + c_3 e^{-\epsilon_3/T} + \sigma_h. \quad (1.6)$$

Здесь ϵ_1 — энергия активации для переходов электронов в зону проводимости, а ϵ_3 — энергия активации, определяемая положе-

нием уровня Ферми относительно примесной зоны (см. ниже, § 10). Менее твердо установлен механизм проводимости, характеризующийся энергией активации ϵ_2 . Соответствующее слагаемое в σ удастся выделить лишь в ограниченной области концентраций и степеней компенсации. Часто считают, что энергия активации ϵ_2 отвечает проводимости, обусловленной движением электронов по однократно заполненным примесным центрам. При очень низких температурах в кристаллических компенсированных образцах также наблюдается прыжковая проводимость (слагаемое σ_h), приближенно описываемая законом Мотта.

В настоящей главе мы не будем специально останавливаться на тех случаях, когда явления переноса могут быть описаны стандартной кинетической теорией. Основное внимание мы обратим на особенности явлений переноса по локализованным состояниям, специфические для неупорядоченных полупроводников, ограничиваясь при этом случаем без магнитного поля *).

§ 2. Гамильтониан в λ -представлении

Рассмотрение явлений переноса в неупорядоченных полупроводниках мы начнем с обсуждения вопроса о том, какое представление удобно выбрать для их описания. Поскольку, как уже отмечалось, взаимодействие носителей заряда со случайным полем может быть сильным, оказывается не всегда удобным использовать в качестве базиса систему собственных функций уравнения Шредингера без случайного поля.

Выбор представления блоховских функций кажется естественным, когда рассматриваются состояния, расположенные высоко в разрешенной зоне, где квазимультиплет представляет собой хорошее квантовое число, а случайное поле можно считать слабым (в смысле, указанном в § 1). Именно это представление и используется при рассмотрении явлений переноса в разрешенной зоне достаточно далеко от порога локализации.

С другой стороны, использование такого представления становится неудобным, если речь идет о состояниях локализованных или близких к порогу локализации. Естественным при этом представляется подход, основанный на выборе в качестве базиса полной ортонормированной системы функций одночастичного гамильтониана со случайным полем H_e (см. § 1.6):

$$H_e \psi_\lambda(\mathbf{x}) = E_\lambda \psi_\lambda(\mathbf{x}). \quad (2.1)$$

*) Вопрос об интерпретации экспериментов по эффекту Холла в неупорядоченных полупроводниках пока не вполне ясен. Отметим лишь, что привычная для кристаллических материалов связь постоянной Холла с концентрацией носителей заряда и их знаком здесь, вообще говоря, не имеет места (Л. Фридман, 1971).

Здесь через H_e обозначен эффективный одноэлектронный гамильтониан системы (I.6.6), который может включать в себя, в частности, эффекты экранирования и взаимодействия носителей в приближении самосогласованного поля (см. § II.1); индекс λ имеет тот же смысл, что и в § I.6. Очевидно, полная система решений уравнения (2.1) включает в себя как локализованные, так и делокализованные состояния, отвечающие различным областям собственных значений E_λ . Если температура достаточно низка, а уровень Ферми попадает в область энергий, где электронные состояния локализованы, то разложения по базисной системе $\psi_\lambda(\mathbf{x})$, используемые при вычислении соответствующих характеристик системы, фактически содержат лишь локализованные функции. Представление, получаемое с помощью указанной базисной системы функций, мы будем называть λ -представлением. В этом представлении гамильтониан H_e диагонален:

$$H_e = \sum_{\lambda} E_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda}. \quad (2.2)$$

Внутренние поля, имеющиеся в материале в состоянии равновесия, в одноэлектронном приближении учитываются при определении вида волновых функций $\psi_\lambda(\mathbf{x})$ и собственных значений энергии E_λ .

Отметим, что в общем случае индекс λ пробегает значения, отвечающие состояниям и в глубине разрешенных зон, и вблизи порога локализации, причем делокализованные функции содержат случайную фазу, отвечающую случайной части в гамильтониане H_e .

Определенное таким образом λ -представление отличается от узельного представления в идеальной решетке, основанного на использовании функций Ванье. Последние образуют полную систему локализованных функций, которые не являются собственными функциями гамильтониана и не отвечают определенной энергии. Функции $\psi_\lambda(\mathbf{x})$ — собственные функции гамильтониана задачи, отвечающие собственным энергиям E_λ , однако они локализованы, вообще говоря, не при любых энергиях, а лишь в определенной области спектра собственных значений E_λ . Кроме того, точки локализации функций $\psi_\lambda(\mathbf{x})$ случайны, а вид функций меняется при переходе от одного состояния к другому. Это создает дополнительные трудности при работе с функциями $\psi_\lambda(\mathbf{x})$, особенно в тех случаях, когда оказывается недостаточным ограничиться асимптотическим их поведением на больших расстояниях от точки локализации.

Возможен и другой подход, основанный на выборе в качестве базиса системы функций, аналогичных атомным орбиталам в методе сильной связи (Х. Бёттгер, В. В. Брыксин, 1975). Пусть

потенциальную энергию в гамильтониане можно представить в виде суммы членов, отвечающих отдельным центрам (узлам) или отдельным потенциальным ямам: $V = \sum_m V_m(\mathbf{x})$, где m — номер центра (для простоты здесь не учитывается спин). Пусть, далее, атомные орбитали $\varphi_{m\xi}(\mathbf{x})$ представляют собой решения уравнения

$$H_e^{(m)}\varphi_{m\xi}(\mathbf{x}) = E_{m\xi}\varphi_{m\xi}(\mathbf{x}), \quad (2.3)$$

где $H_e^{(m)}$ — гамильтониан с потенциальной энергией $V_m(\mathbf{x})$, а индекс ξ нумерует собственные состояния уравнения атомного типа (2.3). Заметим, что волновые функции $\varphi_{m\xi}$ разных ям неортогональны — соответствующие интегралы неортогональности $\int \varphi_{m\xi}^*(\mathbf{x})\varphi_{m'\xi'}(\mathbf{x})d\mathbf{x}$ отличны от нуля при $m \neq m'$. При рассмотрении явлений, обусловленных глубокими флуктуационными уровнями, обычно бывает достаточно ограничиться только основным состоянием в каждой яме (§ III. 2). Пусть это состояние описывается волновой функцией $\varphi_m(\mathbf{x})$. Тогда в пространстве функций $\varphi_m(\mathbf{x})$ гамильтониан H_e в представлении вторичного квантования принимает вид

$$H_e = \sum_m \tilde{E}_m \tilde{a}_m^+ \tilde{a}_m + \sum_{mm'} I(m, m') \tilde{a}_m^+ \tilde{a}_{m'}, \quad (2.4)$$

где \tilde{a}_m^+ , \tilde{a}_m — операторы рождения и уничтожения электрона в состоянии φ_m ,

$$\tilde{E}_m = \int \varphi_m^*(\mathbf{x}) H_e \varphi_m(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (2.5)$$

а $I(m, m')$ есть обычный интеграл перекрытия:

$$I(m, m') = \int \varphi_m^*(\mathbf{x}) H_e \varphi_{m'}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (2.6)$$

Если под m понимать лишь индекс центра локализации, то гамильтониан (2.4) оказывается уже усеченным — базисная система содержит лишь первые собственные функции уравнений (2.3), отвечающие отдельным потенциальным ямам. Это обстоятельство может, однако, оказаться несущественным, если речь идет о глубоких локализованных состояниях, когда систему функций $\varphi_m(\mathbf{x})$ можно приближенно рассматривать как полную. В этом случае функции $\psi_\lambda(\mathbf{x})$ в принципе можно приближенно представить в виде линейных комбинаций атомных орбиталей; обратный переход от функций $\varphi_m(\mathbf{x})$ к ортонормированной системе функций $\psi_\lambda(\mathbf{x})$ диагонализует гамильтониан (2.4). Если перекрытие соседних атомных орбиталей мало, то функция $\psi_\lambda(\mathbf{x})$ содержит лишь небольшую примесь атомных волновых

функций соседних узлов (с отличающимися энергиями). При этом матричные элементы, построенные на функциях $\psi_\lambda(\mathbf{x})$, близки к матричным элементам, вычисляемым с атомными орбиталями $\varphi_m(\mathbf{x})$.

Использование той или иной базисной системы функций, коль скоро она полна, диктуется, разумеется, лишь соображениями удобства. В дальнейшем нам представляется более удобным работать с полной ортонормированной системой функций $\psi_\lambda(\mathbf{x})$ из (2.1), которые в области энергий $E_v < E < E_c$ отвечают локализованным состояниям.

Запишем теперь полный гамильтониан системы в λ -представлении. Наряду со слагаемым (2.2) в него входят еще гамильтонианы взаимодействия электронов с фононами, друг с другом и с внешним полем, а также гамильтониан фононов.

Гамильтониан электрон-фононного взаимодействия в конфигурационном представлении запишем в обычном виде, линейном по нормальным координатам атомной матрицы Q_q :

$$H_{e, \text{ph}} = \sum_q B_q(\mathbf{x}) Q_q.$$

Переходя к λ -представлению, получим

$$H_{e, \text{ph}} = \sum_{\lambda\lambda'q} \{B_{\lambda\lambda'}^q a_\lambda^\dagger a_{\lambda'} b_q + \text{э. с.}\}. \quad (2.7)$$

Индекс q здесь обозначает совокупность квантовых чисел, характеризующих колебания решетки, для длинноволновых акустических колебаний это есть просто волновой вектор фонона (см. § II.4); b_q^\dagger , b_q — операторы рождения и уничтожения фононов, а $B_{\lambda\lambda'}^q$ есть матричный элемент величины $B_q(\mathbf{x})$, взятый с волновыми функциями $\psi_\lambda(\mathbf{x})$. Обобщенные координаты и импульсы связаны с операторами рождения и уничтожения фононов b_q^\dagger , b_q обычными соотношениями:

$$Q_q = \frac{b_q + b_q^\dagger}{\sqrt{2}}, \quad -i \frac{\partial}{\partial Q_q} = \frac{b_q - b_q^\dagger}{i\sqrt{2}}. \quad (2.8)$$

Всюду в дальнейшем при рассмотрении колебаний атомной матрицы мы будем ограничиваться гармоническим приближением. С учетом (2.8) гамильтониан колебаний атомной матрицы принимает стандартный вид:

$$H_{\text{ph}} = \sum_q \hbar \omega_q (b_q^\dagger b_q + 1/2). \quad (2.9)$$

Вообще говоря, суммирование в (2.9) включает в себя все типы колебаний, в том числе и локализованные фононные моды.

Гамильтониан взаимодействия электронов с внешним электрическим полем H_f в λ -представлении имеет вид

$$H_f = \sum_{\lambda\lambda'} (\lambda | \mathcal{V} | \lambda') a_{\lambda}^+ a_{\lambda'}, \quad (2.10)$$

где $(\lambda | \mathcal{V} | \lambda') = \int d\mathbf{x} \psi_{\lambda}^*(\mathbf{x}) \mathcal{V}(\mathbf{x}) \psi_{\lambda'}(\mathbf{x})$, а $\mathcal{V}(\mathbf{x})$ есть изменение потенциальной энергии электрона при наложении внешнего электрического поля. При нашем выборе базисной системы имевшиеся в отсутствие внешнего поля внутренние поля, формирующие спектр, считаются уже включенными в гамильтониан H_e .

Величина $\mathcal{V}(\mathbf{x})$ представляет собой разность между потенциальной энергией электрона во внешнем поле и в отсутствие поля; ее называют потенциальной энергией в «действующем» поле, которое, таким образом, создается как внешними зарядами, так и перераспределением зарядов системы, вызванным внешним полем. Мы увидим ниже, что изменение среднего числа заполнения от узла к узлу может заметно флуктуировать; соответственно даже при слабых внешних воздействиях действующее поле может быть весьма неоднородным.

Наконец, гамильтониан «остаточного» (не включенного в H_e и H_f) электрон-электронного взаимодействия в λ -представлении имеет тот же вид, что и в формуле (II. 16.1):

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda\lambda' \lambda_1 \lambda_1'} (\lambda, \lambda' | V | \lambda_1', \lambda_1) a_{\lambda}^+ a_{\lambda'}^+ a_{\lambda_1'} a_{\lambda_1}, \quad (2.11)$$

где

$$(\lambda, \lambda' | V | \lambda_1', \lambda_1) =$$

$$= \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \psi_{\lambda}^*(\mathbf{x}) \psi_{\lambda'}^*(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{\lambda_1'}(\mathbf{x}') \psi_{\lambda_1}(\mathbf{x}). \quad (2.12)$$

В виде (2.11) можно представить не только кулоновское взаимодействие носителей заряда, но и эффективное их взаимодействие, обусловленное либо обменом фононами, либо локальной перестройкой решетки в окрестности локализованного носителя заряда.

Основной кинетической характеристикой системы служит неравновесная одночастичная матрица плотности

$$f_{\lambda\lambda'}(t) = \text{Sp } \rho(t) a_{\lambda}^+ a_{\lambda'}, \quad (2.13)$$

где $\rho(t)$ есть полная неравновесная матрица плотности. Она удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H, \rho(t)] \quad (2.14)$$

с полным гамильтонианом

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e, ph} + H_{ee} + H_f \quad (2.15)$$

(в гамильтониан, очевидно, можно включить и магнитное поле). Величина (2.13) может описывать также наличие термических (не включенных в гамильтониан) воздействий типа градиента температуры.

Основные кинетические характеристики системы (электропроводность, термоэдс, коэффициент диффузии и т. д.) можно выразить через одночастичную матрицу плотности (2.13). Удобно, однако, обсудить подробнее вопрос о конкретном виде этих выражений несколько ниже, в § 5.

§ 3. Кинетическое уравнение

Рассмотрим вначале процесс временной эволюции системы в отсутствие внешних полей. В настоящем параграфе мы получим (И. П. Звягин, Р. Кайпер, 1972; см. обзоры [37, 42]) кинетическое уравнение для одночастичной матрицы плотности с помощью методов, аналогичных используемым в теории необратимых процессов [43]. Для получения кинетического уравнения воспользуемся уравнениями движения для операторов $a_{\lambda'}^+$, a_{λ} в представлении Гейзенберга. С этой целью перепишем выражение (2.13) для $f_{\lambda\lambda'}(t)$ в виде

$$f_{\lambda\lambda'}(t) = \text{Sp } \rho(0) a_{\lambda'}^+(t) a_{\lambda}(t), \quad (3.1)$$

где $\rho(0) = \rho(t)|_{t=0}$, а

$$a_{\lambda}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} H t\right) a_{\lambda} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t\right) \quad (3.2)$$

есть оператор в представлении Гейзенберга.

Удобно применить стандартный прием, известный из квантовой теории поля. Именно, будем считать, что все взаимодействия (с внешними полями и между частицами) адиабатически включаются при $t = -\infty$. Соответствующая матрица плотности $\rho_0 \equiv \rho(-\infty)$ описывает систему равновесных невзаимодействующих электронов и фононов, а матрица плотности $\rho(0)$ уже включает в себя эффекты всевозможных взаимодействий. Кинетическое уравнение представляет собой замкнутое уравнение для функции $f_{\lambda\lambda'}(t)$, не содержащее величин, усреднение в которых проводится с матрицей ρ_0 .

Запишем уравнение движения для функции $f_{\lambda\lambda'}(t)$, считая, что внешних полей нет, а гамильтониан имеет вид

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e, ph}. \quad (3.3)$$

Мы пренебрегаем здесь эффектами, связанными с прямым взаимодействием электронов друг с другом; роль их будет обсуждаться в §§ 13, 14. Имеем

$$i\hbar \frac{\partial f_{\lambda\lambda'}}{\partial t} + (E_\lambda - E_{\lambda'}) f_{\lambda\lambda'} = \sum_{\lambda_1 q l} \{ B_{\lambda'\lambda_1}^q \langle a_\lambda^+ a_{\lambda_1} \beta_q^{(l)} \rangle - B_{\lambda_1\lambda}^q \langle a_{\lambda_1}^+ a_\lambda \beta_q^{(l)} \rangle \} \quad (j=1, 2), \quad (3.4)$$

где для сокращения записи введены обозначения

$$\beta_q^{(1)} = b_q, \quad \beta_q^{(2)} = b_{-q}^+, \quad (3.5)$$

$$\langle \dots \rangle = \text{Sp } \rho(t) \dots \quad (3.6)$$

а через $-q$ обозначены квантовые числа фононов в состояниях, сопряженных по времени, так что, например, $B_{\lambda\lambda'}^q \equiv (B_{\lambda'\lambda}^q)^*$.

Уравнение (3.4) справедливо и в случае, когда состояния делокализованы. В стандартной зонной теории кристаллов, когда в набор квантовых чисел входят компоненты квазиимпульса, второй член в левой части (3.4) дает диффузионный член кинетического уравнения при наличии плавной пространственной неоднородности.

При наложении внешнего электрического поля, описываемого гамильтонианом (2.10), в правой части уравнения (3.4) появляется дополнительное слагаемое

$$\sum_{\lambda_1} \{ (\lambda' | \mathcal{Y} | \lambda_1) f_{\lambda\lambda_1} - (\lambda_1 | \mathcal{Y} | \lambda) f_{\lambda_1\lambda} \}. \quad (3.7)$$

При переходе к импульсному представлению оно приводит к обычному выражению для полевого члена кинетического уравнения.

Уравнение (3.4) зацепляется за уравнение для функций типа $\langle a_\lambda^+ a_{\lambda_1} \beta_q^{(l)} \rangle$, которое имеет вид

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + E_\lambda - E_{\lambda_1} + (-1)^l \hbar \omega_q \right\} \langle a_\lambda^+ a_{\lambda_1} \beta_q^{(l)} \rangle = \sum_{\lambda_2 \lambda_3 \lambda l} B_{\lambda_2 \lambda_3}^x \{ \langle a_\lambda^+ a_{\lambda_1} a_{\lambda_2}^+ a_{\lambda_3} \beta_q^{(l)} \beta_x^{(l)} \rangle - \langle a_{\lambda_2}^+ a_{\lambda_3} a_\lambda^+ a_{\lambda_1} \beta_x^{(l)} \beta_q^{(l)} \rangle \}. \quad (3.8)$$

Будем пока считать, что $B_{\lambda\lambda'}^q = 0$ при $\lambda = \lambda'$. Слагаемые с $\lambda = \lambda'$ можно исключить каноническим преобразованием, осуществляющим переход к новым операторам рождения и уничтожения электрона. Как и в обычной теории поляронов, эти операторы отвечают состояниям электронов в деформированной атомной матрице — материале, атомы которого смещены в новые положения равновесия. Учет этой деформации может оказаться

существенным при рассмотрении многофононных перескоков (см. § 7).

Будем считать взаимодействие, вызывающее переходы между локализованными состояниями, достаточно слабым. Соответственно положим $B_{\lambda\lambda'}^q \sim g$, где g — формально введенный безразмерный малый параметр (фактический параметр разложения будет указан ниже). В силу наложенного выше условия при $t = -\infty$ диагональные элементы $f_{\lambda\lambda}(t) \equiv f_{\lambda}(t)$ — порядка g^0 , а функции $\langle a_{\lambda}^+ a_{\lambda'} \beta_q^{(j)} \rangle$ и $f_{\lambda\lambda'}(t)$ при $\lambda \neq \lambda'$ — по крайней мере порядка g . Соответственно должно иметь место условие

$$f_{\lambda} \gg f_{\lambda\lambda'} \quad (\lambda \neq \lambda'). \quad (3.9)$$

Уравнение для диагональных элементов одночастичной матрицы плотности, согласно (3.4), имеет вид

$$\hbar \frac{\partial f_{\lambda}}{\partial t} = 2 \operatorname{Im} \sum_{\lambda_1 q j} B_{\lambda\lambda_1}^q \langle a_{\lambda}^+ a_{\lambda_1} \beta_q^{(j)} \rangle. \quad (3.10)$$

Для того чтобы получить замкнутое уравнение для функций f_{λ} , нужно выразить через них правую часть уравнения (3.8), проведя соответствующее расщепление. Расщепление проводится путем выделения всевозможных спариваний электронных операторов с учетом условия (3.9), причем фононная система считается находящейся в равновесии*). Например,

$$\langle a_{\lambda}^+ a_{\lambda_1} a_{\lambda_2}^+ a_{\lambda_3} \beta_q^{(j)} \beta_{\kappa}^{(l)} \rangle \approx \{ \delta_{\lambda\lambda_1} \delta_{\lambda_2\lambda_3} f_{\lambda} f_{\lambda_2} + \delta_{\lambda\lambda_3} \delta_{\lambda_1\lambda_2} f_{\lambda} (1 - f_{\lambda_1}) \} \langle \beta_q^{(j)} \beta_{\kappa}^{(l)} \rangle_0. \quad (3.11)$$

Это расщепление аналогично расщеплению цепочки уравнений для двухчастичной функции Грина, используемому в теории явлений переноса делокализованными носителями заряда («зонный перенос») [44]. Непосредственным сравнением уравнений для левой и правой частей выражения (3.11) нетрудно убедиться, что параметром расщепления служит введенная выше безразмерная константа g .

Для равновесных функций $\langle \beta_q^{(j)} \beta_{\kappa}^{(l)} \rangle_0$ имеем

$$\langle \beta_q^{(j)} \beta_{\kappa}^{(l)} \rangle_0 = \left\{ \left(N_q + \frac{1}{2} \right) |j - l| - \frac{l - j}{2} \right\} \delta_{q, -\kappa} \quad (3.12)$$

где N_q есть обычная функция Бозе — Эйнштейна: $N_q = \left(\exp \frac{\hbar \omega_q}{T} - 1 \right)^{-1}$; $j, l = 1, 2$. Очевидно, среднее (3.12) от-

*) Это упрощение оправдано при не слишком большой силе тока и достаточно хорошем теплообмене между образцом и окружающей средой. В интересующих нас линейных задачах это условие, как правило, выполняется. При этом следует иметь в виду, что в области локализованных состояний эффекты увлечения отсутствуют (см. ниже, § 12).

лично от нуля лишь при $j \neq l$ (т. е. при $l = 3 - j$) и выражается через функцию

$$\varphi_q^{(j)} = \langle \beta_q^{(j)} \beta_{-q}^{(3-j)} \rangle_0 = \frac{(-1)^j}{\exp \left[(-1)^j \frac{\hbar \omega_q}{T} \right] - 1}. \quad (3.13)$$

После расцепления уравнение (3.8) принимает вид

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + E_\lambda - E_{\lambda_1} + (-1)^j \hbar \omega_q \right\} \langle a_\lambda^+ a_{\lambda_1} \beta_q^{(j)} \rangle = \\ = B_{\lambda, \lambda_1}^{-q} \{ f_\lambda (1 - f_{\lambda_1}) \varphi_q^{(j)} - f_{\lambda_1} (1 - f_\lambda) \varphi_{-q}^{(3-j)} \}. \quad (3.14)$$

Его можно решить относительно функции $\langle a_\lambda^+ a_{\lambda_1} \beta_q^{(j)} \rangle$ с начальным условием $\langle a_\lambda^+ a_{\lambda_1} \beta_q^{(j)} \rangle|_{t=-\infty} = 0$ (адиабатическое включение взаимодействия при $t = -\infty$). Получаем

$$\langle a_\lambda^+ a_{\lambda_1} \beta_q^{(j)} \rangle|_t = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' B_{\lambda, \lambda_1}^q \{ f_\lambda (t') (1 - f_{\lambda_1} (t')) \varphi_q^{(j)} - \\ - f_{\lambda_1} (t') (1 - f_\lambda (t')) \varphi_{-q}^{(3-j)} \} \exp [i (E_\lambda - E_{\lambda_1} + (-1)^j \hbar \omega_q) (t - t')]. \quad (3.15)$$

После подстановки (3.15) в (3.10) получается замкнутая система уравнений для функций $f_\lambda(t)$:

$$\hbar^2 \frac{\partial f_\lambda}{\partial t} = -2 \operatorname{Re} \int_{-\infty}^t dt' \sum_{\lambda_1 q j} |B_{\lambda, \lambda_1}^q|^2 \{ f_\lambda (t') (1 - f_{\lambda_1} (t')) \varphi_q^{(j)} - \\ - f_{\lambda_1} (t') (1 - f_\lambda (t')) \varphi_{-q}^{(3-j)} \} \exp [i (E_\lambda - E_{\lambda_1} + (-1)^j \hbar \omega_q) (t - t')]. \quad (3.16)$$

Отметим, что полученное уравнение описывает немарковский процесс, т. е. процесс «с памятью», когда значение производной $\partial f_\lambda / \partial t$ определяется значениями функции $f_\lambda(t)$ во все предшествующие моменты времени. Подобные немарковские поправки появляются при рассмотрении членов высших порядков и при квантовомеханическом обобщении уравнения Больцмана. Мы увидим сейчас, что если ограничиться членами низшего порядка по параметру g , то уравнение (3.16) переходит в марковское. Действительно, правая часть (3.16) может быть представлена в виде суммы членов типа

$$\int_{-\infty}^t dt' \mathcal{F}_{\lambda, \lambda_1}^{(j)}(t') \exp [i \Omega_{\lambda, \lambda_1}^{(j)}(t - t')], \quad (3.17)$$

где $\hbar \Omega_{\lambda, \lambda_1}^{(j)} \equiv E_\lambda - E_{\lambda_1} + (-1)^j \hbar \omega_q$, а выражение для $\mathcal{F}_{\lambda, \lambda_1}^{(j)}(t')$ легко получается из сравнения (3.17) с (3.16). Подынтегральное

выражение здесь представляет собой произведение осциллирующей функции на функцию $\mathcal{F}_{\lambda\lambda'}^{(j)}(t')$, зависимость которой от времени определяется зависимостью от времени функций $f_{\lambda}(t)$, $f_{\lambda'}(t)$. Основной вклад в интеграл (3.17) дает область значений $t - t' \leq \bar{\Omega}_{\lambda\lambda'}^{-1}$. Если эта область меньше характерного времени релаксации τ , определяемого кинетическим уравнением, то в подынтегральном выражении $\mathcal{F}_{\lambda\lambda'}^{(j)}(t')$ можно заменить на $\mathcal{F}_{\lambda\lambda'}^{(j)}(t)$, и вместо (3.16) имеем

$$\frac{\partial f_{\lambda}}{\partial t} = - \sum_{\lambda'} \{W_{\lambda\lambda'} f_{\lambda} (1 - f_{\lambda'}) - W_{\lambda'\lambda} f_{\lambda'} (1 - f_{\lambda})\}, \quad (3.18)$$

где

$$\begin{aligned} W_{\lambda\lambda'} &= \frac{2}{\hbar^2} \sum_{qj} |B_{\lambda\lambda'}^q|^2 \varphi_q^{(j)} \operatorname{Re} \int_{-\infty}^t dt' \exp [i\Omega_{\lambda\lambda'}^{(j)}(t - t')] = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{qj} |B_{\lambda\lambda'}^q|^2 \varphi_q^{(j)} \delta [E_{\lambda} - E_{\lambda'} + (-1)^j \hbar\omega_q]. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Величина $W_{\lambda\lambda'}$ есть не что иное, как вероятность однофононного перехода между состояниями λ и λ' . Используя выражение (3.13) для $\varphi_q^{(j)}$, выражение (3.19) можно записать в виде

$$W_{\lambda\lambda'} = \frac{\operatorname{sign}(E_{\lambda} - E_{\lambda'})}{1 - \exp \{-(E_{\lambda} - E_{\lambda'})/T\}} \omega_{\lambda\lambda'}, \quad (3.20)$$

где множитель

$$\begin{aligned} \omega_{\lambda\lambda'} &= \frac{2\pi}{\hbar} \operatorname{sign}(E_{\lambda'} - E_{\lambda}) \sum_{qj} |B_{\lambda\lambda'}^q|^2 (-1)^j \delta [E_{\lambda} - E_{\lambda'} + (-1)^j \hbar\omega_q] = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_q |B_{\lambda\lambda'}^q|^2 \delta (|E_{\lambda} - E_{\lambda'}| - \hbar\omega_q) \end{aligned} \quad (3.21)$$

не зависит от температуры. Тем самым в выражении (3.20) явно выделена температурная зависимость вероятности перехода.

Кинетическое уравнение (3.18) описывает эволюцию диагональной части матрицы плотности в отсутствие внешнего поля. В рассматриваемом нами случае переноса по локализованным состояниям это уравнение не содержит обычного диффузионного члена. Диффузионный ток, однако, можно вычислять с помощью уравнения (3.18), накладывая соответствующие граничные условия и учитывая изменение функции f_{λ} в пространстве. Для малых градиентов концентрации это изменение можно описать, вводя координатную зависимость энергии Ферми (см. § 4).

В области локализованных состояний уравнение (3.18) имеет простой смысл: оно описывает баланс электронных переходов

между локализованными состояниями. Отметим, что, как и следовало ожидать на основании принципа детального равновесия, правая часть (3.18) обращается в нуль, если в качестве f_λ взять равновесную функцию Ферми *)

$$n_F(E_\lambda) = \left\{ 1 + \exp \frac{E_\lambda - F}{T} \right\}^{-1}. \quad (3.22)$$

Справедливость проведенного разложения определяется применимостью условия (3.9). Используя уравнение (3.4) и расщепление типа (3.11), для недиагональных элементов матрицы плотности $f_{\lambda\lambda'}$ ($\lambda \neq \lambda'$) получаем уравнение

$$\begin{aligned} (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + E_\lambda - E_{\lambda'}) f_{\lambda\lambda'} = \\ = - \frac{i}{\hbar} \sum_{\lambda_1, j} B_{\lambda\lambda_1}^q B_{\lambda_1\lambda}^{-q} \int_{-\infty}^t dt' \{ [f_\lambda(t') (1 - f_{\lambda_1}(t')) \Phi_q^{(j)} - \\ - f_{\lambda_1}(t') (1 - f_\lambda(t')) \Phi_{-q}^{(3-j)}] \exp [i\Omega_{\lambda\lambda_1}^{(j)}(t - t')] - \\ - [f_{\lambda_1}(t') (1 - f_{\lambda'}(t')) \Phi_q^{(j)} - f_{\lambda'}(t') (1 - f_{\lambda_1}(t')) \Phi_{-q}^{(3-j)}] \times \\ \times \exp [i\Omega_{\lambda\lambda'}^{(j)}(t - t')] \}. \quad (3.23) \end{aligned}$$

Из этого уравнения в марковском приближении получаем

$$\begin{aligned} f_{\lambda\lambda'} \approx \frac{1}{E_\lambda - E_{\lambda'}} \sum_{\lambda_1, j, q} B_{\lambda\lambda_1}^q B_{\lambda_1\lambda}^{-q} \left\{ \frac{f_\lambda (1 - f_{\lambda_1}) \Phi_q^{(j)} - f_{\lambda_1} (1 - f_\lambda) \Phi_{-q}^{(3-j)}}{E_\lambda - E_{\lambda_1} + (-1)^j \hbar \omega_q} - \right. \\ \left. - \frac{f_{\lambda_1} (1 - f_{\lambda'}) \Phi_q^{(j)} - f_{\lambda'} (1 - f_{\lambda_1}) \Phi_{-q}^{(3-j)}}{E_{\lambda_1} - E_{\lambda'} + (-1)^j \hbar \omega_q} \right\} \quad (\lambda \neq \lambda'). \quad (3.24) \end{aligned}$$

Матричные элементы $B_{\lambda\lambda'}^q$ в рассматриваемом случае пропорциональны не только безразмерной константе электрон-фононной связи, но зависят и от перекрытия волновых функций состояний λ и λ' . Соответственно малость недиагональных элементов первой матрицы плотности по сравнению с диагональными определяется условием

$$\hbar/\tau \ll \bar{E}. \quad (3.25)$$

Здесь \bar{E} есть характерная разность энергий локализованных состояний, отвечающая наиболее вероятным прыжкам, а τ^{-1} — ха-

*) Заметим, что при учете динамической корреляции между электронами с противоположными спинами, попавшими на один и тот же локальный центр, вид равновесной функции заполнения состояний, вообще говоря, будет отличным от (3.22). Так, в пределе сильной корреляции в функцию (3.22) следует ввести фактор вырождения, аналогичный возникающему обычно в теории примесных локальных уровней в запрещенной зоне (см. ниже, § 13).

ракетная частота прыжков. Величины \bar{E} и τ , вообще говоря, зависят от условий опыта и природы системы. Из соотношений (3.18), (3.19) видно, что время τ обратно пропорционально квадрату константы электрон-фононной связи и квадрату интеграла перекрытия волновых функций центров.

Как и в теории плотных газов Н. Н. Боголюбова, условие $t \gg \hbar/\bar{E}$ определяет кинетический этап эволюции, когда становится возможным сокращенное описание поведения неравновесной статистической системы с помощью одночастичной матрицы плотности [43]. В отличие от условия применимости уравнения Больцмана, в котором \bar{E} есть характерная энергия частиц (T или F), здесь \bar{E} — порядка изменения энергии при переходах. Отметим далее, что релаксация рассматриваемой неупорядоченной системы на кинетическом этапе может и не быть экспоненциальной; кинетическое уравнение дает возможность описания переходных процессов и на этой стадии, коль скоро $t \gg \hbar/\bar{E}$. Лишь при достаточно больших временах релаксация приобретает экспоненциальный характер и может быть описана единым временем релаксации τ_0 . Неравенство $t \gg \tau_0$ определяет переход к гидродинамическому этапу эволюции, когда становится возможным дальнейшее сокращение описания системы и переход к макроскопическим уравнениям для термодинамических переменных — плотности частиц и температуры.

§ 4. Отклик системы на внешнее электрическое поле и градиент температуры

Уравнение баланса (3.18) описывает релаксацию системы к равновесному состоянию в отсутствие внешних полей, когда гамильтониан имеет вид (3.3). При наличии внешнего поля соответствующий гамильтониан (2.10) можно представить в виде суммы двух частей — диагональной и недиагональной по индексам λ :

$$H_F = \sum_{\lambda} \mathcal{Y}_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} + \sum_{\substack{\lambda \lambda' \\ (\lambda' \neq \lambda)}} (\lambda | \mathcal{Y} | \lambda') a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda'}. \quad (4.1)$$

Здесь

$$\mathcal{Y}_{\lambda} = (\lambda | \mathcal{Y} | \lambda) \quad (4.2)$$

есть средняя потенциальная энергия электрона в действующем поле в состоянии λ . Очевидно, первое слагаемое в (4.1) можно объединить с гамильтонианом H_e из (2.15). Учет его сводится к перенормировке энергий E_{λ} :

$$E_{\lambda} \rightarrow \tilde{E}_{\lambda} = E_{\lambda} + \mathcal{Y}_{\lambda}. \quad (4.3)$$

Таким образом, учет диагональной части гамильтониана (4.1) сводится просто к замене энергий E_{λ} в выражениях (3.18), (3.19)

на перенормированные энергии \tilde{E}_λ . Роль диагональной и недиагональной частей (4.1) существенно различна в случаях локализованных и делокализованных состояний. В последнем случае учет недиагональных членов необходим — обычная форма полевого члена в кинетическом уравнении получается как следствие сингулярности матричного элемента $(\lambda | \mathcal{Y} | \lambda')$ при $\lambda = \lambda'$ (в случае плоских волн в однородном поле он пропорционален производной от $\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$), а диагональные члены, согласно (3.7), взаимно компенсируются. Для локализованных состояний ситуация относительно проще: соответствующие матричные элементы в λ -представлении регулярны и в рассматриваемом диагональном приближении основной вклад учитывается заменой E_λ на \tilde{E}_λ . Действительно, недиагональные члены дают следующий вклад в левую часть (3.8):

$$\sum_{\lambda_2} \{(\lambda_1 | \mathcal{Y} | \lambda_2) \langle a_\lambda^+ a_{\lambda_2} \beta_q^{(f)} \rangle - (\lambda_2 | \mathcal{Y} | \lambda) \langle a_{\lambda_2}^+ a_\lambda \beta_q^{(f)} \rangle\}. \quad (4.4)$$

Нетрудно убедиться в том, что вклад (4.4) мал по сравнению с правой частью уравнения (3.8) при условии малости параметра

$$g' = (\lambda | \mathcal{Y} | \lambda') / \bar{E} \quad (4.5)$$

(при $\lambda \neq \lambda'$). Этот параметр может быть мал даже в весьма сильных полях. По этой причине в большинстве случаев при рассмотрении влияния внешнего электрического поля на локализованные электроны достаточно ограничиться учетом «классических» сдвигов энергии полем (4.3). При учете переходов в область делокализованных состояний это приближение становится недостаточным, ибо тогда уже нельзя просто опустить недиагональные матричные элементы $(\lambda | \mathcal{Y} | \lambda')$.

Рассматривая перенос по локализованным состояниям, мы будем ограничиваться учетом диагональных матричных элементов потенциала \mathcal{Y} . При этом роль внешнего поля сводится к перенормировке энергий (4.3) в кинетическом уравнении (3.18). Это уравнение нелинейным образом зависит от действующего поля; усложнение, связанное с учетом перераспределения зарядов во внешнем поле, делает задачу о решении кинетического уравнения чрезвычайно сложной даже для простейших модельных систем.

Ситуация упрощается, когда электрическое поле слабое. В этом случае можно провести линейризацию уравнения (3.18). Пусть

$$\delta f_\lambda = f_\lambda - n_F(E_\lambda) \quad (4.6)$$

есть малая неравновесная добавка к равновесной функции (3.22), связанная с приложенным к системе внешним электрическим полем. Считая величины δf_λ и \mathcal{Y}_λ малыми одного порядка

и ограничиваясь линейными членами, получаем для выражения, стоящего в фигурных скобках в правой части (3.18)

$$\begin{aligned}
 & \{\tilde{W}_{\lambda\lambda'} f_{\lambda}(1 - f_{\lambda'}) - \tilde{W}_{\lambda'\lambda} f_{\lambda'}(1 - f_{\lambda})\} \approx \\
 & \approx \frac{\partial W_{\lambda\lambda'}}{\partial E_{\lambda}} (\mathcal{Y}_{\lambda} - \mathcal{Y}_{\lambda'}) n_F(E_{\lambda}) [1 - n_F(E_{\lambda'})] - \\
 & - \frac{\partial W_{\lambda\lambda}}{\partial E_{\lambda}} (\mathcal{Y}_{\lambda} - \mathcal{Y}_{\lambda'}) n_F(E_{\lambda'}) [1 - n_F(E_{\lambda})] + W_{\lambda\lambda} n_F(E_{\lambda}) [1 - n_F(E_{\lambda'})] \times \\
 & \times \left[\frac{\delta f_{\lambda}}{n_F(E_{\lambda})} - \frac{\delta f_{\lambda'}}{1 - n_F(E_{\lambda'})} - \frac{\delta f_{\lambda'}}{n_F(E_{\lambda'})} + \frac{\delta f_{\lambda}}{1 - n_F(E_{\lambda})} \right] = \\
 & = -(\mathcal{Y}_{\lambda} - \mathcal{Y}_{\lambda'}) W_{\lambda\lambda} n_F(E_{\lambda}) [1 - n_F(E_{\lambda'})] \times \\
 & \times \left\{ \frac{1}{n_F(E_{\lambda})} \frac{\partial n_F(E_{\lambda})}{\partial E_{\lambda}} + \frac{1}{1 - n_F(E_{\lambda})} \frac{\partial n_F(E_{\lambda})}{\partial E_{\lambda}} \right\} + \\
 & + W_{\lambda\lambda} n_F(E_{\lambda}) [1 - n_F(E_{\lambda'})] \left\{ \frac{\delta f_{\lambda}}{n_F(E_{\lambda})} + \frac{\delta f_{\lambda}}{1 - n_F(E_{\lambda})} - \right. \\
 & \left. - \frac{\delta f_{\lambda'}}{n_F(E_{\lambda'})} - \frac{\delta f_{\lambda'}}{1 - n_F(E_{\lambda'})} \right\}. \quad (4.7)
 \end{aligned}$$

Здесь через $\tilde{W}_{\lambda\lambda'}$ обозначена вероятность перехода, определяемая выражением (3.19), в котором величины E_{λ} заменены на \tilde{E}_{λ} . При преобразованиях (4.7) мы использовали условие детального равновесия

$$W_{\lambda\lambda'} n_F(E_{\lambda}) [1 - n_F(E_{\lambda'})] = W_{\lambda'\lambda} n_F(E_{\lambda'}) [1 - n_F(E_{\lambda})], \quad (4.8)$$

справедливость которого непосредственно видна из выражений (3.19), (3.22).

Введем обозначение для темпа переходов

$$\Gamma_{\lambda\lambda'} = W_{\lambda\lambda'} n_F(E_{\lambda}) [1 - n_F(E_{\lambda'})] \quad (4.9)$$

и заметим, что

$$\frac{1}{n_F(E_{\lambda})} \frac{\partial n_F(E_{\lambda})}{\partial E_{\lambda}} + \frac{1}{1 - n_F(E_{\lambda})} \frac{\partial n_F(E_{\lambda})}{\partial E_{\lambda}} = -\frac{1}{T} n_F(E_{\lambda}) [1 - n_F(E_{\lambda})].$$

Тогда выражение (4.7) приводится к виду

$$\frac{1}{T} \Gamma_{\lambda\lambda'} \left\{ \mathcal{Y}_{\lambda} - \mathcal{Y}_{\lambda'} + \frac{T \delta f_{\lambda}}{n_F(E_{\lambda}) [1 - n_F(E_{\lambda})]} - \frac{T \delta f_{\lambda'}}{n_F(E_{\lambda'}) [1 - n_F(E_{\lambda'})]} \right\}. \quad (4.10)$$

Величины

$$\delta F_{\lambda} = \frac{T \delta f_{\lambda}}{n_F(E_{\lambda}) [1 - n_F(E_{\lambda})]}, \quad (4.11)$$

определяемые этим соотношением, входят в выражение (4.10) подобно локальным сдвигам химического потенциала в центрах

локализации, а выражения

$$U_{\lambda\lambda'} \equiv U_{\lambda} - U_{\lambda'} = \mathcal{V}_{\lambda} - \mathcal{V}_{\lambda'} + \delta F_{\lambda} - \delta F_{\lambda'} \quad (4.12)$$

аналогичны разностям электрохимических потенциалов между центрами локализации λ и λ' .

Строго говоря, нельзя вводить представление о химическом потенциале в применении к отдельному центру, а не к физически бесконечно малому объему. Все же эта терминология имеет известный смысл. Дело в том, что величины δF_{λ} входят во все выражения подобно изменениям химического потенциала. Точное определение этих величин через изменения чисел заполнения состояний дается соотношением (4.11).

Согласно (4.11) различия между локальными сдвигами химического потенциала на разных центрах означают неравномерность заполнения последних и приводят к возникновению результирующего потока частиц между центрами. С этим и связано протекание прыжкового диффузионного тока при создании неравномерной средней заселенности центров (градиента концентрации локализованных носителей).

Таким образом, линеаризация уравнения баланса (3.18) с помощью соотношений (4.6) — (4.12) приводит к уравнению

$$\frac{\partial \delta f_{\lambda}}{\partial t} = - \frac{1}{T} \sum_{\lambda'} \Gamma_{\lambda\lambda'} U_{\lambda\lambda'}, \quad (4.13)$$

где, однако, сами разности потенциалов $U_{\lambda\lambda'}$ зависят от δf_{λ} . Учет этой зависимости в теории прыжкового переноса по локализованным состояниям принципиально важен в силу того, что вероятности перескоков между различными парами центров меняются случайным образом и в очень широких пределах. В результате изменения заселенности состояний, как мы увидим, часто наиболее легкие направления перескоков (с максимальными $\Gamma_{\lambda\lambda'}$) оказываются блокированными. С этим и связано существенное отличие рассматриваемой системы от системы регулярно расположенных центров, для которых, очевидно, в силу их эквивалентности все δF_{λ} одинаковы, и в отсутствие макроскопического градиента концентрации величины $U_{\lambda\lambda'}$ представляют собой разности электростатических потенциалов. Ниже при использовании уравнения (4.13) для конкретных расчетов мы вернемся к важному вопросу о роли зависимости разностей потенциалов $U_{\lambda\lambda'}$ от величин δf_{λ} , $\delta f_{\lambda'}$.

Величину

$$i_{\lambda\lambda'} \equiv \frac{1}{T} \Gamma_{\lambda\lambda'} U_{\lambda\lambda'} \quad (4.14)$$

можно рассматривать как парциальный поток между центрами λ и λ' ; тогда согласно уравнению (4.13) изменение среднего числа электронов в состоянии λ в единицу времени равно сумме вытекающих парциальных потоков. В частности, в стационарном случае

$$\sum_{\lambda'} i_{\lambda\lambda'} = 0 \quad (4.15)$$

— сумма парциальных потоков в каждом узле обращается в нуль. Задача об отыскании величин δf_{λ} (или U_{λ}) на основании уравнения (4.15) эквивалентна задаче об отыскании потенциалов в узлах случайной сетки сопротивлений (рис. 12), каждый узел λ которой связан с каждым из остальных сопротивлением

$$Z_{\lambda\lambda'} = \left(\frac{e^2}{T} \Gamma_{\lambda\lambda'} \right)^{-1} \quad (4.16)$$

Рис. 12. Случайная сетка сопротивлений. U_{λ_1}, \dots — электрохимические потенциалы в узлах λ_1, \dots ; $Z_{\lambda_1\lambda_2}, \dots$ — сопротивления между узлами.

(А. Миллер, Э. Абрахамс, 1960). Уравнение (4.15) есть не что иное, как закон Кирхгофа для такой сетки, а задача об отыскании величин U_{λ} с помощью закона Кирхгофа эквивалентна рассматриваемой задаче в стационарном случае.

В общем нестационарном случае система уравнений (4.13) эквивалентна задаче об отыскании напряжений в узлах обобщенной случайной сетки (М. Поллак, 1974; эта сетка изображена на рис. 13). Каждый узел ее соединен с источником напряжения \mathcal{V}_{λ}/e через емкость

$$C_{\lambda} = \frac{e^2}{T} n_F(E_{\lambda}) [1 - n_F(E_{\lambda})]. \quad (4.17)$$

Величины $-e \delta f_{\lambda}$ в этом случае отвечают зарядам в узлах, т. е. на соответствующих емкостях, и определяются уравнением

$$e \frac{\partial \delta f_{\lambda}}{\partial t} = - \sum_{\lambda'} Z_{\lambda\lambda'}^{-1} \left(\frac{\mathcal{V}_{\lambda} - \mathcal{V}_{\lambda'}}{e} + \frac{e \delta f_{\lambda}}{C_{\lambda}} - \frac{e \delta f_{\lambda'}}{C_{\lambda'}} \right). \quad (4.18)$$

Указанный подход к задаче может иногда оказаться полезным в связи с тем, что картина случайной сетки сопротивлений отличается большой наглядностью.

Проведенное выше рассмотрение можно обобщить на случай, когда в системе имеются термические возмущения (И. П. Звягин, 1973). В случае достаточно медленного изменения интенсивных термодинамических переменных в пространстве можно

говорить об их локальных значениях и ввести представление о локально-равновесном распределении. Медленность здесь означает, что систему можно разбить на объемы, которые, с одной стороны, столь малы, что изменение термодинамических переменных в них пренебрежимо мало, а с другой стороны, достаточно велики (макроскопичны), так что флуктуации плотности частиц и энергии в них не играют существенной роли. Возможность введения локально-равновесных распределений обусловлена существованием иерархии временных и пространственных масштабов, характеризующих процесс релаксации системы к равновесному состоянию. Как мы видели в § 3, после начального быстрого этапа эволюции, происходящего за время порядка \hbar/E , дальнейшая эволюция системы (при $t \gg \hbar/E$) может быть описана кинетическим уравнением (3.18). В области сильно локализованных состояний это уравнение сохраняет силу и для пространственно неоднородных распределений. На кинетическом этапе (при $t \gg \hbar/E$) за время порядка τ_0 происходит частичная релаксация системы к неоднородному состоянию, характеризующемуся медленно меняющимися в пространстве и во времени плотностью частиц и температурой. Дальнейшая релаксация неоднородных распределений к состоянию полного равновесия может быть описана с помощью макроскопических уравнений (типа уравнения диффузии). В теории плотных газов этот этап называют гидродинамическим. При этом временная зависимость одночастичной матрицы плотности определяется уже ее зависимостью от локальных температуры и плотности числа частиц. Обозначим через τ_h и L_h время релаксации макроскопически неоднородной системы и характерный масштаб неоднородности, причем, вообще говоря, L_h может быть порядка размера системы L , а τ_h — зависеть от L . Локально-равновесное распределение можно ввести на гидродинамическом этапе для времен t и пространственных масштабов l , удовлетворяющих неравенствам

$$\tau_0 \ll t \ll \tau_h, \quad L_{c0} \ll l \ll L_h.$$

Здесь L_{c0} есть характерный масштаб, определяющий корреляцию флуктуаций чисел заполнения в рассматриваемой задаче; отметим, что он может существенно превышать характерную

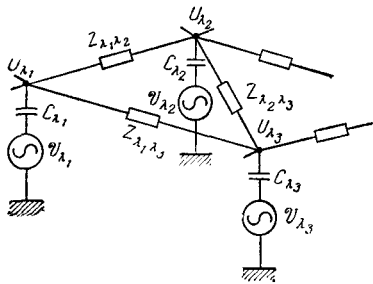


Рис. 13. Обобщенная случайная сетка.

длину перескока r_h . Локально-равновесное распределение можно записать в обычном виде:

$$\bar{f}(E, \mathbf{x}, t) = \left\{ 1 + \exp \left(\frac{E - F(\mathbf{x}, t)}{T(\mathbf{x}, t)} \right) \right\}^{-1}, \quad (4.19)$$

где $T(\mathbf{x}, t)$ и $F(\mathbf{x}, t)$ — локальные значения температуры и электрохимического потенциала.

Рассматривая времена $t \ll \tau_h$ и подсистему A с размером $L_A \ll L_h$, мы можем считать изменения температуры и локальной концентрации частиц в пределах этой подсистемы достаточно малыми и ограничиться линейным по градиентам приближением. Соответственно положим

$$T(\mathbf{x}, t) \approx T + (\mathbf{x} \cdot \nabla T), \quad F(\mathbf{x}, t) \approx F + (\mathbf{x} \cdot \nabla F), \quad (4.20)$$

где T и F — средние по подсистеме значения температуры и электрохимического потенциала. В задаче о вычислении кинетических коэффициентов градиенты ∇T и ∇F можно считать постоянными в пространстве и во времени.

Рассматривая временную эволюцию системы на кинетическом этапе, будем искать решение кинетического уравнения для прыжкового переноса (3.18) в виде

$$f_\lambda(t) = \bar{f}(E_\lambda, \mathbf{R}_\lambda) + \delta f_\lambda(t). \quad (4.21)$$

Здесь $\delta f_\lambda(t)$ — флуктуации чисел заполнения узлов, возникающие при протекании потоков частиц и энергии через систему локальных центров со случайным разбросом вероятностей переходов. В линейном по градиентам приближении имеем

$$f_\lambda(t) \approx n_F(E_\lambda) + n_F(E_\lambda) [1 - n_F(E_\lambda)] \mathbf{R}_\lambda \left[\frac{E_\lambda}{T^2} \nabla T + \nabla \left(\frac{F}{T} \right) \right] + \delta f_\lambda, \quad (4.21')$$

причем равновесная функция $n_F(E_\lambda)$ есть точное решение уравнения (3.18). Подставляя (4.21') в (3.18), мы приходим к уравнению вида (4.13), с тем лишь отличием, что вместо величин $U_{\lambda\lambda'}$ в нем фигурируют разности обобщенных потенциалов

$$U_{\lambda\lambda'}^* = U_{\lambda\lambda'} + \mathbf{R}_\lambda \left[\frac{E_\lambda}{T} \nabla T + T \nabla \left(\frac{F}{T} \right) \right] - \mathbf{R}_{\lambda'} \left[\frac{E_{\lambda'}}{T} \nabla T + T \nabla \left(\frac{F}{T} \right) \right]. \quad (4.22)$$

Уравнения (4.13) с заменой $U_{\lambda\lambda'} \rightarrow U_{\lambda\lambda'}^*$ полностью описывают термоэлектрические явления переноса по локализованным состояниям.

§ 5*. Плотность тока в λ -представлении

Для определения плотности тока в λ -представлении (2.1) в принципе можно воспользоваться любым из стандартных выражений, связывающих плотность тока с одночастичной матрицей плотности. Например,

$$\mathbf{j}(t) = -\frac{e}{\Omega} \sum_{\lambda\lambda'} (\lambda | \mathbf{v} | \lambda') f_{\lambda\lambda'}(t) = -\frac{e}{\Omega} \sum_{\lambda\lambda'} (\lambda | \mathbf{x} | \lambda') \frac{\partial f_{\lambda\lambda'}(t)}{\partial t}, \quad (5.1)$$

где \mathbf{v} — оператор скорости. Следует отметить, что при вычислении плотности тока в макроскопической системе в выражении (5.1) надо выполнить термодинамический предельный переход $\Omega \rightarrow \infty$; этот переход должен выполняться до всех других предельных переходов (например, до перехода $\omega \rightarrow 0$). В условиях, когда рассматриваемые базисные функции локализованы (т. е. описывают нетоковые состояния), выполнение термодинамического предельного перехода в формуле (5.1) при конечных t или ω не всегда тривиально [42]. Действительно, как мы видели в § 3, прыжковая составляющая плотности тока определяется диагональными элементами одночастичной матрицы плотности. Однако «внутренние» состояния, локализованные далеко от границ системы, в области, где установилось стационарное значение плотности тока, в пределе $\omega \rightarrow 0$ не дают вклада в диагональную часть суммы (5.1): для этих состояний $\partial f_{\lambda\lambda'}/\partial t = 0$. Для фактического выполнения перехода $\Omega \rightarrow \infty$ более удобной представляется иная форма записи выражения для плотности тока — через объемные характеристики системы (т. е. через характеристики «внутренних» центров).

Выведем альтернативные выражения для плотности тока непосредственно из уравнения непрерывности

$$\operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) - e \frac{\partial n(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = 0, \quad (5.2)$$

где

$$n(\mathbf{x}, t) = \sum_{\lambda\lambda'} a_{\lambda\lambda'}(\mathbf{x}) f_{\lambda\lambda'}(t), \quad (5.3)$$

а

$$a_{\lambda\lambda'}(\mathbf{x}) = \psi_{\lambda'}^*(\mathbf{x}) \psi_{\lambda}(\mathbf{x}). \quad (5.4)$$

Рассмотрим вначале линейный отклик системы на внешнее возмущение, полагая

$$\delta n(\mathbf{x}, t) = \sum_{\lambda\lambda'} a_{\lambda\lambda'}(\mathbf{x}) \delta f_{\lambda\lambda'}(t). \quad (5.5)$$

В линеаризованном уравнении непрерывности удобно перейти к фурье-представлению по пространственным координатам и времени, полагая

$$\mathbf{j}(\mathbf{k}, \omega) = \int d\mathbf{x} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x} + i\omega t} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t), \quad (5.6)$$

и аналогично для $\delta n(\mathbf{k}, \omega)$. Тогда из уравнения непрерывности (5.2) мы получаем для продольной компоненты плотности тока

$$j_l(\mathbf{k}, \omega) = \frac{(j(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{k})}{k} \\ j_l(\mathbf{k}, \omega) = -e \frac{\omega}{k} \sum_{\lambda\lambda'} \alpha_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) \delta f_{\lambda\lambda'}(\omega) \quad (5.7)$$

(в дальнейшем мы для краткости опускаем значок l). Заметим, что, как и в обычной теории явлений переноса [45], в слабо неоднородных и медленно изменяющихся полях предельные переходы $k \rightarrow 0$ и $\omega \rightarrow 0$ некоммутативны: для вычисления статической проводимости (или плотности тока) нужно сначала выполнить предельный переход $k \rightarrow 0$ (при постоянной напряженности поля), а уже затем устремлять к нулю частоту ω . Обратный порядок предельных переходов соответствует задаче об экранировании статического поля. При этом плотность тока естественно равна нулю.

Разобьем сумму в (5.7) на недиагональную (с $\lambda \neq \lambda'$) и диагональную (с $\lambda = \lambda'$) части:

$$j(\mathbf{k}, \omega) = j^{(1)}(\mathbf{k}, \omega) + j^{(2)}(\mathbf{k}, \omega) = \\ = -\frac{e\omega}{k} \sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ (\lambda' \neq \lambda)}} \alpha_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) \delta f_{\lambda\lambda'}(\omega) - \frac{e\omega}{k} \sum_{\lambda} \alpha_{\lambda}(\mathbf{k}) \delta f_{\lambda}(\omega) \quad (5.8) \\ (\alpha_{\lambda}(\mathbf{k}) \equiv \alpha_{\lambda\lambda}(\mathbf{k})).$$

Вклад недиагональных элементов матрицы плотности можно найти, подставляя в (5.8) выражение для $\delta f_{\lambda\lambda'}(\omega)$, полученное из уравнения (3.23), в правую часть которого добавлены слабые

$$\sum_{\lambda_1} \{ (\lambda' | \mathcal{Y} | \lambda_1) f_{\lambda\lambda_1} - (\lambda_1 | \mathcal{Y} | \lambda) f_{\lambda_1\lambda'} \}, \quad (5.9)$$

связанные с внешним электрическим полем. Выражения (3.24), пропорциональные g^2 , дают вклад в $j^{(2)}(\mathbf{k}, \omega)$, содержащий произведение трех недиагональных матричных элементов типа $(\lambda | x | \lambda_1) B_{\lambda_1\lambda_2}^g B_{\lambda_2\lambda'}^{-g}$ ($\lambda_1 \neq \lambda$, $\lambda_2 \neq \lambda_1$, $\lambda' \neq \lambda_2$). Этим вкладом можно пренебречь, когда функции $\psi_{\lambda}(\mathbf{x})$ сильно локализованы.

Остается лишь вклад от слагаемых (5.9), который можно записать в виде

$$j^{(1)}(\mathbf{k}, \omega) = -e \frac{\omega}{k} \sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ (\lambda \neq \lambda')}} \alpha_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) (\lambda' | \mathcal{Y}^0 | \lambda) \frac{n_F(E_\lambda) - n_F(E_{\lambda'})}{E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega + i\varepsilon}. \quad (5.10)$$

В последнем выражении можно выполнить предельный переход $k \rightarrow 0$, замечая, что для малых k в области локализованных состояний $\alpha_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) \approx -ik(\lambda | x | \lambda')$ (ось Ox направлена вдоль вектора \mathbf{k}). Отсюда для средней плотности тока

$$j^{(1)}(\omega) = \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{x} j^{(1)}(\mathbf{x}, \omega) = \frac{1}{\Omega} \lim_{k \rightarrow 0} j^{(1)}(\mathbf{k}, \omega)$$

имеем

$$j^{(1)}(\omega) = \frac{ie\omega}{\Omega} \sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ (\lambda \neq \lambda')}} (\lambda | x | \lambda') (\lambda' | \mathcal{Y}^0 | \lambda) \frac{n_F(E_\lambda) - n_F(E_{\lambda'})}{E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega + i\varepsilon}. \quad (5.11)$$

Это — фононный вклад в проводимость. В рассматриваемой сейчас задаче он обращается в нуль при $\omega \rightarrow 0$. Мы обсудим этот вклад более подробно в § 11.

Обратимся теперь к диагональной части $j^{(2)}(\mathbf{k}, \omega)$, описывающей в рассматриваемом случае перескоки между локализованными состояниями с участием фононов. Согласно (5.4) для локализованных состояний мы имеем

$$\alpha_\lambda(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{x} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} |\psi_\lambda(\mathbf{x})|^2 \approx e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_\lambda}. \quad (5.12)$$

Последнее приближенное равенство справедливо, если функция $\psi_\lambda(\mathbf{x})$ достаточно сильно локализована вблизи точки \mathbf{R}_λ . Если теперь воспользоваться кинетическим уравнением (4.13), то выражение для $j^{(2)}(\mathbf{k}, \omega)$ можно переписать в следующем виде:

$$\begin{aligned} j^{(2)}(\mathbf{k}, \omega) &= -e\omega \sum_\lambda \frac{e^{-ikx_\lambda}}{k} \delta f_\lambda(\omega) = -e \sum_{\lambda\lambda'} \frac{e^{-ikx_\lambda}}{ik} i_{\lambda\lambda'}(\omega) = \\ &= -\frac{e}{2} \sum_{\lambda\lambda'} \frac{e^{-ikx_\lambda} - e^{-ikx_{\lambda'}}}{ik} i_{\lambda\lambda'}(\omega). \end{aligned} \quad (5.13)$$

Представим последнее соотношение в виде

$$j^{(2)}(\mathbf{k}, \omega) = -e \sum_{\lambda\lambda'} \frac{e^{-ikx_\lambda} - e^{-ikx_{\lambda'}}}{ik} \theta(x_{\lambda'} - x_\lambda) i_{\lambda\lambda'}(\omega)$$

и выполним обратное преобразование Фурье. Усредняя по сечению, получим

$$j^{(2)}(\mathbf{x}, t) = -\frac{e}{S} \sum_{\lambda\lambda'} \theta(x - x_\lambda) \theta(x_{\lambda'} - x) i_{\lambda\lambda'}(t) = -\frac{e}{S} \sum_{\substack{\lambda < S \\ \lambda' > S}} i_{\lambda\lambda'}(t). \quad (5.14)$$

Здесь символы $\lambda < S$ и $\lambda' > S$ обозначают центры, локализованные, соответственно, слева и справа от плоскости, перпендикулярной оси Ox , а S — площадь поперечного сечения образца. Выражение (5.14) — неявное, оно связывает плотность тока с парциальными потоками $i_{\lambda\lambda'}$, которые следует определять, решая кинетическое уравнение. Заметим, однако, что выражением (5.14) пользоваться удобнее, чем формулами (5.1) или (5.8), поскольку при наличии стационарного тока величины $i_{\lambda\lambda'}$ остаются конечными в термодинамическом пределе для всех «внутренних» состояний системы.

Выражение для плотности тока через сумму парциальных потоков, пересекающих некоторое сечение S , можно переписать и в ином виде, через сумму парциальных потоков по всему объему Ω (для макроскопически однородной системы). Для этого

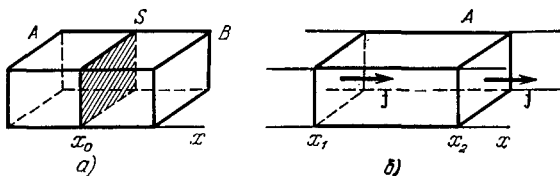


Рис. 14. К выводу выражения для плотности тока по локализованным состояниям: а) изолированная система; б) «открытая» система.

усредним выражение (5.14) по всевозможным положениям поперечного сечения $0 \leq x \leq L$:

$$\begin{aligned} \bar{j}^{(2)}(t) &= \\ &= \frac{1}{L} \int_0^L j^{(2)}(x, t) dx = -\frac{e}{\Omega} \sum_{\lambda\lambda'} \theta(x_{\lambda'} - x_\lambda) \{ \theta(-x_\lambda) \theta(x_{\lambda'} - L) + \\ &\quad + x_{\lambda'} \theta(-x_\lambda) \theta(L - x_{\lambda'}) \theta(x_{\lambda'}) + \\ &\quad + (L - x_\lambda) \theta(x_\lambda) \theta(x_{\lambda'} - L) \theta(L - x_{\lambda'}) + \\ &\quad + (x_{\lambda'} - x_\lambda) \theta(x_\lambda) \theta(L - x_{\lambda'}) \} i_{\lambda\lambda'} \approx \frac{e}{2\Omega} \sum_{\lambda\lambda'} (x_\lambda - x_{\lambda'}) i_{\lambda\lambda'}. \quad (5.15) \end{aligned}$$

Здесь $\Omega = SL$ — объем системы, сумма берется по всем состояниям, локализованным в этом объеме, а последнее приближенное равенство в (5.15) записано в предположении, что макроскопический размер системы L намного превышает характерное расстояние перескока.

Полученные выше формулы для плотности тока по локализованным состояниям можно сделать более наглядными, рассматривая простую изолированную систему локальных центров, разделенную на две части A и B плоскостью $x = x_0$, перпендикулярной оси Ox (рис. 14, а). Уравнение непрерывности, записанное для подсистемы A , имеет вид

$$j \cdot S = e \frac{\partial N_A}{\partial t}, \quad (5.16)$$

где S — площадь сечения, N_A — полное число электронов в подсистеме A объема Ω_A :

$$N_A = \sum_{\lambda\lambda'} \int_{\Omega_A} dx \alpha_{\lambda\lambda'}(\mathbf{x}) f_{\lambda\lambda'}(t). \quad (5.17)$$

Отсюда

$$j = \frac{e}{S} \sum_{\lambda\lambda'} \int_{\Omega_A} dx \alpha_{\lambda\lambda'}(\mathbf{x}) \frac{\partial f_{\lambda\lambda'}(t)}{\partial t}. \quad (5.18)$$

Диагональная часть плотности тока дается выражением

$$j^{(2)} = \frac{e}{S} \sum_{\lambda \in \Omega_A} \frac{\partial f_{\lambda}}{\partial t}, \quad (5.19)$$

где символ $\lambda \in \Omega_A$ означает, что суммирование проводится только по центрам, расположенным в объеме Ω_A . Действительно, интеграл $\int_{\Omega_A} dx \alpha_{\lambda}(\mathbf{x})$ близок к единице для всех «внутренних»

центров, расстояние от которых до сечения S превышает радиус локализации. При выходе координаты x_{λ} за пределы подсистемы этот интеграл убывает до нуля в приграничном слое толщиной порядка радиуса локализации. Для сильно локализованных состояний, когда характерные расстояния между центрами существенно превышают радиус локализации, можно положить

$$\int_{\Omega_A} dx \alpha_{\lambda}(\mathbf{x}) \approx \theta(x_0 - x_{\lambda}),$$

откуда и следует равенство (5.19).

Подставляя в (5.19) выражение для $\partial f_{\lambda}/\partial t$ из кинетического уравнения (3.18), получаем (без предположения о слабости

приложенного поля)

$$j^{(2)} = -\frac{e}{S} \sum_{\substack{\lambda \in \Omega_A \\ \lambda'}} \{W_{\lambda\lambda'} f_\lambda (1 - f_{\lambda'}) - W_{\lambda'\lambda} f_{\lambda'} (1 - f_\lambda)\}. \quad (5.20)$$

Для рассматриваемой модельной системы выражения (5.19) и (5.20) эквивалентны. В стационарном случае каждое из них дает нуль в соответствии со сказанным выше. В общем случае из выражения (5.20) видно, что вклад в него дают лишь центры λ , λ' , локализованные на расстояниях порядка длины перескока от границы и по разные стороны от нее. Действительно, сумма типа

$$\sum_{\lambda, \lambda' \in \Omega_A} \{W_{\lambda\lambda'} f_\lambda (1 - f_{\lambda'}) - W_{\lambda'\lambda} f_{\lambda'} (1 - f_\lambda)\}$$

обращается в нуль из-за антисимметрии выражения в скобках относительно перестановки индексов λ , λ' , так что

$$j^{(2)} = -\frac{e}{S} \sum_{\substack{\lambda < S \\ \lambda' > S}} \{W_{\lambda\lambda'} f_\lambda (1 - f_{\lambda'}) - W_{\lambda'\lambda} f_{\lambda'} (1 - f_\lambda)\}. \quad (5.21)$$

Здесь символами $\lambda < S$ и $\lambda' > S$ обозначены центры подсистем A и B , лежащие, соответственно, слева и справа от поперечного сечения S . Поскольку вероятности переходов быстро убывают с увеличением расстояния между центрами, центры λ и λ' , отстоящие от поверхности S далее, чем на характерную длину перескока, не дают заметного вклада в ток.

В случае неизолированной системы A , ограниченной плоскостями $x = x_1$ и $x = x_2 = x_1 + L$ (рис. 14, б), в левой части уравнения непрерывности (5.16) стоит полный поток через поверхность, ограничивающую систему, т. е. сумма потоков, вытекающих из системы через обе боковые поверхности. По этой причине обращение в нуль производной $\partial N_A / \partial t$ означает лишь равенство потоков, втекающего в систему и вытекающего из нее, но отнюдь не означает, что каждый из них обращается в нуль. В этом случае, используя кинетическое уравнение, получаем

$$\begin{aligned} j^{(2)}(x_1) - j^{(2)}(x_1 + L) &= \\ &= -\frac{e}{S} \sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ (x_\lambda < x_1, x_{\lambda'} > x_1)}} \{W_{\lambda\lambda'} f_\lambda (1 - f_{\lambda'}) - W_{\lambda'\lambda} f_{\lambda'} (1 - f_\lambda)\} + \\ &+ \frac{e}{S} \sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ (x_\lambda < x_2, x_{\lambda'} > x_2)}} \{W_{\lambda\lambda'} f_\lambda (1 - f_{\lambda'}) - W_{\lambda'\lambda} f_{\lambda'} (1 - f_\lambda)\}. \quad (5.22) \end{aligned}$$

Как отмечалось выше, пары центров, дающих вклад в суммы, стоящие в правой части выражения (5.22), локализованы,

соответственно, вблизи плоскостей $x = x_1$ и $x = x_1 + L$. Поскольку длина L макроскопическая, она велика по сравнению с характерной длиной перескока.

При этом естественно определить плотность тока соотношением (5.21), разделяя вклады от поверхностей $x = x_1$ и $x = x_2$. В предположении о малости внешнего возмущения это соотношение переходит в полученные выше формулы (5.14), (5.15).

При непосредственном использовании формул (5.1) или (5.7) следует иметь в виду, что при правильной последовательности предельных переходов вклад в соответствующие суммы дают сингулярные при $\omega \rightarrow 0$ части функций $\delta f_{\lambda}(\omega)$. Как показано в Приложении X, решение кинетического уравнения (4.13) для макроскопической системы длины $L = x_2 - x_1$ (например, системы A на рис. 14, б) содержит сингулярную часть, пропорциональную $\frac{j(x_2) - j(x_1)}{\omega}$, где $j(x_i)$ — плотность тока через сечение $x = x_i$, $i = 1, 2$. Полагая, что макроскопическая плотность тока мало меняется на длине L ($kL \ll 1$), получаем отсюда, что указанная сингулярная часть пропорциональна k/ω . Соответственно переход к пределу $k \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$ в формуле (5.8) дает конечный результат.

Для однородного случая, когда $j(x_2) = j(x_1)$, решение кинетического уравнения регулярно, поскольку сингулярности, связанные с поверхностями $x = x_1$ и $x = x_2$, точно компенсируются. Из (5.21) видно, однако, что в выражение для локальной плотности тока входит лишь вклад, связанный с отдельной поверхностью. При выделении этого вклада (например, по рецепту, определяемому формулой (5.22)) и появляется сингулярность типа $1/\omega$, которая обуславливает конечность плотности тока, получаемой при $\omega \rightarrow 0$ по формуле (5.8).

Поскольку решение однородной статической задачи регулярно, величины $i_{\lambda\lambda}$, выражающиеся через него, несингулярны при $\omega \rightarrow 0$. Соответственно представление плотности тока через парциальные потоки $i_{\lambda\lambda}$ при переходе от (5.1) к (5.15) и отвечает корректному выделению сингулярности типа $1/\omega$ в выражении для $\delta f_{\lambda}(\omega)$, появляющейся при условии, что переход $\omega \rightarrow 0$ выполняется после предельного перехода $\Omega \rightarrow \infty$.

Поскольку макроскопическая плотность тока и соответствующая ей проводимость — самоусредняющиеся величины, во всех выражениях для плотности тока можно выполнить усреднение по конфигурациям случайного поля. При нашем подходе, когда система собственных функций гамильтониана со случайным полем выбрана в качестве базисной, случайное поле входит в выражение для плотности тока лишь через энергии E_{λ} и матричные элементы, построенные на функциях ψ_{λ} . В области сильно локализованных состояний случайными параметрами служат

энергии E_λ и координаты центров локализации R_λ , и конфигурационное усреднение сводится к усреднению по наборам некоторых случайных величин, например E_λ и R_λ . Это позволяет при вычислении проводимости избежать явных предположений о виде случайного поля, заменяя их заданием статистических характеристик распределения, например координат и энергий центров. Такой подход иногда оказывается более удобным, чем подход, основанный на конфигурационном усреднении.

§ 6*. Метод функций Грина в теории прыжковой проводимости

При квантовомеханических расчетах кинетических коэффициентов в случае переноса свободными носителями широко используется формула Кубо, устанавливающая связь между функцией линейного отклика системы и корреляционными функциями [17]. Такой подход позволяет свести кинетическую задачу к вычислению равновесной двухчастичной функции Грина, решение уравнения для которой в случае слабого рассеяния дает результат обычной кинетической теории.

В случае переноса по локализованным состояниям для функции линейного отклика также получается выражение типа формулы Кубо. Действительно, линейная по внешнему возмущению часть матрицы плотности $\delta\rho(t)$ определяется обычным образом из уравнения движения для матрицы плотности. Пусть гамильтониан имеет вид $H + H_f$, где H — гамильтониан в отсутствие внешнего электрического поля, H_f — гамильтониан (2.10). Введем обозначение $(\lambda | \mathcal{Y} | \lambda') \equiv \mathcal{Y}_{\lambda\lambda'}(t)$. Считая, что поле адиабатически включается при $t = -\infty$, получаем

$$\delta\rho(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_{\lambda_1\lambda_2} \int_{-\infty}^t dt' \mathcal{Y}_{\lambda\lambda'}(t') \exp\left[-\frac{i}{\hbar} H(t-t')\right] \times \\ \times [a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_2}, \rho^{(0)}] \exp\left[\frac{i}{\hbar} H(t-t')\right], \quad (6.1)$$

где $\rho^{(0)}$ — матрица плотности в отсутствие внешнего поля.

Согласно (4.6) добавка к одночастичной матрице плотности, вызванная внешним полем, равна

$$\delta f_{\lambda_1\lambda_2} = \text{Sp} \delta\rho(t) a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_2} = \\ = -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty d\tau \sum_{\lambda_3\lambda_4} \mathcal{Y}_{\lambda_3\lambda_4}(t-\tau) \text{Sp} \rho^{(0)} [a_{\lambda_1}^+(\tau) a_{\lambda_2}(\tau), a_{\lambda_3}^+ a_{\lambda_4}]_- = \\ = -\sum_{\lambda_3\lambda_4} \int_{-\infty}^\infty d\tau \mathcal{Y}_{\lambda_3\lambda_4}(t-\tau) K_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}(\tau), \quad (6.2)$$

где

$$K_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}(\tau) = \frac{i}{\hbar} \theta(\tau) \text{Sp} \rho^{(0)} [a_{\lambda_1}^+(\tau) a_{\lambda_2}(\tau), a_{\lambda_3}^+ a_{\lambda_4}]_- \equiv \langle\langle a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_2} | a_{\lambda_3}^+ a_{\lambda_4} \rangle\rangle \quad (6.3)$$

есть обычная запаздывающая коммутаторная двухчастичная функция Грина. Переходя к фурье-представлению с помощью соотношений типа

$$K(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} K(t),$$

мы получаем вместо (6.2)

$$\delta f_{\lambda_1\lambda_2}(\omega) = - \sum_{\lambda_3\lambda_4} \mathcal{Y}_{\lambda_3\lambda_4}(\omega) K_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}(\omega). \quad (6.4)$$

С помощью формул предыдущего параграфа можно выразить плотность тока через двухчастичную функцию Грина. Так, вместо (5.1) мы имеем *)

$$j_{\alpha}(\omega) = - \frac{e}{\Omega} \sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} (\lambda_1 | v_{\alpha} | \lambda_2) \mathcal{Y}_{\lambda_3\lambda_4} K_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}(\omega) = \\ = \frac{ie\omega}{\Omega} \sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} (\lambda_1 | x_{\alpha} | \lambda_2) \mathcal{Y}_{\lambda_3\lambda_4} K_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}(\omega). \quad (6.5)$$

Напомним, что, как и в (5.1), в этом выражении термодинамический предельный переход должен быть выполнен до всех других предельных переходов.

Наряду с формулой (6.5), можно пользоваться и другими эквивалентными выражениями для плотности тока, которые часто оказываются более удобными (по причинам, обсуждавшимся в предыдущем параграфе). Так, для «диагонального» вклада в плотность тока на основании формулы (5.19) для системы, изображенной на рис. 14, а, мы можем написать

$$j^{(2)}(\omega) = - \frac{ie\omega}{S} \sum_{\substack{\lambda < S \\ \lambda'}} \mathcal{Y}_{\lambda} K_{\lambda\lambda'}(\omega),$$

где

$$K_{\lambda\lambda'}(\omega) = K_{\lambda\lambda\lambda'\lambda'}(\omega), \quad \mathcal{Y}_{\lambda} = \mathcal{Y}_{\lambda\lambda}.$$

Цепочка уравнений для двухчастичной функции Грина получается стандартным путем:

$$\hbar\omega K_{\lambda\lambda'}(\omega) = \sum_{\lambda_1\lambda_2qf} B_{\lambda_1\lambda_2}^q (\delta_{\lambda\lambda_1} - \delta_{\lambda\lambda_2}) \langle\langle a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_2} \beta_q^{(f)} | a_{\lambda}^+ a_{\lambda'} \rangle\rangle_{\omega} \quad (6.6)$$

*) Если энергию электрона записать через векторный потенциал, то первое из равенств (6.5) свяжет плотность тока с корреляционной функцией скоростей,

и

$$\begin{aligned}
\{ \hbar\omega + E_{\lambda_1} - E_{\lambda_2} + (-1)^{(f)} \hbar\omega_q \} \langle \langle a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_2} \beta_q^{(f)} | a_{\lambda'}^+ a_{\lambda'} \rangle \rangle_{\omega} = \\
= (\delta_{\lambda_1 \lambda'} - \delta_{\lambda_2 \lambda'}) \text{Sp} \rho^{(0)} a_{\lambda_2}^+ a_{\lambda_2} \beta_q^{(f)} + \\
+ \sum_{\lambda_3 \lambda_4 \neq l} B_{\lambda_3 \lambda_4}^{\alpha} \{ \langle \langle a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_2} a_{\lambda_3}^+ a_{\lambda_4} \beta_q^{(f)} \beta_{\lambda}^{(f)} | a_{\lambda'}^+ a_{\lambda'} \rangle \rangle_{\omega} - \\
- \langle \langle a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_2} a_{\lambda_3}^+ a_{\lambda_4} \beta_{\lambda}^{(f)} \beta_q^{(f)} | a_{\lambda'}^+ a_{\lambda'} \rangle \rangle_{\omega} \}. \quad (6.7)
\end{aligned}$$

Интересуясь лишь членами порядка g в правой части (6.7), мы можем провести расщепление многочастичных функций, аналогичное (3.11):

$$\begin{aligned}
\langle \langle a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_3}^+ a_{\lambda_2} a_{\lambda_4} \beta_q^{(f)} \beta_{\lambda}^{(g-l)} | a_{\lambda'}^+ a_{\lambda'} \rangle \rangle \approx \\
\approx \delta_{\lambda_1 \lambda_4} \delta_{\lambda_2 \lambda_3} \delta_{q, -\kappa} \varphi_q^{(f)} \{ n(E_{\lambda_1}) K_{\lambda_2 \lambda'} + n(E_{\lambda_2}) K_{\lambda_1 \lambda'} \} - \\
- \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \delta_{\lambda_3 \lambda_4} \delta_{q, -\kappa} \varphi_q^{(f)} \{ n(E_{\lambda_1}) K_{\lambda_3 \lambda'} + n(E_{\lambda_3}) K_{\lambda_1 \lambda'} \} \quad (6.8)
\end{aligned}$$

и т. п. Фигурирующие здесь функции $\varphi_q^{(f)}$ определены формулой (3.13). Величины $\text{Sp} \rho^{(0)} a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_2} \beta_q^{(f)}$, которые того же порядка (g), что и остальные члены в правой части (6.7), можно вычислить с требуемой точностью непосредственно:

$$\begin{aligned}
\text{Sp} \rho^{(0)} a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_2} \beta_q^{(f)} \approx \\
\approx \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} d\tau \text{Sp} \rho_0 [a_{\lambda_1}^+(\tau) a_{\lambda_2}(\tau) \beta_q^{(f)}(\tau), H_{e, \text{ph}}(0)]_- \equiv -\mathcal{K}_{\lambda_1 \lambda_2 q}^{(f)}(\omega), \quad (6.9)
\end{aligned}$$

где ρ_0 — матрица плотности системы невзаимодействующих электронов и фононов, а запаздывающая функция $\mathcal{K}_{\lambda_1 \lambda_2 q}^{(f)}$ определяется равенством

$$\mathcal{K}_{\lambda_1 \lambda_2 q}^{(f)}(t) = \frac{i}{\hbar} \theta(t) \text{Sp} \rho_0 [a_{\lambda_1}^+(t) a_{\lambda_2}(t) \beta_q^{(f)}(t), H_{e, \text{ph}}]_- \quad (6.10)$$

Функция $\mathcal{K}_{\lambda_1 \lambda_2 q}^{(f)}(\omega)$ удовлетворяет уравнению

$$\begin{aligned}
\{ \hbar\omega + E_{\lambda_1} - E_{\lambda_2} + (-1)^{(f)} \hbar\omega_q \} \mathcal{K}_{\lambda_1 \lambda_2 q}^{(f)}(\omega) \approx \\
\approx -B_{\lambda_2 \lambda_1}^{\alpha} \{ \varphi_q^{(f)} n_F(E_{\lambda_1}) [1 - n_F(E_{\lambda_2})] - \varphi_q^{(g-l)} n_F(E_{\lambda_2}) [1 - n_F(E_{\lambda_1})] \}. \quad (6.11)
\end{aligned}$$

Подставляя (6.8), (6.9) и (6.11) в (6.7), выражая функцию $\langle \langle a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_2} \beta_q^{(f)} | a_{\lambda'}^+ a_{\lambda'} \rangle \rangle$ из (6.7) и подставляя ее в (6.6), находим

$$\begin{aligned}
i\omega K_{\lambda \lambda'}(\omega) = \\
= \frac{1}{T} \sum_{\lambda_l} \Gamma_{\lambda \lambda_l} \left\{ -\delta_{\lambda \lambda'} + \delta_{\lambda_l \lambda'} + \frac{TK_{\lambda \lambda'}(\omega)}{n_F(E_{\lambda}) [1 - n_F(E_{\lambda})]} - \frac{TK_{\lambda_l \lambda'}(\omega)}{n_F(E_{\lambda_l}) [1 - n_F(E_{\lambda_l})]} \right\}, \quad (6.12)
\end{aligned}$$

где $\Gamma_{\lambda\lambda'}$ — темп однофононных переходов, определенный равенством (4.9). Принимая во внимание соотношение (6.4), видим, что уравнение для функции Грина (6.12) эквивалентно линеаризованному кинетическому уравнению (4.13), а выражение для плотности тока через двухчастичную функцию Грина имеет вид (сравните с (5.14))

$$j = -\frac{e}{ST} \sum_{\substack{\lambda < S \\ \lambda' > S}} \Gamma_{\lambda\lambda'} \left\{ \mathcal{Y}_{\lambda} - \mathcal{Y}_{\lambda'} + \frac{TK_{\lambda}(\omega)}{n_F(E_{\lambda})[1-n_F(E_{\lambda})]} - \frac{TK_{\lambda'}(\omega)}{n_F(E_{\lambda'})[1-n_F(E_{\lambda'})]} \right\}. \quad (6.13)$$

Здесь

$$K_{\lambda}(\omega) = -\sum_{\lambda'} \mathcal{Y}_{\lambda'} K_{\lambda\lambda'}(\omega) = -\sum_{\lambda'} \mathcal{Y}_{\lambda'} K_{\lambda\lambda\lambda'}(\omega). \quad (6.14)$$

Разумеется, результаты, получаемые различными методами, эквивалентны, и использование того или иного подхода диктуется лишь соображениями удобства и вкуса. Отметим лишь следующее: несмотря на то, что результирующая плотность тока пропорциональна g^2 , вообще говоря, нельзя, вычисляя электропроводность по формуле Кубо, ограничиваться только членами низшего порядка по g (Э. О. Манучарянц, И. П. Звягин, 1974). Если использовать формальное разложение такого типа, т. е. если выполнять предельный переход $g \rightarrow 0$ до предельного перехода $\omega \rightarrow 0$, то для плотности тока получается выражение, совпадающее с формулой (6.13), в которой отсутствуют два последних слагаемых в фигурных скобках в правой части. Этот результат некорректен в статическом случае. Действительно, появление указанных слагаемых связано с расходимостью формального разложения по g в низкочастотной области. В названном разложении имеются члены, пропорциональные $g^{2n}\omega^{-n}$, и следует провести частичное суммирование рядов для того, чтобы получить выражение, конечное при $\omega \rightarrow 0$. Принятая выше процедура расщепления эквивалентна такому суммированию.

Причина расходимости становится ясной при рассмотрении уравнения (6.12). Формальное разложение по g соответствует последовательным итерациям этого уравнения. Очевидно, этот подход не оправдан в низкочастотной области, где необходимо пользоваться уравнением (6.12), эквивалентным задаче о случайной сетке сопротивлений (§ 4).

§ 7*. Многофононные перескоки

Изложенный выше (в § 3) вывод кинетического уравнения был основан на расщеплении, справедливом в низшем порядке по константе g . Соответственно справедливость его ограничена

однофононными процессами. Естественно ожидать, что однофононные процессы будут доминировать, если характерное изменение энергии при перескоках \bar{E} не превышает максимальной энергии фононов $\hbar\omega_{\max}$. Так, например, обстоит дело в компенсированных кристаллических полупроводниках, где прыжковая проводимость осуществляется в узкой полосе энергий («примесной зоне»). В то же время в аморфных материалах, по-видимому, обычна обратная ситуация: $\bar{E} \gg \hbar\omega_{\max}$. Действительно, величина \bar{E} при не слишком низких температурах может быть весьма большой, например порядка 0,1 эВ (см. ниже, § 10), что существенно больше максимальной энергии фононов. В этом случае следует ожидать, что проводимость будет определяться многофононными перескоками. При построении кинетической теории с учетом многофононных процессов мы уже не вправе пренебрегать членами $B_{\lambda\lambda}^q$, как это делалось в § 3. Эти члены описывают, в частности, эффект поляризации решетки электроном, находящимся в состоянии λ .

В зависимости от конкретной ситуации оказывается более удобным воспользоваться тем или иным базисом электронных локализованных функций. Пусть характерное значение интеграла перекрытия для пары центров достаточно велико, т. е. частота связанных с ним переходов велика по сравнению с обратным временем перестройки атомной матрицы. Этот случай мы будем называть адиабатическим. В качестве базиса здесь удобнее рассматривать «коллективизированные» функции $\psi_{\lambda}(x)$, отвечающие мгновенной конфигурации атомов, а возмущение, вызывающее переходы, описывать оператором неадиабатичности системы, подобно тому как это делают для безызлучательных переходов электронов на локальных центрах в кристаллах [46].

В обратном «неадиабатическом» предельном случае, когда интеграл перекрытия мал и частота прямых переходов мала по сравнению с частотой многофононных перескоков, более естественно исходить из представления атомных орбиталей $\phi_{\lambda}(x)$. При этом возмущением служит энергия взаимодействия электрона в состоянии $\phi_{\lambda}(x)$ с соседними центрами, т. е. разложение проводится формально по интегралу перекрытия. Вывод кинетического уравнения (уравнения баланса) в этом предельном случае можно найти в обзоре [47]; этот подход аналогичен принятому в теории поляронов малого радиуса [48, 49]. Как показано в [47], при этом получается уравнение вида (3.18), причем в качестве $W_{\lambda\lambda'}$ фигурирует вероятность многофононного перехода

$$W_{\lambda\lambda'} = \exp[(\tilde{E}_{\lambda} - \tilde{E}_{\lambda'})/2T] \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\tilde{E}_{\lambda} - \tilde{E}_{\lambda'})t\right] \Psi_{\lambda\lambda'}(t). \quad (7.1)$$

Здесь величины $\tilde{E}_\lambda = E_\lambda - \sum_q \frac{|B_{\lambda\lambda}^q|^2}{\hbar\omega_q}$ представляют собой энергии с учетом поляронных поправок,

$$\Psi_{\lambda\lambda'}(t) = |I(\lambda, \lambda')|^2 \exp(-2S_T(\lambda, \lambda')) \left\{ \exp \left[\sum_q \frac{|B_{\lambda\lambda}^q - B_{\lambda'\lambda'}^q|^2}{\text{sh}(\hbar\omega_q/2T)} \cos \omega_q t \right] - 1 \right\}, \quad (7.2)$$

$I(\lambda, \lambda')$ есть интеграл перекрытия (2.6), а

$$S_T(\lambda, \lambda') = \sum_q \frac{|B_{\lambda\lambda}^q - B_{\lambda'\lambda'}^q|^2}{(\hbar\omega_q)^2} \text{cth} \frac{\hbar\omega_q}{2T}. \quad (7.3)$$

Диагональные члены в операторе электрон-фононного взаимодействия, выброшенные в § 3 при рассмотрении однофононных процессов, учтены здесь с помощью канонического преобразования гамильтониана, полностью аналогичного используемому в теории полярона малого радиуса.

В адиабатическом случае удобно ввести операторы вторичного квантования для электронов в колеблющейся решетке $A_{\lambda'}^{\dagger}, A_{\lambda}$ при помощи соотношений

$$a_{\lambda} = \sum_{\lambda'} \xi_{\lambda\lambda'}(Q) A_{\lambda'}. \quad (7.4)$$

Здесь функции $\xi_{\lambda\lambda'}(Q)$, параметрически зависящие от нормальных координат, выбираются в виде

$$\xi_{\lambda\lambda'}(Q) = \int \Psi_{\lambda}^*(\mathbf{x}) \Psi_{\lambda'}(\mathbf{x}, Q) d\mathbf{x}, \quad (7.5)$$

где $\Psi_{\lambda'}(\mathbf{x}, Q)$ — собственные функции уравнения

$$\left\{ H_e + \sum_q B_q(\mathbf{x}) Q_q \right\} \Psi_{\lambda}(\mathbf{x}, Q) = E_{\lambda}(Q) \Psi_{\lambda}(\mathbf{x}, Q). \quad (7.6)$$

Через H_e обозначена, как и в § 2, одноэлектронная часть гамильтониана. Решения уравнения (7.6) мы будем считать известными. После перехода к операторам $A_{\lambda'}^{\dagger}, A_{\lambda}$ гамильтониан принимает вид

$$H = \sum_{\lambda} E_{\lambda}(Q) A_{\lambda}^{\dagger} A_{\lambda} + H_{\text{ph}}, \quad (7.7)$$

где операторы $A_{\lambda'}^{\dagger}, A_{\lambda}$ коммутируют с Q , но не коммутируют с $\partial/\partial Q$. Именно, согласно (7.4), (7.5)

$$\left[\frac{\partial}{\partial Q_q}, A_{\lambda} \right] = \frac{\partial A_{\lambda}}{\partial Q_q} = \sum_{\lambda'} \alpha_{\lambda\lambda'}^q(Q) A_{\lambda'}, \quad (7.8)$$

$$\alpha_{\lambda\lambda'}^q(Q) = - \int \Psi_{\lambda}^*(\mathbf{x}, Q) \frac{\partial \Psi_{\lambda'}(\mathbf{x}, Q)}{\partial Q_q} d\mathbf{x} = - [\alpha_{\lambda'\lambda}^q(Q)]^*. \quad (7.9)$$

Некоммутативность операторов A_λ и $\partial/\partial Q_q$ связана с неадиабатичностью системы; оператор неадиабатичности, пропорциональный $\alpha_{\lambda\lambda'}^q(Q)$, выступает здесь в качестве малого возмущения, вызывающего переходы между состояниями $\Psi_\lambda(\mathbf{x}, Q)$. Функции $\Psi_\lambda(\mathbf{x}, Q)$, как и $\psi_\lambda(\mathbf{x})$, мы будем считать локализованными.

Пусть $f_{\lambda\lambda'}(t)$ есть, как и раньше, одночастичная матрица плотности:

$$f_{\lambda\lambda'}(t) = \langle A_\lambda^\dagger A_{\lambda'} \rangle = \text{Sp } \rho(t) A_\lambda^\dagger A_{\lambda'},$$

диагональные элементы которой представляют собой средние числа заполнения состояний $\Psi_\lambda(\mathbf{x}, Q)$ в колеблющейся решетке. Уравнение движения для $f_\lambda \equiv f_{\lambda\lambda}(t)$ имеет вид

$$\frac{df_\lambda}{dt} = \text{Im} \sum_q \omega_q \left\langle \frac{\partial A_\lambda^\dagger A_\lambda}{\partial Q_q} \frac{\partial}{\partial Q_q} \right\rangle. \quad (7.10)$$

Как следует из (7.8), (7.9),

$$\frac{\partial A_{\lambda'}^\dagger A_\lambda}{\partial Q_q} = \sum_{\lambda_1} (\alpha_{\lambda\lambda_1}^q A_{\lambda'}^\dagger A_{\lambda_1} - \alpha_{\lambda_1\lambda'}^q A_{\lambda_1}^\dagger A_\lambda). \quad (7.11)$$

Далее можно поступать согласно общим рецептам вывода кинетического уравнения. Удобно записать уравнения движения

для оператора $\frac{\partial A_\lambda^\dagger A_\lambda}{\partial Q_q} \frac{\partial}{\partial Q_q}$, получить явное выражение для этого оператора с точностью до слагаемых порядка квадрата оператора неадиабатичности

$$\mathcal{L}_{\lambda\lambda'} = \sum_q \hbar \omega_q \alpha_{\lambda\lambda'}^q \frac{\partial}{\partial Q_q} \quad (7.12)$$

и затем провести усреднение с матрицей плотности $\rho(t)$. Замкнутое уравнение для диагональных элементов одночастичной матрицы плотности $f_{\lambda\lambda'}(t)$ получается при этом с помощью расщепления, выделяющего диагональные спаривания операторов $A_\lambda^\dagger, A_\lambda$. В отличие от обычного расщепления, такое расщепление учитывает зависимость колебательного движения атомной матрицы от состояния электронов; оно справедливо при малой неадиабатичности, характеризуемой оператором (7.12). Подставляя результат в уравнение (7.10), мы приходим, с точностью до членов низшего порядка по оператору неадиабатичности, к кинетическому уравнению (3.18), где, однако, в роли $W_{\lambda\lambda'}$ выступает вероятность многофононного перехода, выражение для которой совпадает, с принятой степенью точности, с выра-

жением для вероятности многофононного безызлучательного перехода [46]:

$$W_{\lambda\lambda'} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \mathcal{L}_{\lambda\lambda'} \exp(iH_{\lambda}t) \mathcal{L}_{\lambda\lambda} \exp(-iH_{\lambda}t) \rangle_{\lambda}. \quad (7.13)$$

Здесь $H_{\lambda} = H_{\text{ph}} + E_{\lambda}(Q)$, символ $\langle \dots \rangle_{\lambda}$ обозначает усреднение по фононной подсистеме с гамильтонианом $H_{\text{ph},\lambda} = H_{\lambda} - J_{\lambda}$, J_{λ} есть минимальное значение адиабатического потенциала, а оператор неадиабатичности дается выражением (7.12). Таким образом, кинетическое уравнение (3.18), описывающее баланс электронных переходов между локализованными состояниями с участием фононов, оказывается справедливым как для однофононных, так и для многофононных переходов, если выполнено неравенство (3.25). Конкретный характер процесса отражается при этом только на явном выражении для вероятности перехода (см. ниже, § 10).

Заметим, что линеаризация при наличии слабого внешнего электрического поля проводится в случае многофононных пере-скоков в основном так же, как и в § 4. В электрическом поле выражение (7.13) заменяется на

$$\tilde{W}_{\lambda\lambda'} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \mathcal{L}_{\lambda\lambda'} \exp(i\tilde{H}_{\lambda}t) \mathcal{L}_{\lambda\lambda} \exp(-i\tilde{H}_{\lambda}t) \rangle, \quad (7.14)$$

где $\tilde{H}_{\lambda} = H_{\lambda} + \mathcal{V}_{\lambda}$. Линейное по внешнему электрическому полю изменение вероятности перехода есть

$$\begin{aligned} \delta W_{\lambda\lambda'} &= i(\mathcal{V}_{\lambda'} - \mathcal{V}_{\lambda}) \int_{-\infty}^{\infty} dt \cdot t \langle \mathcal{L}_{\lambda\lambda'} e^{iH_{\lambda}t} \mathcal{L}_{\lambda\lambda} e^{-iH_{\lambda}t} \rangle_{\lambda} = \\ &= (\mathcal{V}_{\lambda} - \mathcal{V}_{\lambda'}) \frac{\partial W_{\lambda\lambda'}}{\partial J_{\lambda}}. \end{aligned} \quad (7.15)$$

Соответственно имеем

$$\begin{aligned} \delta W_{\lambda\lambda'} n_F(J_{\lambda}) [1 - n_F(J_{\lambda'})] - \delta W_{\lambda'\lambda} n_F(J_{\lambda'}) [1 - n_F(J_{\lambda})] &= \\ = (\mathcal{V}_{\lambda} - \mathcal{V}_{\lambda'}) \left\{ \frac{\partial W_{\lambda\lambda'}}{\partial J_{\lambda}} n_F(J_{\lambda}) [1 - n_F(J_{\lambda'})] - \frac{\partial W_{\lambda'\lambda}}{\partial J_{\lambda}} n_F(J_{\lambda'}) [1 - n_F(J_{\lambda})] \right\} &= \\ = -(\mathcal{V}_{\lambda} - \mathcal{V}_{\lambda'}) \left\{ W_{\lambda\lambda'} [1 - n_F(J_{\lambda'})] \frac{\partial n_F(J_{\lambda})}{\partial J_{\lambda}} + W_{\lambda'\lambda} n_F(J_{\lambda'}) \frac{\partial n_F(J_{\lambda})}{\partial J_{\lambda}} \right\} &= \\ = (\mathcal{V}_{\lambda} - \mathcal{V}_{\lambda'}) W_{\lambda\lambda'} n_F(J_{\lambda}) [1 - n_F(J_{\lambda'})]. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Отсюда вытекает линеаризованное уравнение баланса, совпадающее по виду с уравнением (4.13), однако содержащее много-

фононные темпы переходов $\Gamma_{\lambda\lambda'}$. Явное выражение для этих величин как функций температуры легко найти, пользуясь известными результатами теории многофононных переходов [46, 50].

В «низкотемпературном» случае, когда характерная энергия фононов $\hbar\bar{\omega}$ превышает T , основную роль играют перескоки, происходящие путем туннелирования между колебательными состояниями. Вероятность перехода с уменьшением энергии электрона ($J_\lambda < J_{\lambda'}$) при этом стремится к постоянной величине, а перехода с увеличением энергии ($J_\lambda > J_{\lambda'}$) оказывается пропорциональной величине $\exp[-(J_\lambda - J_{\lambda'})/T]$.

Таким образом,

$$W_{\lambda\lambda'} \sim \exp\left[-\frac{(J_\lambda - J_{\lambda'})\theta(J_\lambda - J_{\lambda'})}{T}\right]. \quad (7.17)$$

При $T > \hbar\bar{\omega}$ выражение для вероятности переходов имеет вид

$$W_{\lambda\lambda'} \sim \exp\left\{-\frac{1}{2T}\left[\frac{(J_\lambda - J_{\lambda'})^2}{\Delta\Omega} + J_\lambda - J_{\lambda'} + \frac{1}{4}\Delta\Omega\right]\right\}. \quad (7.18)$$

Здесь $\Delta\Omega$ — стоксовский сдвиг, представляющий собой один из основных параметров теории многофононных переходов. Заметим, что мы интересуемся здесь лишь главным, экспоненциальным множителем в вероятности переходов; для вычисления предэкспоненциального множителя необходимы дополнительные предположения (М. А. Кривоглаз, 1953).

§ 8. Общее обсуждение методов решения кинетического уравнения для локализованных электронов

Для нахождения макроскопических потоков, возникающих в рассматриваемой системе локализованных электронов под действием внешних возмущений, необходимо решить кинетическое уравнение (3.18). Согласно сказанному в § 4, в линейном случае эта задача эквивалентна задаче о нахождении сопротивления трехмерной разветвленной сетки случайных сопротивлений. Поскольку число локальных центров в системе (и, следовательно, соответствующее число узлов сетки) очень велико, решение такой задачи наталкивается на большие вычислительные трудности. В частности, как будет видно из дальнейшего, здесь не всегда можно пренебречь далекими корреляциями между числами заполнения центров (или эффективными потенциалами в узлах сетки). Прямое численное решение задачи также оказывается весьма трудоемким: каждый узел сетки в принципе связан со всеми остальными случайными сопротивлениями, величины которых зависят от координат и энергий центров. По этой

причине численные расчеты пока удалось выполнить лишь для ряда простых моделей. Все это обуславливает необходимость использования некоторых приближенных методов, которые отражали бы главные специфические особенности модели.

Ситуация заметно упрощается и выражения для плотности тока (5.12), (5.13) (вместе с (4.14), (4.12)) становятся явными, если не учитывать сдвигов химического потенциала, полагая все $\delta F_\lambda = 0$. Ясно, что эта ситуация реализуется, например, сразу после включения постоянного внешнего поля при $t \ll \tau$, когда числа заполнения центров еще не успели измениться. Изменение чисел заполнения приведет к изменению парциальных потоков $i_{\lambda\lambda'}$ между центрами таким образом, что сдвиги δF_λ , а с ними и изменения чисел заполнения центров примут некоторые стационарные значения, зависящие от приложенного внешнего поля. Из сказанного ясна необходимость учета в общем случае добавок δF_λ в (4.12) при вычислении стационарных потоков, т. е. необходимость решения кинетического уравнения (4.15). Пренебрежение величинами δF_λ в статическом случае может привести, например, к парадоксальному выводу о невозможности протекания постоянного тока по случайной сетке сопротивлений. Действительно, уравнение

$$\sum_{\lambda'} \Gamma_{\lambda\lambda'} (\mathcal{V}_\lambda - \mathcal{V}_{\lambda'}) = 0,$$

вытекающее из (4.15) при $\delta F_\lambda = 0$, допускает только тривиальное решение $\mathcal{V}_\lambda = 0$. Этот вывод есть лишь следствие некорректного пренебрежения величинами δF_λ .

Пример физической ситуации, когда не происходит заметного изменения чисел заполнения состояний, дает нам случай высоких частот, когда плотность тока может быть представлена конфигурационным средним следующего вида:

$$j(\omega) = \frac{e^2}{2\Omega} \sum_{\lambda, \lambda' \in \Omega} \langle (x_\lambda - x_{\lambda'})^2 \Gamma_{\lambda\lambda'} \rangle \mathcal{E}(\omega).$$

Волее гибким, однако, оказывается парное приближение, когда ток представляется в виде суммы вкладов парциальных токов от отдельных пар центров локализации. Дело в том, что в указанном приближении могут учитываться и возможные изменения чисел заполнения центров пары.

Парное приближение с успехом было использовано для вычисления частотной зависимости плотности тока в области не слишком низких частот (М. Поллак, Т. М. Джебел, 1961); соответствующая частотная зависимость близка к экспериментально наблюдаемому закону ω^s , $s \sim 0,8$ (см. § I.3). Ясно, однако, что

при фиксированной плотности центров в области очень низких частот парное приближение становится неприменимым. Действительно, если за полупериод поля электрон в среднем успевает прыгнуть несколько раз, парного приближения недостаточно. В частности, парное приближение неприменимо в статическом случае.

В стационарном случае сопротивление системы (или эквивалентной ей сетке случайных сопротивлений) определяется полной вероятностью того, что электрон пройдет через всю систему. Названная вероятность, в силу сказанного выше, не сводится к усредненным индивидуальным вероятностям перескоков, а определяется глобальными характеристиками образца. Действительно, электроны будут пересекать систему в направлении приложенного поля, выбирая оптимальные пути, отвечающие максимальной вероятности прохождения через всю систему. Такие пути, вообще говоря, не состоят из последовательности перескоков, каждый из которых происходит с данного центра λ на соседний λ' , для которого темп переходов $\Gamma_{\lambda\lambda'}$ максимален. Дело в том, что эти «соблазнительные» цепочки перескоков фактически не эффективны: они, как правило, заканчиваются «мертвыми концами» («тупиками»), т. е. электрон в конце концов попадает на центр, вероятность ухода с которого очень мала. В связи с этим было предложено использовать другой подход, основанный на теории протекания, или перколяции (В. Амбегаокар, Б. И. Гальперин, Дж. С. Лэнджер, 1971; Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, 1971; М. Поллак, 1972)*). Краткая сводка основных результатов теории протекания приведена в Приложении XI.

Задачу о прыжковой проводимости можно непосредственно свести к перколяционной задаче связей, рассмотренной в Приложении XI, если система центров топологически упорядочена (Дж. М. Займан, 1968). Роль беспорядка сводится при этом к случайному изменению темпов переходов между центрами, например, при изменении расстояния R между ними. Часто темпы переходов очень резко (экспоненциально) зависят от R и изменяются в очень широких пределах. При этом проводимость системы можно оценить с помощью следующего приема. Будем

*) Название «теория протекания» (теория перколяции) происходит от английского термина «percolation theory» (буквальный перевод: percolation — просачивание). Термин «протекание» довольно точно отражает существо дела в ряде случаев, в частности, когда задачу можно непосредственно свести к классической задаче о течении жидкости по местности со случайным рельефом. В случае прыжковой проводимости по локализованным состояниям мы уже не имеем столь наглядной картины: движение происходит по дискретному набору точек пространства, и, сверх того, может добавляться четвертая — энергетическая — координата. Оба термина «протекание» и «перколяция» используются в литературе на русском языке на равных правах.

считать соседние центры «связанными», если $\Gamma_{\lambda\lambda'}$ больше некоторого значения Γ ; соответственно связь между соседними центрами отсутствует, если $\Gamma_{\lambda\lambda'} < \Gamma$. Вероятность x существования связи между соседними центрами определяется в этом случае вероятностью того, что темп перехода $\Gamma_{\lambda\lambda'}$ превосходит Γ ; очевидно, $x = x(\Gamma)$. При таком определении мы приходим к перколяционной задаче связей. Задача эта состоит в отыскании критического значения доли неразорванных связей $x_c^{(b)}(\Gamma)$, при котором еще существует бесконечный кластер зацепляющихся связей, так что электрон может пересечь всю систему по связям (т. е. путем переходов с $\Gamma_{\lambda\lambda'} > \Gamma$). Критические значения $x_c^{(b)}$ для различных двумерных и трехмерных решеток хорошо известны (см. Приложение XI), они удовлетворяют приближенному соотношению $zx_c^{(b)} \approx d/(d-1)$, где d — размерность пространства, z — координационное число, а $zx_c^{(b)}$ есть среднее число неразорванных связей, сходящихся в данном узле. Зная $x_c^{(b)}$, можно найти и критическое значение Γ_c , отвечающее моменту появления бесконечного кластера связей. Это значение и определяет характерную величину проводимости системы. Действительно, переходы с $\Gamma_{\lambda\lambda'} \ll \Gamma_c$ мало сказываются на общей проводимости, а переходы с $\Gamma_{\lambda\lambda'} \gg \Gamma_c$ не играют существенной роли, ибо, как уже говорилось, электрон не может пройти через всю систему только путем таких перескоков. Это непосредственно подтверждается результатами численных расчетов, выполненных для модели регулярной кубической сетки с экспоненциальным разбросом темпов перескоков между соседними узлами.

Для случая сильно локализованных электронов перколяционные соображения приводят к несколько иной модели [51], отличающейся топологически от стандартных перколяционных задач для регулярных решеток. Именно, будем считать, что темпы переходов $\Gamma_{\lambda\lambda'}$ случайны и меняются в широких пределах. Будем по очереди разрывать «связи» между центрами, полагая соответствующие $\Gamma_{\lambda\lambda'} = 0$, начиная от минимального. Тогда при некотором значении $\Gamma_{\lambda\lambda'} = \Gamma_c$ электрон уже не сможет пересечь всю систему и проводимость точно обратится в нуль. Иначе говоря, если считать по определению, что два центра «связаны», лишь если $\Gamma_{\lambda\lambda'} > \Gamma$, то бесконечный кластер зацепляющихся связей существует только при $\Gamma < \Gamma_c$. В рассматриваемом случае как положения центров, так, возможно, и их энергии случайны, и мы имеем дело с топологически неупорядоченной сеткой связей. В такой задаче не имеет точного смысла представление о координационном числе, а общие закономерности, установленные для регулярных решеток (касающиеся, например, инвариантности некоторых величин, см. Приложение XI), могут оказаться

непосредственно неприменимыми. Мы вернемся к этому вопросу в следующем параграфе.

В случае однофононных перескоков конкретный вид выражения для $\Gamma_{\lambda\lambda'}$ определяется формулами (4.9) вместе с (3.20) и (3.22):

$$\Gamma_{\lambda\lambda'} = \frac{\omega_{\lambda\lambda'}}{\left| \exp\left(-\frac{E_\lambda - E_{\lambda'}}{T}\right) - 1 \right| \left(\exp\left(\frac{E_\lambda - F}{T}\right) + 1 \right) \left(\exp\left(-\frac{E_{\lambda'} - F}{T}\right) + 1 \right)} \equiv \omega_{\lambda\lambda'} \cdot \zeta(T, E_\lambda, E_{\lambda'}). \quad (8.1)$$

Функция $\zeta(T, E_\lambda, E_{\lambda'})$ содержит всю основную температурную зависимость темпа переходов. Во многих задачах характерные изменения энергии при перескоках существенно превосходят T . Если, наряду с этим, указанные изменения не превышают максимальной энергии фонона (это, как правило, отвечает низким температурам), то перескоки оказываются однофононными. В этом случае из выражения (8.1) при $|E_\lambda - F|, |E_{\lambda'} - F| \gg T$ приближенно получаем, оставляя лишь основную, экспоненциальную температурную зависимость:

$$\zeta(T, E_\lambda, E_{\lambda'}) \approx \exp\left(-\frac{|E_\lambda - E_{\lambda'}| + |E_\lambda - F| + |E_{\lambda'} - F|}{2T}\right). \quad (8.2)$$

Следует подчеркнуть, что выражение (8.2) для функции $\zeta(T, E_\lambda, E_{\lambda'})$ применимо не только для однофононных процессов, — нетрудно убедиться в том, что оно сохраняет силу и для туннельных многофононных переходов, вероятность которых определяется формулой (7.17).

С другой стороны, как видно из формулы (8.1), температурная зависимость темпа однофононных переходов может быть и неэкспоненциальной. Так, при $|E_\lambda - F|, |E_{\lambda'} - F| \ll T$ имеем

$$\zeta(T, E_\lambda, E_{\lambda'}) \approx T/(4|E_\lambda - E_{\lambda'}|). \quad (8.3)$$

При определенных условиях неэкспоненциальная зависимость темпа переходов может привести к линейному температурному закону для прыжковой проводимости (В. Л. Бонч-Бруевич, Р. Кайпер, 1972)*.

Функция $\omega_{\lambda\lambda'}$ содержит квадрат матричного элемента с электронными волновыми функциями, локализованными около точек \mathbf{R}_λ и $\mathbf{R}_{\lambda'}$; соответственно асимптотически при больших расстояниях между центрами можно положить

$$\omega_{\lambda\lambda'} \sim \exp(-2\gamma|\mathbf{R}_\lambda - \mathbf{R}_{\lambda'}|). \quad (8.4)$$

* Возможно, что этим объясняются экспериментальные результаты Е. М. Гершензона и др., указанные в § 1.3 (В. Л. Бонч-Бруевич, Э. О. Ману-чарянц, 1975).

Обычно для простоты обратный радиус локализации γ считается постоянным, не зависящим ни от энергии, ни от направления в пространстве.

Выделяя основную экспоненциальную зависимость, мы можем переписать выражение для темпа перехода в случае (8.2) в виде

$$\Gamma_{\lambda\lambda'} = \Gamma_{\lambda\lambda'}^{(0)} \exp(-\eta_{\lambda\lambda'}). \quad (8.5)$$

Здесь предэкспоненциальный множитель $\Gamma_{\lambda\lambda'}^{(0)}$ слабо зависит от энергий и координат центров, а

$$\eta_{\lambda\lambda'} = 2\gamma |R_\lambda - R_{\lambda'}| + \frac{|E_\lambda - E_{\lambda'}| + |E_\lambda - F| + |E_{\lambda'} - F|}{2T}. \quad (8.6)$$

Резкая экспоненциальная зависимость темпов переходов от характерных разностей энергий и от расстояний между центрами как раз и приводит к возможности перколяционного описания задачи о прыжковой проводимости (с логарифмической точностью). Темпы переходов столь быстро убывают при увеличении расстояний между центрами и при возрастании разностей их энергий, что переходы на расстояния, заметно превышающие критические, как и переходы между центрами с сильно различающимися энергиями, дают малый вклад, несмотря на то, что число возможных путей перескоков при этом возрастает.

Таким образом, в применении к задаче о случайной сетке сопротивлений перколяционный подход оказывается эффективным приближенным методом, позволяющим избежать весьма трудоемкой процедуры прямого решения кинетического уравнения и отыскания средних чисел заполнения центров во внешнем поле. Разумеется, наряду с общими рассуждениями, применимость такого подхода подтверждается и непосредственным сравнением с результатами численного расчета. Такое сравнение было проведено для модельной системы с числом центров порядка 10^3 , случайно расположенных в пространстве, с темпами переходов, экспоненциально зависящими от расстояний между центрами и, возможно, от энергий состояний (Дж. Э. Пайк, К. Зигер, 1974). Результат решения задачи о сопротивлении разветвленной сетки сопротивлений совпал, с логарифмической точностью, с зависимостью плотности тока от среднего расстояния между центрами, получаемой на основе перколяционного подхода. В то же время численный расчет (В. Амбегаокар, С. Кохран, Дж. Куркьярви, 1973) показал, что приближенные теории, развиваемые без учета перколяционных соображений, дают значительно худшее описание системы.

Следует отметить, что перколяционный подход в стандартной своей форме дает лишь основную, экспоненциальную зависи-

мость проводимости от температуры и концентрации. Действительно, указанная выше процедура позволяет найти показатель экспоненты в формуле (8.5) с точностью до слагаемых порядка единицы, т. е. с точностью до предэкспоненциального множителя. Вычисление предэкспоненциального множителя представляет собой существенно более сложную задачу. Дело в том, что здесь мы встречаемся с трудностью, специфической для неупорядоченных систем. Именно, точный вид предэкспоненциального множителя в асимптотических выражениях для локализованных волновых функций не только плохо известен (как бывает при рассмотрении глубоких уровней в кристаллических материалах), но может быть и случайным.

§ 9*. Критерий связей

Поскольку в общем случае кинетическое уравнение не допускает аналитического решения, сведение задачи о проводимости к соответствующей перколяционной задаче существенно упрощает дело, если решение последней известно. «Классические» перколяционные задачи для регулярных решеток исследованы достаточно подробно (см. [51—53] и Приложение XI). Однако для неупорядоченного расположения центров численных расчетов существенно меньше. Наиболее подробно изучена следующая задача. Пусть задана некоторая система точек λ , случайным образом разбросанных в пространстве. Возьмем некоторую величину R и будем считать две точки «связанными», если расстояние между ними $|\mathbf{R}_\lambda - \mathbf{R}_\mu|$ не превышает R . Очевидно, число связей в системе возрастает с возрастанием концентрации точек n , причем при некотором значении концентрации зацепляющиеся связи в системе образуют бесконечный кластер. С другой стороны, при фиксированном n бесконечный кластер появляется при увеличении R до некоторого значения $R = r_n$. Бесконечный кластер возникает, когда безразмерный параметр

$$x = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{R}{2} \right)^3 n \quad (9.1)$$

становится равным x_c . Численные расчеты дают для величины x_c значения, несколько различающиеся у разных авторов и лежащие в интервале между 0,29 и 0,38. Причина расхождения состоит, по-видимому, в том, что численные расчеты выполняются для систем с ограниченным числом узлов, в то время как величина x_c по определению относится к бесконечной системе. Таким образом, неизбежно возникает проблема выбора граничных условий и экстраполяции результатов, полученных для ограниченных систем, на случай бесконечно большого объема,

В дальнейшем мы будем использовать значение $x_c = 0,347$ (Дж. Куркьярви, 1974).

Если считать, как и выше, два центра связанными, когда $|\mathbf{R}_\lambda - \mathbf{R}_{\lambda'}| < R$, то среднее число связей некоторого центра системы со всеми остальными определяется выражением

$$\nu = \int_{|\mathbf{R}_\lambda - \mathbf{R}_{\lambda'}| < R} d\mathbf{R}_{\lambda'} \mathcal{P}(\mathbf{R}_\lambda, \mathbf{R}_{\lambda'}). \quad (9.2)$$

Здесь $\mathcal{P}(\mathbf{R}_\lambda, \mathbf{R}_{\lambda'}) d\mathbf{R}_{\lambda'}$ есть вероятность того, что центр λ' попадает в объем $d\mathbf{R}_{\lambda'}$ около точки $\mathbf{R}_{\lambda'}$ при условии, что данный центр λ находится в точке \mathbf{R}_λ . В отсутствие корреляции между положениями центров

$$\mathcal{P}(\mathbf{R}_\lambda, \mathbf{R}_{\lambda'}) = n \quad (9.3)$$

и число связей центра

$$\nu = \frac{4\pi}{3} R^3 n \quad (9.4)$$

в 8 раз превышает параметр (9.1). Соответственно критическое число связей лежит в интервале $2,32 \leq \nu_c \leq 3,0$ (принятому выше значению параметра (9.1) отвечает $\nu_c = 2,78$).

Таким образом, достижению критической плотности связей соответствует момент появления бесконечного кластера в системе случайно расположенных центров со связями, наличие которых определяется расстоянием между центрами. Естественным представляется подход, в котором вычисление прыжковой проводимости рассматривается как задача со случайными связями. При этом критическое перколяционное значение парциального темпа переходов можно найти с помощью так называемого критерия связей. Согласно последнему плотность связей достигает критического значения

$$\nu = \nu_c \quad (9.5)$$

в момент появления бесконечного кластера. Для случая, когда темпы переходов не зависят от энергий (все энергии локальных состояний почти совпадают), критерий связей (9.5) дает решение перколяционной задачи.

Заметим, однако, что в силу топологического различия перколяционных задач для регулярных решеток и для системы случайных центров следует проявлять осторожность при распространении выводов, относящихся к регулярным решеткам, на неупорядоченный случай. Так, например, инвариантность среднего числа связей в критической точке, $z\chi_c^{(b)}$, близкого к 1,5 для трехмерного случая, иногда служила основанием для того, чтобы положить $\nu_c = 1,5$ и для неупорядоченной системы цен-

тров. Однако, как отмечалось выше, численные расчеты для таких систем дают для ν_c заметно большее значение.

Критерий связей (9.5) можно обобщить и на тот случай, когда темпы переходов зависят не только от взаимного положения центров, но и от их энергий. Именно, пусть два центра по-прежнему считаются связанными при некотором Γ , если $\Gamma_{\lambda\lambda'} > \Gamma$. Тогда среднее число связей центра с энергией E_λ равно

$$\nu(E_\lambda - F) = \int_{\Gamma_{\lambda\lambda'} > \Gamma} d\mathbf{R}_{\lambda'} dE_{\lambda'} \mathcal{P}(\mathbf{R}_\lambda, \mathbf{R}_{\lambda'}, E_\lambda, E_{\lambda'}). \quad (9.6)$$

Здесь под знаком интеграла стоит условная вероятность попадания центра λ' в объем $d\mathbf{R}_{\lambda'}$ около точки $\mathbf{R}_{\lambda'}$ и в интервал энергий $(E_{\lambda'}, E_{\lambda'} + dE_{\lambda'})$, если в точке \mathbf{R}_λ расположен центр с энергией электрона E_λ . Поскольку число связей (9.6) зависит от энергии центра, критерий (9.5) нельзя использовать непосредственно. Его следует заменить некоторым требованием, содержащим величину $\nu(E_\lambda - F)$, как-то усредненную по энергиям. Задача состоит теперь в установлении способа усреднения.

Используя описанные выше результаты численного расчета для трехмерной задачи, приведенные в начале этого параграфа, удастся установить точные границы для критической величины средней плотности связей в четырехмерном случае (И. П. Звягин, 1973).

Найдем сначала зависимость числа связей от энергии, считая, что корреляция в положении локальных центров отсутствует, а энергии их распределены случайно с плотностью $\rho(E)$. При этом

$$\mathcal{P}(\mathbf{R}_\lambda, \mathbf{R}_{\lambda'}, E_\lambda, E_{\lambda'}) = \rho(E_{\lambda'}), \quad (9.7)$$

$$\nu(E - F) = 4\pi \int_0^\infty dR R^2 \int dE' \rho(E') \theta\{\eta - \eta(R, E, E')\}. \quad (9.8)$$

Здесь $\eta = \ln(\Gamma/\Gamma^0)$, Γ^0 — характерное значение предэкспоненциального множителя в формуле (8.5), а $\eta(R, E, E')$ — показатель экспоненты в формуле (8.5) для темпа переходов. При $|\mathbf{R}_\lambda - \mathbf{R}_{\lambda'}| = R$, $E_\lambda = E$, $E_{\lambda'} = E'$ мы имеем согласно (8.6)

$$\eta(R, E, E') = 2\gamma R + \frac{|E - E'| + |E - F| + |E' - F|}{2T}. \quad (9.9)$$

Поскольку расчеты ведутся с логарифмической точностью, мы заменили условие $\Gamma_{\lambda\lambda'} > \Gamma$ условием $\eta_{\lambda\lambda'} < \eta$. Очевидно, число связей обращается в нуль, если либо $|E - F| > \eta T \equiv E_{\max}$, либо $R > \eta/2\gamma \equiv R_{\max}$. Таким образом, лишь центры с энергиями, удаленными от F не далее, чем на E_{\max} , могут образовать

вать связи; слой толщины $2E_{\max}$ около F называют эффективным. Будем считать, что плотность состояний достаточно медленно меняется в пределах эффективного слоя:

$$\left. \frac{d \ln \rho(E)}{dE} \right|_{E=F} \ll E_{\max}^{-1}. \quad (9.10)$$

Тогда, подставляя (9.9) в (9.8) и вычисляя интегралы, получаем

$$\nu(E) = \frac{\kappa}{2} \left(1 - \frac{|E|}{E_{\max}}\right)^3 \left(1 + \frac{|E|}{E_{\max}}\right) \theta(E_{\max} - |E|), \quad (9.11)$$

где

$$\kappa = \frac{4\pi}{3} \rho(F) \frac{\eta^4 T}{(2\gamma)^3}. \quad (9.12)$$

Замечая, что функция $\nu(E)$ монотонно убывает с возрастанием E , мы можем найти нижнюю границу для критического значения κ_c , определяющего появление бесконечного кластера связей. Именно, бесконечного кластера заведомо нет, если критическое значение числа связей не достигнуто ни при каких значениях E . Таким образом, равенство

$$\max \{\nu(E)\} = \nu_c,$$

где ν_c — критическое число связей для трехмерной задачи, и определяет искомый нижний предел для параметра κ_c . Поскольку $\max \{\nu(E)\} = \kappa/2$, то

$$\kappa_c \geq 2\nu_c. \quad (9.13)$$

Для отыскания верхней границы для параметра κ_c вычислим среднее число связей данного центра с энергией E со всеми центрами, энергии которых лежат в слое $|E_{\lambda'} - F| < \delta \leq E_{\max}$. Очевидно, это число есть

$$\nu_\delta(E_\lambda - F) = \int_{\substack{\eta_{\lambda\lambda'} < \eta \\ |E_{\lambda'} - F| < \delta}} d\mathbf{R}_{\lambda'} dE_{\lambda'} \mathcal{P}(\mathbf{R}_\lambda, \mathbf{R}_{\lambda'}, E_\lambda, E_{\lambda'}).$$

Пренебрегая по-прежнему корреляцией в расположении локальных центров и изменением плотности состояний в пределах эффективного слоя (см. (9.7), (9.10)), мы получаем

$$\nu_\delta(E) = \frac{\kappa}{2} \left[\left(1 - \frac{|E|}{E_{\max}}\right)^3 \left(1 + \frac{|E|}{E_{\max}}\right) - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\delta}{E_{\max}}\right)^4 - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\delta}{E_{\max}} - \frac{|E|}{E_{\max}}\right)^4 \theta(E_{\max} - \delta - |E|) \right]. \quad (9.14)$$

Функция $\nu_\delta(E)$, как и $\nu(E)$, монотонно убывает с ростом $|E|$; поэтому среднее число связей любого центра из слоя $|E - F| \ll$

$< \delta$ с другими центрами этого слоя всегда превышает величину $\nu_\delta(\delta)$. Если минимальное число связей любого центра слоя $|E - \delta| < \delta$ с другими центрами этого слоя достигнет ν_c , то в системе заведомо будет существовать бесконечный кластер. Таким образом, условие $\nu_\delta(\delta) = \nu_c$, будучи выполненным при каком-нибудь δ , накладывает ограничение на величину κ_c сверху. Для того чтобы получить наилучшую оценку κ_c сверху, выберем значение $\delta = \delta_1$, при котором функция $\nu_\delta(\delta)$ максимальна. С помощью выражения (9.14) можно найти, что единственный в интервале $(0, E_{\max})$ вещественный корень уравнения

$$\frac{d\nu_\delta(\delta)}{d\delta} = 0$$

равен $\delta_1 = x_1 E_{\max}$, где $x_1 \approx 0,21$. Таким образом, условие, ограничивающее κ_c сверху, имеет вид

$$\kappa_c \leq 2[(1 - x_1)^3(1 + x_1) - 0,5(1 - x_1)^4 - 0,5(1 - 2x_1)^4] \approx 5,8\nu_c. \quad (9.15)$$

Если применить критерий (9.5) просто к среднему числу связей в слое $|E - F| < E_{\max}$, то получаем $\bar{\nu} = 6\kappa/40$ и $\kappa_c \approx 6,67\nu_c$, т. е. заведомо завышенное значение. Причина этого состоит в том, что, в соответствии со сказанным выше, не все состояния слоя $|E - F| < E_{\max}$ эффективно принимают участие в проводимости. Среднее число связей для центров, энергии которых лежат вблизи границ слоя, слишком мало, и эти состояния не дают заметного вклада в проводимость. Таким образом, реальная ширина слоя состояний, эффективно участвующих в проводимости, оказывается заметно меньшей величины $2E_{\max}$.

Более точную оценку величины κ_c сверху можно получить, рассматривая число связей, усредненное по слою $|E - F| < \delta$:

$$\bar{\nu}_\delta = \frac{1}{\delta} \int_0^\delta dE \nu_\delta(E). \quad (9.16)$$

Примем, что бесконечный кластер появится, когда $\bar{\nu}_\delta$ для какого-нибудь δ достигнет ν_c :

$$\max \bar{\nu}_\delta = \nu_c. \quad (9.17)$$

Максимальная средняя плотность связей достигается при $\delta = \delta_2$, где δ_2 — корень уравнения

$$\frac{d\bar{\nu}_\delta}{d\delta} = 0. \quad (9.18)$$

Явный вид уравнения (9.18) нетрудно найти, используя (9.14) и (9.16). Оно представляет собой алгебраическое уравнение пятой

степени, единственный вещественный корень которого в интервале $(0, E_{\max})$ равен

$$\delta_2 = x_2 E_{\max}, \quad (9.19)$$

где $x_2 \approx 0,36$, а соответствующее значение $\bar{v}_{\delta_2} \approx 0,28\kappa$. Отсюда

$$\kappa_c \approx 3,6v_c. \quad (9.20)$$

Как мы видели, прямое усреднение по энергетическому слою вблизи уровня Ферми, где число связей на центр монотонно падает при возрастании $|E - F|$, приводит к переоценке роли центров, лежащих вблизи границ слоя, т. е. к завышению получаемого значения концентрации связей. По этой причине прямое усреднение по слою $|E - F| < \delta$ в формуле (9.16) также дает завышенное значение концентрации связей. Соответственно соотношения (9.13) и (9.20) дают

$$2v_c < \kappa_c < 3,6v_c. \quad (9.21)$$

Интерполяционную оценку критического значения κ_c можно получить, проводя усреднение по эффективному слою с весовой функцией, пропорциональной плотности состояний $\rho(E)$ и среднему числу связей центра с энергией E (М. Поллак, 1972; К. Машке, Х. Оверхоф, П. Томас, 1974). При этом критерий связей принимает вид

$$\bar{v} = \frac{\int dE v^2(E) \rho(E)}{\int dE v(E) \rho(E)} = v_c. \quad (9.22)$$

Непосредственное вычисление величины \bar{v} с помощью (9.11) в условиях (9.10) дает $\bar{v} = \frac{115}{378} \kappa$, т. е.

$$\kappa_c \approx 3,3v_c. \quad (9.23)$$

Это значение κ_c попадает в интервал (9.21) и близко к значению (9.20), полученному с помощью вариационной процедуры.

Как для двумерных систем при учете энергетической зависимости темпов переходов, так и для трехмерных систем с темпами переходов, не зависящими от энергии, критерий связей в форме (9.22) или (9.21) хорошо согласуется с результатами численных расчетов. Заметим все же, что подробное обоснование критерия связей проведено лишь для систем с некоррелированным расположением примесных центров и с постоянной плотностью состояний. Его, однако, нередко используют и для качественного рассмотрения более общих моделей.

Критерий связей позволяет, основываясь на значениях параметров, полученных путем численных расчетов, представить результат использования перколяционных соображений в относи-

тельно простом аналитическом виде. При этом оказывается возможным принять во внимание и более тонкие эффекты, обычно не учитываемые в модельных численных расчетах и связанные с зависимостью плотности состояний и радиуса локализации от энергии и т. п.

§ 10. Температурная зависимость прыжковой проводимости

Использование идей теории протекания (§ 8) позволяет с логарифмической точностью найти зависимость прыжковой проводимости системы по локализованным состояниям от их плотности и от температуры. Именно, в силу резкой экспоненциальной зависимости темпов переходов от разностей энергий и координат центров проводимость системы определяется критическим значением η_c :

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-\eta_c). \quad (10.1)$$

Предэкспоненциальный множитель σ_0 здесь слабо (по степенному закону) зависит от температуры и концентрации, и для его нахождения изложенных в §§ 8, 9 соображений недостаточно.

Для определения величины η_c можно воспользоваться, например, критерием связей (§ 9). Рассмотрим сначала задачу о прыжковой проводимости в условиях, когда темпы переходов зависят только от расстояний между центрами. Согласно (8.6) энергетической зависимостью темпов переходов можно пренебречь, когда характерные разности энергий \bar{E} оказываются намного меньшими $\eta_c T$. Это может иметь место, например, в случае прыжковой проводимости по узкой примесной зоне в компенсированных кристаллических полупроводниках. Критическое значение показателя η определяется в этом случае из условия (9.5), причем n — полная концентрация центров в примесной зоне. Таким образом, концентрационная зависимость проводимости имеет вид

$$\sigma = \sigma_0 \exp \left[-\gamma \left(\frac{6\nu_c}{\pi n} \right)^{1/3} \right]. \quad (10.2)$$

В этом случае проводимость меняется с температурой по активационному закону $\sigma \sim \exp(-\epsilon_3/T)$, где ϵ_3 есть энергетическое расстояние от уровня Ферми до той полосы энергий, переходы в которой определяют проводимость. В ряде случаев величину ϵ_3 можно вычислить явно. Например, для сильно компенсированного полупроводника роль ϵ_3 играет расстояние от уровня Ферми до примесного пика плотности состояний. Оно дается выражением (Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, 1971)

$$\epsilon_3 \sim \frac{e^2 n^{1/3}}{\epsilon (1-K)^{1/3}}. \quad (10.3)$$

Здесь ϵ — диэлектрическая проницаемость, а K — степень компенсации.

Перейдем теперь к другому случаю, когда энергии локализованных состояний распределены в широком интервале и зависимость темпов переходов от энергии существенна. Эта ситуация может реализоваться в аморфных полупроводниках и в компенсированных кристаллических полупроводниках при низких температурах, когда величина $\eta_c T$ становится меньше ширины примесной зоны. В дальнейшем мы будем пренебрегать корреляцией между координатами и энергиями центров: в рассматриваемом случае это предположение оправдывается тем, что характерная длина перескока r_h порядка $\gamma^{-1}\eta_c$ и намного превышает радиус локализации γ^{-1} .

Поскольку среднее число связей ν оказывается теперь зависящим от энергии, следует воспользоваться модифицированным критерием связей для величины $\nu(E)$, должным образом усредненной по эффективному слою энергий (§ 9). При выполнении условия (9.10), когда плотность состояний мало изменяется в пределах эффективного слоя, мы имеем на основании критерия связей

$$\frac{4\pi}{3} \rho(F) \frac{\eta_c^4 T}{(2\gamma)^3} = A\nu_c. \quad (10.4)$$

Согласно § 9, постоянная A близка к 3,3. Таким образом,

$$\eta_c = (T_0/T)^{1/4}, \quad (10.5)$$

где

$$T_0 = A_1 \gamma^3 / \rho(F) \quad (10.5')$$

и $A_1 = 6A\nu_c/\pi \approx 17,5$. Мы получили для рассматриваемой модельной системы закон Мотта (I. 3.7). Полагая для оценки $\gamma = 2 \cdot 10^7$ см⁻¹, $\rho(F) = 10^{19}$ см⁻³ эВ⁻¹, мы находим $T_0 \approx 10^8$ К, что близко к экспериментальному значению T_0 в ряде материалов.

Физические причины, по которым температурная зависимость проводимости в данном случае оказывается более слабой, чем обычная активационная зависимость, можно понять в рамках модели случайно распределенных центров локализации (Н. Ф. Мотт, 1969). Пренебрежем корреляцией между координатами и энергиями центров. Тогда чем ближе друг к другу расположены два каких-либо случайно выбранных центра, тем больше (в среднем) будут отличаться их энергии, и наоборот. Действительно, в сферу радиуса R , описанную около некоторого заданного центра, в среднем попадает $\frac{4\pi}{3} \rho R^3 \Delta E$ центров, энергии которых лежат в полосе шириной ΔE (для простоты мы рассматриваем случай постоянной в данном интервале энергии плотно-

сти состояний ρ). Отсюда следует, что для «типичных» пар центров, отстоящих друг от друга не дальше, чем на R , разность энергий есть величина порядка

$$\Delta E \approx \left(\frac{4\pi}{3} \rho R^3 \right)^{-1}. \quad (10.6)$$

Из таких типичных пар наибольший вклад в проводимость будут давать те, которым отвечает максимальная вероятность перехода, т. е. (с логарифмической точностью) максимальное значение экспоненциальной функции в выражении для вероятности активированного прыжка. В соответствии со сказанным, оптимизация ее аргумента должна проводиться при условии, что $R = |\mathbf{R}_\lambda - \mathbf{R}_{\lambda'}|$ и $\Delta E = |E_\lambda - E_{\lambda'}|$ связаны соотношением (10.6). Поскольку можно ожидать, что из таких типичных пар можно составить цепочки перескоков, проходящие через весь образец, полученное таким путем значение и принимается за характеристику проводимости всего образца. Это рассуждение приводит к закону Мотта (10.1), (10.5) с близким к указанному выше значением постоянной A_1 . Оно обосновывается изложенным ранее последовательным подходом, учитывающим переходы вверх и вниз по энергии и опирающимся на перколяционные соображения.

Говоря о соответствии закона Мотта экспериментальным данным по температурной зависимости проводимости (в частности, для аморфных германия и кремния), следует иметь в виду известные трудности такого сравнения. Действительно, в условиях, когда энергия активации проводимости зависит от температуры, трудно с полной уверенностью установить закон изменения проводимости как из-за ограниченности температурного интервала измерений, так и из-за неопределенности, связанной с предэкспоненциальным множителем σ_0 . Так, результаты экспериментальных измерений проводимости аморфных германия и кремния в интервале температур $40 \div 400$ К описывались зависимостью

$$\sigma = CT^x \exp[-(T_0/T)^y] \quad (10.7)$$

(А. Дж. Льюис, 1976). Здесь параметры C , x и T_0 при различных y выбирались так, чтобы обеспечить наилучшее описание экспериментальных данных. Оказалось, что хорошее согласие с экспериментом может быть достигнуто в широком интервале значений y (от $y = 0,2$ до $y = 0,55$) за счет подбора x (получающиеся значения x лежат, соответственно, в интервале между $-7,5$ и $2,75$; $x = 0$ при $y \approx 0,375$). Оптимизационная процедура обработки результатов измерений проводимости аморфного германия по формуле (10.7) с $x = 0$ привела к выводу о том, что показатель y ближе к $1/2$, чем к моттовскому значению $1/4$ (И. Кубе-

лик, А. Тришка, 1972). По-видимому, в настоящее время нельзя достаточно точно определить, каким значениям x и y в (10.7) соответствуют имеющиеся экспериментальные данные*).

С другой стороны, приближения и упрощения, принятые в проведенном выше модельном расчете, не позволяют утверждать, что показатель экспоненты y должен быть точно равен $1/4$. Прежде всего, в расчете делалось предположение о медленном изменении плотности состояний в пределах эффективного слоя (9.10). Согласно (10.5)

$$E_{\max} = T (T_0/T)^{1/4}, \quad (10.8)$$

т. е. величина E_{\max} может достигать нескольких десятых эВ, поскольку $\eta_c = (T_0/T)^{1/4} \approx 30$. На таких интервалах энергии в реальных системах плотность состояний может заметно меняться. Если плотность состояний меняется по закону

$$\rho(E) = \rho_s |E - F|^s, \quad (10.9)$$

то перколяционные соображения (критерий связей) дают

$$y = \frac{s+1}{s+4}. \quad (10.10)$$

Отметим, что на температурной зависимости прыжковой проводимости может отразиться также изменение радиуса локализации с энергией.

Наконец, при рассмотрении прыжковой проводимости в аморфных материалах существенным представляется учет многофононных эффектов (§ 7). Действительно, характерные изменения энергии при перескоках — порядка ширины эффективного слоя (10.8). В типичных условиях для аморфных материалов $\bar{E} \sim E_{\max} \gg \hbar\omega_{\max}$, и многофононные процессы могут играть определяющую роль. В низкотемпературном случае для вероятности перехода справедлива формула (7.17); соответственно сохраняют силу и все выводы относительно температурной зависимости проводимости. В частности, закон Мотта получается и в этом случае.

В двумерном случае, когда локальные центры со случайными энергиями случайным образом распределены по какой-нибудь поверхности, температурный ход проводимости оказывается иным, чем в рассмотренной выше трехмерной задаче. Его по-прежнему можно найти с помощью критерия связей, замечая, однако, что критическая величина v_c зависит от размерности системы. Согласно численным расчетам, для двумерной системы

*) Hill R. M.— Phys. Stat. Sol. (a), 1976, v. 35, p. K29; Забродский А. Г.— ФТП, 1977, т. 11, с. 595.

$v_c^{(2)} \approx 4,5$. Поступая так же, как и при выводе формулы (9.11), мы получаем здесь

$$v^{(2)}(E) = \frac{\pi \rho_0^{(2)}}{3(2\gamma)^2} \eta^3 T \left(1 - \frac{|E|}{E_{\max}} \right)^2 \left(\frac{|E|}{E_{\max}} + 2 \right), \quad (10.11)$$

где $\rho_0^{(2)}$ — плотность состояний в двумерной системе (она имеет размерность $\text{эВ}^{-1} \text{см}^{-2}$). Критерий связей в формуле (9.22) дает при этом

$$\overline{v^{(2)}} = \frac{44\pi}{105} \frac{\rho_0^{(2)} T \eta^3}{(2\gamma)^2} = v_c^{(2)}. \quad (10.12)$$

Отсюда для проводимости получаем формулу (10.1), в которой

$$\eta_c = \eta_c^{(2)} = (T_0^{(2)}/T)^{1/3}, \quad (10.13)$$

$T_0^{(2)} = A^{(2)} \gamma^2 / \rho_0^{(2)}$, а $A^{(2)} = 210 v_c^{(2)} / 11\pi$. Численный расчет для двумерной системы с энергетической зависимостью темпов переходов позволяет определить значение постоянной $A^{(2)}$ и вычислить величину $v_c^{(2)}$ с помощью последнего соотношения. Сравнение полученного таким путем значения $v_c^{(2)} = 5,1 \pm 0,3$ с известным значением $v_c^{(2)} = 4,5$, по-видимому, дает представление о степени точности, на которую может претендовать критерий связей в форме (9.22).

Можно ожидать, что температурная зависимость вида (10.13) будет характеризовать проводимость по поверхностным состояниям. Подобная ситуация может реализоваться также и в трехмерном случае, коль скоро мы имеем дело с сильно дефектными неупорядоченными структурами, содержащими макроскопические дефекты (полости, каналы, трещины). Эти дефекты могут вносить значительный вклад в проводимость, если площадь внутренних поверхностей достаточно велика.

«Квазидвумерная» ситуация реализуется и в тонких пленках, толщина которых меньше характерной длины перескоков $r_h \sim \gamma^{-1} \eta_c$. Переход к температурному ходу проводимости, описываемому формулами (10.1), (10.13), при уменьшении толщины пленки действительно наблюдался в аморфных германии и кремнии (Дж. Дж. Хаузер, 1972; М. Л. Кнотек, М. Поллак, Т. М. Доннован, Х. Куртцман, 1973). Подобное изменение температурной зависимости проводимости служит серьезным указанием на прыжковый характер переноса.

Инверсионный слой на границе раздела металл — полупроводник представляет собой еще один пример двумерной системы, в которой при определенных условиях (при низких температурах и достаточном изгибе зон) проводимость осуществляется путем перескоков по локализованным состояниям, лежащим

вблизи уровня Ферми; такого рода проводимость наблюдалась, например, в системе Si—SiO₂ (Н. Ф. Мотт и др., 1975). Переход к прыжковой проводимости наблюдался также в тонких слоях *n*-GaAs, где с помощью внешнего напряжения оказалось возможным изменять толщину обедненного слоя и, соответственно, толщину проводящей области w (М. Пеппер, 1977). При этом возникает возможность наблюдения изменения температурного хода проводимости при непрерывном изменении величины w на одном и том же образце.

§ 11. Бесфононная проводимость

Полученное выше кинетическое уравнение применимо и для рассмотрения проводимости на переменном токе. Однако при достаточно большой частоте внешнего поля ω перколяционные соображения непосредственно неприменимы. Действительно, за полупериод поля электрон успевает сместиться лишь на некоторое конечное расстояние. Это означает, что здесь следует пользоваться перколяционными соображениями для конечных объемов, зависящих от частоты. При вычислении проводимости в переменном электрическом поле часто пользуются парным приближением (см. § 8). В этом приближении предполагается, что электрон за полупериод поля успевает в среднем прыгнуть не более одного раза; в противном случае следует принимать во внимание многократные перескоки с участием фононов.

Как уже отмечалось в § 1, локализация волновой функции означает невозможность движения электронов по кристаллу без изменения его энергии, что делает принципиально важным учет фононов при рассмотрении статической прыжковой проводимости по локализованным состояниям. Ситуация, однако, изменяется в переменном электрическом поле частоты ω , когда возникает возможность изменения энергии электронов за счет поглощения или испускания квантов внешнего поля $\hbar\omega$. В этом случае возникает возможность появления электрического тока в системе и без участия фононов; соответственно говорят о бесфононном вкладе в проводимость (или о бесфононной проводимости).

Относительная роль бесфононных переходов возрастает с ростом частоты. Может оказаться, что бесфононные переходы становятся доминирующими на частотах, при которых уже справедливо парное приближение. По этой причине при рассмотрении бесфононных переходов часто бывает достаточно ограничиться парным приближением.

В настоящем параграфе мы рассмотрим бесфононный вклад в проводимость, по-прежнему оставаясь в рамках одноэлектронного приближения и рассматривая материал как «жесткий»

(т. е. пренебрегая взаимодействием электронов с фононами). Последняя аппроксимация справедлива, если речь идет о проводимости на достаточно высоких частотах (понятие «достаточно высокие частоты» зависит от температуры — это частоты, превышающие частоту, при которой бесфононный вклад сравнивается с фононным вкладом, зависящим от температуры).

Бесфононные перескоки связаны с недиагональными элементами матрицы плотности, и учет их требует выхода за рамки рассматривавшегося выше диагонального приближения. Линеаризованное уравнение для недиагональных элементов неравновесной части одночастичной матрицы плотности $\delta f_{\lambda\lambda'}(t)$ в отсутствие электрон-фононного взаимодействия получается из формул (3.4), (3.7) при $V_{\lambda\lambda'}^q = 0$. Замечая, что в равновесии $f_{\lambda\lambda'} = n_F(E_\lambda) \delta_{\lambda\lambda'}$, можем привести это уравнение к виду

$$i\hbar \frac{\partial \delta f_{\lambda\lambda'}}{\partial t} + (E_\lambda - E_{\lambda'}) \delta f_{\lambda\lambda'} = (\lambda' | \mathcal{V}(t) | \lambda) [n_F(E_\lambda) - n_F(E_{\lambda'})]. \quad (11.1)$$

Потенциальную энергию электрона в действующем поле возьмем в виде

$$\mathcal{V}(t) = \mathcal{V}_0 e^{-i\omega t}. \quad (11.2)$$

Тогда решение уравнения (11.1), удовлетворяющее начальному условию

$$\delta f_{\lambda\lambda'}(t) |_{t=-\infty} = 0, \quad (11.3)$$

дается выражением

$$\begin{aligned} \delta f_{\lambda\lambda'}(t) &= -\frac{i}{\hbar} e^{-i\omega t} \int_0^\infty dt' \exp\left[\frac{i}{\hbar} (E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega) t'\right] \times \\ &\quad \times (\lambda' | \mathcal{V}_0 | \lambda) [n_F(E_\lambda) - n_F(E_{\lambda'})] = \\ &= \frac{(\lambda' | \mathcal{V}_0 | \lambda) [n_F(E_\lambda) - n_F(E_{\lambda'})]}{E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega + i\varepsilon} e^{-i\omega t}, \end{aligned} \quad (11.4)$$

где малое положительное число ε указывает правило обхода полюсов. Согласно (6.2) соотношение (11.4) можно представить как соответствующее выражение для запаздывающей двухчастичной функции Грина $K_{\lambda\lambda'\lambda_1\lambda_1'}(t)$; в отличие от § 6, нас сейчас интересуют недиагональные ее элементы с $\lambda \neq \lambda'$ (но при $\lambda = \lambda_1, \lambda' = \lambda_1'$). Именно, согласно (6.4), (11.4)

$$K_{\lambda\lambda'\lambda_1\lambda_1'}(\omega) = \frac{n_F(E_\lambda) - n_F(E_{\lambda'})}{E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega + i\varepsilon}. \quad (11.5)$$

Для локальной плотности тока на основании формулы (5.11) мы имеем

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} j(\omega) &= -\frac{e\omega}{\Omega} \sum_{\lambda\lambda'} (\lambda | x | \lambda') (\lambda' | \mathcal{Y}_0 | \lambda) \operatorname{Im} \frac{n_F(E_\lambda) - n_F(E_{\lambda'})}{E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega + i\varepsilon} = \\ &= \frac{\pi e\omega}{\Omega} \sum_{\lambda\lambda'} (\lambda | x | \lambda') (\lambda' | \mathcal{Y}_0 | \lambda) [n_F(E_\lambda) - n_F(E_{\lambda'})] \times \\ &\quad \times \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega). \end{aligned} \quad (11.6)$$

Если действующее поле считать однородным, так что $\mathcal{Y}(\mathbf{x}) = e\mathcal{E}\mathbf{x}$, то из (11.6) получается следующее выражение для бесфоновой проводимости:

$$\operatorname{Re} \sigma(\omega) = \frac{\pi e^2 \omega}{3\Omega} \sum_{\lambda\lambda'} |(\lambda | x | \lambda')|^2 [n_F(E_\lambda) - n_F(E_{\lambda'})] \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega). \quad (11.7)$$

При выводе формулы (11.7) мы приняли во внимание, что в макроскопически изотропной системе результат усреднения неизбежно должен иметь вид

$$\operatorname{Re} \sigma_{ij}(\omega) = \delta_{ij} \sigma(\omega) \quad (11.8)$$

и можно провести замену

$$(\lambda | x_i | \lambda') (\lambda' | x_j | \lambda) \rightarrow \frac{1}{3} \delta_{ij} |(\lambda | x | \lambda')|^2. \quad (11.9)$$

Выражение (11.7) можно получить и из формулы (II.13.5), замечая, что в рассматриваемом случае $k \rightarrow 0$ и $\Gamma_e^0(y', y''; y) = \delta(y' - y'') \delta(y' - y)$. При этом равенства (II.13.5) и (II.13.6) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \sigma_{ij}(\omega) &= \frac{e^2}{m\Omega} \operatorname{Re} \left\langle \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{y} \int_{-\infty}^{\infty} dy_0 e^{i\omega(x_0 - y_0)} y_j \times \right. \\ &\quad \left. \times \lim_{\substack{x' \rightarrow x \\ x_0 \rightarrow x_0}} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x'_i} \right) G_c(x, y) G_c(y, x') \right\rangle, \end{aligned} \quad (11.10)$$

где уже выполнено суммирование по спинам, так что спиновые переменные не входят в аргументы функций Грина. Фигурирующие в (11.10) причинные функции Грина удобно выразить через запаздывающие и опережающие с помощью известных формул

$$G_c(\mathbf{x}, \mathbf{y}; E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE' J(\mathbf{x}, \mathbf{y}; E') \left(\frac{1}{E' - E - i\varepsilon} + \frac{e^{-E'/T}}{E' - E + i\varepsilon} \right), \quad (11.11)$$

$$J(\mathbf{x}, \mathbf{y}; E') = \frac{G_r(\mathbf{x}, \mathbf{y}; E' + i\varepsilon) - G_a(\mathbf{x}, \mathbf{y}; E' - i\varepsilon)}{i(1 + e^{-\beta E'})}. \quad (11.12)$$

Здесь $G_c(x, y; E)$ — фурье-образ G_c по времени $x_0 - y_0$, взятый на частоте E/\hbar , $\varepsilon \rightarrow +0$; в рассматриваемой задаче функция G_c дается выражением (I.6.9), а для G_a справедлива та же формула с заменой $E + i\varepsilon$ на $E - i\varepsilon$. Отсюда с учетом соотношения

$$\frac{\hbar}{i} (\lambda | v_i | \lambda') = (E_\lambda - E_{\lambda'}) (\lambda | x_i | \lambda') \quad (11.13)$$

мы вновь приходим к формуле (11.7) для проводимости.

В области сравнительно низких частот, когда

$$\hbar\omega \ll T, \quad (11.14)$$

разность функций Ферми в (11.7) можно переписать в виде

$$(E_\lambda - E_{\lambda'}) \frac{\partial n_F(E_\lambda)}{\partial E_\lambda}.$$

Переходя теперь к интегрированию в формуле (11.7), находим

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma(\omega) = & \frac{\pi \hbar e^2 \omega^2}{3\Omega} \int d\mathbf{R} d\mathbf{R}' dE dE' \delta(E - E' + \hbar\omega) \left(-\frac{\partial n_F(E)}{\partial E} \right) \times \\ & \times \rho(E) \rho(E') \Psi(E, E'; |\mathbf{R} - \mathbf{R}'|) |(\lambda | \mathbf{x} | \lambda')|^2. \end{aligned} \quad (11.15)$$

Согласно (III.3.4) в качестве $\rho(E)$ здесь выступает сглаженная плотность состояний (§ II.1). Формула (11.15) справедлива и в области делокализованных состояний; при этом, однако, удобнее перейти от матричных элементов координаты к матричным элементам скорости с помощью соотношения (11.13), поскольку в случае делокализованных состояний матричные элементы координаты сингулярны. Если, например, речь идет о поведении носителей заряда в идеальном кристалле, то $\psi_\lambda(x)$ суть функции Блоха. Правая часть (11.15) при этом расходится при $\omega \rightarrow 0$, как и должно быть: конечное значение статической проводимости идеального кристалла возникает только за счет процессов рассеяния.

В неупорядоченных полупроводниках в области делокализованных состояний матричные элементы скорости оказываются конечными при любых $E - E'$ (в том числе и при $E = E'$). Соответственно статическая электропроводность здесь оказывается отличной от нуля, причем

$$\sigma(0) \sim \rho^2(F). \quad (11.16)$$

В области локализованных состояний матричные элементы координаты конечны при $\lambda = \lambda'$, а матричные элементы скорости обращаются в нуль при $E_\lambda \rightarrow E_{\lambda'}$. Ограничимся областью не слишком высоких частот (11.14) и низких температур, когда

$T \ll F, \bar{E}$, где \bar{E} — характерная энергия, определяющая изменение подинтегрального выражения. Тогда

$$\frac{\partial n_F(E)}{\partial E} = -\delta(E - F), \quad (11.17)$$

и мы получаем [37]

$$\operatorname{Re} \sigma(\omega) \approx \frac{\pi \hbar e^2 \omega^2}{3\Omega} \rho^2(F) \int d\mathbf{R} d\mathbf{R}' \Psi(F, F + \hbar\omega; |\mathbf{R} - \mathbf{R}'|) \times \\ \times |(F, \mathbf{R} | \mathbf{x} | F + \hbar\omega, \mathbf{R}')|^2. \quad (11.18)$$

Матричные элементы координат, фигурирующие в формуле (11.18), зависят от разности энергий начального и конечного состояний, т. е. от частоты ω . При $\omega \rightarrow 0$ эти матричные элементы либо остаются конечными, либо обращаются в нуль — в зависимости от модели системы. То же относится и к функции корреляции Ψ (см. § III.3). Таким образом, как и следовало ожидать, статическая проводимость системы при $T = 0$ обращается в нуль, если уровень Ферми попадает в область локализованных состояний.

Заметим, что если ограничиться только состояниями дискретного спектра, то правая часть (11.18) обращается в нуль при $\omega \rightarrow 0$ при любой температуре. Это, однако, означает лишь, что, как уже отмечалось, в рассматриваемой задаче необходимо учитывать влияние теплового движения атомов вещества на поведение носителей заряда. Учет взаимодействия с фононами дает при $T \neq 0$ отличное от нуля значение статической проводимости.

Для монохроматической электромагнитной волны конкурентоспособными могут оказаться переходы с поглощением или испусканием одновременно как квантов внешнего поля, так и фононов (фотон-фононные переходы, В. В. Вьюрков, В. И. Рыжий, 1977; И. П. Звягин, 1978). Действительно, в этом процессе, в отличие от бесфононных переходов, не требуется выполнения «условия резонанса». Фотопроводимость, связанная с такими переходами, наблюдалась в сильно компенсированном n -InSb при низких температурах (Е. М. Гершензон, В. А. Ильин, Л. В. Литвак-Горская, С. Р. Филонович, 1977).

§ 12. Температурная зависимость прыжковой термоэдс

В случае проводимости по делокализованным состояниям из обычного кинетического уравнения в изотропной системе для проводимости и термоэдс получаются известные выражения:

$$\sigma = \int dE \sigma(E) \left(-\frac{dn_F(E)}{dE} \right) \quad (12.1)$$

и

$$\alpha = -\frac{1}{e\sigma} \int dE \sigma(E) \frac{E - F}{T} \left(-\frac{dn_F(E)}{dE} \right). \quad (12.2)$$

Здесь величина $\sigma(E)$ связана с плотностью состояний и с временем релаксации $\tau(E)$ соотношением

$$\sigma(E) = \frac{e^2 T}{m} \rho(E) \tau(E). \quad (12.3)$$

Величину $\sigma(E)$, имеющую размерность $[\sigma]$, можно рассматривать как «проводимость, отвечающую энергии E ». Соответственно можно определить и «подвижность, зависящую от энергии»:

$$\mu(E) = \frac{e}{m} \tau(E). \quad (12.4)$$

Выражения (12.1) — (12.4) имеют ясный смысл в случае зонной проводимости и квазиупругого рассеяния носителей заряда. Формально эти выражения можно рассматривать как общие, справедливые, в частности, и для прыжковой проводимости по локализованным состояниям. Однако при этом требует уточнения смысл функций $\mu(E)$, $\tau(E)$ и $\sigma(E)$, которые уже нельзя просто интерпретировать как соответствующие характеристики, отвечающие определенной энергии. Это связано с тем, что перепоки с участием фононов сопровождаются существенными (на величины порядка $\eta_c T$) изменениями энергии электрона. Соответственно более последовательным представляется подход, непосредственно исходящий из кинетического уравнения для локализованных электронов, записанного с учетом возможного наличия градиента температуры [37, 42].

Для отыскания термоэдс системы нужно найти плотность тока (5.12), возникающего в системе при одновременном действии внешнего электрического поля и градиента температуры, когда парциальные потоки $i_{\lambda\lambda'}$ (см. (4.14)) появляются под действием разностей обобщенных потенциалов (4.22). Парциальные потоки, возникающие под действием градиента температуры, вообще говоря, отличаются от создаваемых только электрическим полем. Это различие обусловлено множителями $(E_\lambda - F) R_\lambda - (E_{\lambda'} - F) R_{\lambda'}$, появляющимися перед темпами переходов $\Gamma_{\lambda\lambda'}$ (см. (4.22)). Мы увидим, однако, что в рамках перколяционного подхода учет указанных множителей не требует явного вычисления предэкспоненциального множителя в формуле для проводимости. Для того чтобы учесть их, следует лишь несколько детализировать соображения § 8.

Заметим, что, с принятой нами логарифмической точностью, изменение предэкспоненциальных множителей не сказывается на определении связей (§ 9); соответственно оптимальные пути протекания и трехмерная сетка связей оказываются одними и теми же в обоих случаях — когда потоки вызваны приложенным электрическим полем и когда они вызваны градиентом температуры.

В системе с экспоненциально большим разбросом темпов переходов естественно предположить, что полные сопротивления различных цепочек связей, соединяющих некоторую пару центров, будут очень сильно различаться, коль скоро расстояние между этими центрами не слишком велико. Соответственно бесконечный кластер или трехмерную сетку связей можно считать состоящими из отдельных неразветвленных цепочек — макросвязей, длина которых намного превосходит длину перескока; мы приходим тогда к модели одножильной сетки сопротивлений (А. С. Скал, Б. И. Шкловский, 1974; П. Г. Де Женн, 1976). В рамках этой модели принимается, что значительная доля связей принадлежит «мертвым концам», навешенным на скелетную сетку макросвязей. Пусть L_{c0} есть характерное расстояние между узлами скелетной сетки; именно это расстояние и определяет в данной задаче значение корреляционного радиуса, на котором коррелированы флуктуации чисел заполнения узлов δf_{λ} . Ясно, что переход к макроскопическому описанию системы возможен лишь для масштабов, превосходящих L_{c0} , когда можно ввести представление о физически малом объеме, в котором можно пренебречь флуктуациями термодинамических величин (сравните с § 4).

В соответствии со сказанным выше, рассмотрим перенос вдоль простой неразветвленной цепочки связей (макросвязи) длины l (порядка L_{c0}) при наличии как разности электрохимических потенциалов, так и разности температур между ее концами. Согласно закону Кирхгофа (4.15) для этого случая парциальные потоки вдоль цепочки — одни и те же между любыми парами соседних узлов, т. е.

$$i_{\lambda\lambda'} = \Gamma_{\lambda\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^* = i_s = \text{const} \quad (12.5)$$

для любых соседних узлов вдоль цепочки.

Пусть U_i^* есть разность обобщенных потенциалов между концами рассматриваемой цепочки, которые отстоят друг от друга на расстояние l в направлении приложенных поля и градиента температуры. Обозначая символом $\sum'_{\lambda\lambda'}$ суммирование по последовательности соседних звеньев цепочки, можем записать

$$\begin{aligned} U_i^* &= U + [(E_{s1} - F) \mathbf{R}_{s1} - (E_{s2} - F) \mathbf{R}_{s2}] \nabla \ln T = \\ &= \sum'_{\lambda\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^* = \sum'_{\lambda\lambda'} \Gamma_{\lambda\lambda'}^{-1} (\Gamma_{\lambda\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^*) = i_s \sum'_{\lambda\lambda'} \Gamma_{\lambda\lambda'}^{-1}. \end{aligned} \quad (12.6)$$

Здесь E_{s1} и E_{s2} , \mathbf{R}_{s1} и \mathbf{R}_{s2} — энергии и координаты центров, находящихся в концах цепочки, а величина $\sum'_{\lambda\lambda'} \Gamma_{\lambda\lambda'}^{-1}$ пропорцио-

нальна сопротивлению рассматриваемой цепочки. Из формулы (12.6) находим

$$i_s = \left(\frac{1}{l} \sum'_{\lambda\lambda'} \Gamma_{\lambda\lambda'}^{-1} \right)^{-1} (U/l - (E_{s2} - F) d \ln T/dx), \quad (12.7)$$

поскольку без ограничения общности можно положить $x_{s1} \approx 0$, $x_{s2} \approx l$.

Поток электронов через некоторую заданную плоскость, перпендикулярную оси Ox , определяется суммарным вкладом всех цепочек, ее пересекающих. Плотность тока вдоль цепочки, согласно (12.7), зависит от энергий граничных центров; очевидно, корреляцией между энергиями центров, находящихся на противоположных концах цепочек, можно пренебречь, и потоки определяются соответствующими усредненными величинами:

$$j = -en_s \langle i_s \rangle. \quad (12.8)$$

Здесь $n_s \approx l^{-2}$ — поверхностная плотность цепочек, а усреднение проводится с весовой функцией $\mathcal{P}(E_s)$ — плотностью вероятности того, что центр с энергией E_s принадлежит одной из цепочек эффективной «скелетной» подсетки, получаемой из сетки связей отбрасыванием «мертвых концов»:

$$\langle i_s \rangle = \int dE_s \mathcal{P}(E_s) i_s. \quad (12.9)$$

Таким образом, для проводимости имеем

$$\sigma = n_s e^2 \int dE_s \mathcal{P}(E_s) \left(\frac{1}{l} \sum'_{\lambda\lambda'} \Gamma_{\lambda\lambda'}^{-1} \right)^{-1}. \quad (12.10)$$

Выражение (12.10) совпадает с (12.1), если отождествить $e^2 \mathcal{P}(E_s) \left(\frac{1}{l} \sum'_{\lambda\lambda'} \Gamma_{\lambda\lambda'}^{-1} \right)^{-1}$ с функцией $\sigma(E_s)$ ($-dn_F(E_s)/dE_s$). Однако введенная так функция $\sigma(E_s)$ не имеет такого простого смысла, как раньше. Действительно, величина $e^2 \left(\frac{1}{l} \sum'_{\lambda\lambda'} \Gamma_{\lambda\lambda'}^{-1} \right)^{-1}$ практически не зависит от энергии E_s , поскольку энергии различных центров цепочки независимы, а от E_s зависит лишь один из членов рассматриваемой суммы. Таким образом, проводимость пропорциональна усредненному по эффективному слою энергий темпу переходов.

Выражение для термоэдс можно получить непосредственно из (12.7), (12.8), если положить $j = 0$. Мы имеем для

электронов

$$\alpha = -\frac{1}{e} \frac{\left\langle \left(\frac{1}{T} \sum'_{\lambda\lambda'} \Gamma_{\lambda\lambda'}^{-1} \right)^{-1} (E_s - F) \right\rangle}{T \left\langle \left(\frac{1}{T} \sum'_{\lambda\lambda'} \Gamma_{\lambda\lambda'}^{-1} \right)^{-1} \right\rangle} = -\frac{1}{e} \frac{\langle E_s - F \rangle}{T}. \quad (12.11)$$

Последнее равенство непосредственно вытекает из обсуждавшегося выше свойства практической независимости величины $\frac{1}{T} \sum'_{\lambda\lambda'} \Gamma_{\lambda\lambda'}^{-1}$ от энергии граничного центра.

Отыскание плотности вероятности $\mathcal{P}(E)$, строго говоря, требует исследования топологии бесконечного кластера связей. Однако, как и раньше (§ 9), можно предположить, что функция $\mathcal{P}(E) \sim \rho(E) \nu(E - F)$, где $\nu(E - F)$ — число связей, образуемых центром с энергией E . При таком предположении выражение для термоэдс (12.11) можно записать в виде

$$\alpha = -\frac{1}{e} \frac{\int dE \rho(E) (E - F) \nu(E - F)}{T \int dE \rho(E) \nu(E - F)}. \quad (12.12)$$

Заметим, что хотя результат (12.11), (12.12) и не содержит экспоненты, он, как и соответствующий результат для проводимости, справедлив лишь с логарифмической точностью. Действительно, при выводе равенства (12.12) мы, как и в § 9, пренебрегли парциальными потоками между центрами, вероятность прыжка между которыми меньше некоторого заданного значения.

Выражение для термоэдс в виде (12.12) уже допускает непосредственную количественную оценку, если сделать те или иные предположения о плотности состояний. Из формулы (12.12) видно, что при $\rho(E) = \text{const}$ (при этом $\nu(E) = \nu(-E)$) термоэдс обращается в нуль — отличие α от нуля связано с асимметрией плотности состояний относительно уровня Ферми. Модель с $\rho(E) = \text{const}$, будучи достаточной для получения закона Мотта, оказывается недостаточной для описания термоэдс. Положим поэтому

$$\rho(E) = \rho(F) \left[1 + \frac{d \ln \rho(F)}{dF} (E - F) + \dots \right]. \quad (12.13)$$

Точками обозначены здесь слагаемые высшего порядка по $(E - F)$. Ими можно пренебречь, коль скоро плотность состояний медленно меняется в пределах эффективного слоя энергий $|E - F| < E_{\text{max}} = \eta_c T$. Число связей $\nu(E)$, вычисляемое с уче-

том изменения $\rho(E)$, оказывается уже не вполне симметричной функцией E :

$$v(E) = v_+(E) \left[1 + \frac{1}{2} \frac{d \ln \rho(F)}{dF} E + \dots \right]. \quad (12.14)$$

Здесь в качестве $v_+(E)$ надо взять выражение (9.11), зависящее только от $|E|$. Подставляя (12.13) и (12.14) в (12.12), находим, что при достаточно медленном изменении плотности состояний

$$\alpha = - \frac{1}{e} \frac{\xi E_{\max}^2}{TE} = - \frac{1}{e} \xi \frac{(T_0 T)^{1/2}}{\bar{E}}. \quad (12.15)$$

Здесь $\bar{E} = (d \ln \rho(F)/dF)^{-1}$ есть характерная энергия, на которой заметно меняется плотность состояний, T_0 — параметр (10.5'), а постоянная ξ дается выражением

$$\xi = \frac{3}{2} \frac{\int dE (E/E_{\max})^2 v_+(E)}{\int dE v_+(E)}. \quad (12.16)$$

По смыслу вывода формула (12.15) справедлива, когда $\bar{E} \gg \eta_c T$.

Результат (12.15) отличается от получаемого из формулы (12.12) в вырожденном случае, когда $\alpha \sim T$. Термоэдс, определяемая формулой (12.15), пропорциональна $T^{1/2}$, поскольку ширина активного слоя энергий пропорциональна $E_{\max} = T_0^{1/4} T^{3/4}$. Величина термоэдс также оказывается аномально большой по сравнению с результатом, вытекающим из (12.2) для вырожденного газа делокализованных носителей заряда — появляется «фактор усиления» $\xi (T_0/T)^{1/2}$, связанный с увеличением ширины активного слоя. Величина этого фактора может быть весьма велика (порядка 10^2).

Экспериментальные измерения термоэдс аморфных Ge и Si показали, однако, что при понижении температуры термоэдс становится почти постоянной, а величина ее — порядка $1/e$, причем проводимость в той же области температур следует (с обычной точностью, см. § 10) закону Мотта. Подобный ход термоэдс не согласуется ни с соотношением (12.15), ни с зависимостями, получающимися при некоторых других специальных предположениях о ходе плотности состояний вблизи уровня Ферми (А. Дж. Льюис, 1976).

Прыжковая термоэдс, не зависящая от температуры, получается, если принять, что вблизи уровня Ферми $\rho(E) \approx \approx \rho_1 (E - F)^2 + \rho_2 (E - F)^3$. Здесь ρ_1 и ρ_2 — некоторые коэффициенты, причем $\rho_2 \ll \rho_1$. При этом для проводимости получается зависимость (10.7) с $y = 1/2$. Однако какие-либо указания на то, что в широком интервале энергий плотность состояний ведет себя указанным выше образом, отсутствуют.

Следует отметить, что в области, где для проводимости выполняется закон Мотта, в рамках рассматриваемой модели может быть получено существенно более медленное изменение термоэдс, если плотность состояний меняется достаточно быстро в пределах эффективного слоя энергий (И. П. Звягин, 1978). Именно, выражение (12.11) можно переписать в виде

$$\alpha = -\frac{1}{e} \frac{E_{\max}}{T} \frac{\int_0^1 dx x f_-(x)}{\int_0^1 dx f_+(x)}, \quad (12.12')$$

где

$$f_{\pm}(x) = \frac{1}{2} [\mathcal{P}(F + xE_{\max}) \pm \mathcal{P}(F - xE_{\max})].$$

Если асимметрия функции $\rho(E)$ (и $\mathcal{P}(E)$) велика и плотность состояний не имеет резких пиков, то отношение интегралов в правой части (12.12') практически не зависит от температуры. Так, в предельном случае ступенчатого изменения плотности состояний $\rho(E) = \rho_0 \theta(E - F)$ непосредственный расчет дает

$$\alpha = \frac{\xi_1}{e} \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/4} \quad (12.17)$$

с $\xi_1 = 1/4$. Зависимость (12.17) справедлива в области более высоких температур, когда ширина активного слоя достаточно велика, так что изменение $\rho(E)$ в нем нельзя считать малым. При понижении температуры зависимость (12.17) сменяется более сильной, (12.15). Это происходит при температуре порядка

$$T_1 = \left(\frac{\xi_1}{\xi} \frac{\bar{E}}{T_0^{1/4}} \right)^{4/3}. \quad (12.18)$$

Можно ожидать, что в области температур $T \sim T_1$ зависимость $\alpha(T)$ будет промежуточной между (12.15) и (12.17). Таким образом, коль скоро существенна асимметрия плотности состояний, термоэдс может меняться значительно медленнее, чем по закону (12.15). Согласно (12.17) величина ее может заметно превышать $1/e$ из-за множителя $\xi_1(T_0/T)^{1/4}$.

При еще более низких температурах, когда величина α , даваемая формулой (12.15), становится малой, термоэдс может определяться уже не асимметрией плотности состояний $\rho(E)$, а видом функции заполнения локальных уровней. Соответствующий вклад в термоэдс, который по величине порядка $1/e$, не зависит от температуры.

Таким образом, изложенная выше теория прыжковой термоэдс в настоящее время не дает еще полного описания экспериментальных данных по температурной зависимости α в области применимости закона Мотта. Причины указанных выше расхождений (в частности, малая величина наблюдаемой термоэдс) не вполне ясны. Более детальный анализ должен, по-видимому, опираться на дополнительные сведения о виде плотности состояний, к которому весьма чувствительна термоэдс (в существенно большей степени, чем проводимость).

В случае, когда проводимость меняется по закону

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\epsilon/T} \quad (12.19)$$

с постоянной энергией активации, температурная зависимость термоэдс имеет хорошо известный вид*):

$$\alpha = -\frac{1}{e} \frac{\epsilon}{T} + A, \quad (12.20)$$

где так называемый кинетический член A не зависит от температуры. Если имеются две температурные области, отвечающие разным ϵ , то в переходной области зависимость $\alpha(T)$ отличается от (12.20).

В частности, возрастание ϵ при возрастании температуры может привести к появлению участка, где α практически не зависит от температуры (рис. 15). Это, по-видимому, имеет место в аморфном мышьяке (Э. Митилену, Э. А. Дэвис, 1977).

§ 13*. Кинетическое уравнение при учете электрон-электронного взаимодействия

При построении теории явлений переноса по локализованным состояниям учет электрон-электронного взаимодействия может оказаться существенным. Дело в том, что перераспределение локализованных носителей вызывает изменение действующего

*) Формула для термоэдс, обусловленной дырочным механизмом, получается из (12.20) заменой $e \rightarrow -e$.

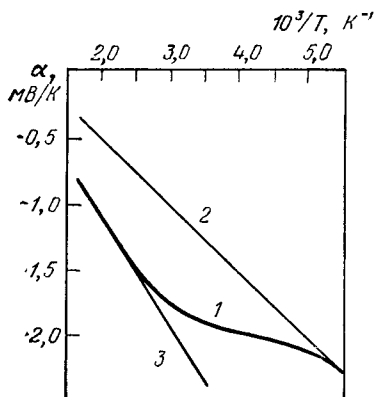


Рис. 15. Температурная зависимость термоэдс в области, отвечающей смене механизма проводимости. Теоретическая кривая 1 хорошо описывает экспериментально наблюдаемое изменение термоэдс аморфного мышьяка в области 300 — 450 К. 2 и 3 — асимптотические прямые, отвечающие механизмам с разными энергиями активации (0,50 эВ и 0,81 эВ).

поля, которое может сильно флуктуировать от точки к точке в зависимости от распределения локальных центров и их заполнения.

Рассмотрим, как изменится проведенный в § 3 вывод кинетического уравнения, если в гамильтониане учесть слагаемое (2.11). В области локализованных состояний его можно приближенно записать в виде (II.16.1')

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda\lambda'} V(\lambda, \lambda') a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda'}^{\dagger} a_{\lambda} a_{\lambda'} \quad (13.1)$$

Здесь, как и прежде, индекс λ включает в себя номер локального центра и спиновый индекс: $\lambda = \{m, \sigma\}$, а величина $V(\lambda, \lambda')$ определяется формулой (2.12) при попарно совпадающих индексах: $\lambda = \lambda_1$, $\lambda' = \lambda'_1$. Как и в § II.16, величину $V(\lambda, \lambda)$ можно положить равной нулю; в то же время сумма в (13.1) содержит члены с одним и тем же значением m , но с различными σ ($\lambda = \{m, \sigma\}$, $\lambda' = \{m, \sigma'\}$, $\sigma' = -\sigma$), отвечающие попаданию двух электронов с противоположными спинами на один и тот же центр. Величина

$$V(m, \sigma; m, -\sigma) \equiv V_m \quad (13.2)$$

отвечает энергии взаимодействия двух электронов с противоположными спинами, находящихся на одном и том же центре локализации. Напомним (§ II.14), что эффективная энергия взаимодействия электронов на одном центре может быть как положительной ($V_m > 0$), что отвечает преобладанию кулоновского отталкивания электронов, так и отрицательной ($V_m < 0$), что соответствует преобладанию притяжения.

Учет слагаемого (13.1) в гамильтониане не изменяет уравнения (3.10), но приводит к появлению члена

$$\sum_{\lambda_2} \{V(\lambda, \lambda_2) - V(\lambda_1, \lambda_2)\} \langle a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda_2}^{\dagger} a_{\lambda_2} a_{\lambda} \beta_q^{(j)} \rangle \quad (13.3)$$

в правой части уравнения (3.8). Простейшее приближение состоит в том, чтобы расцепить среднее в (13.3) по стандартному рецепту § 3:

$$\langle a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda_2}^{\dagger} a_{\lambda_2} a_{\lambda} \beta_q^{(j)} \rangle \approx (f_{\lambda_2} - \delta_{\lambda\lambda_2} f_{\lambda} - \delta_{\lambda_1\lambda_2} f_{\lambda_1}) \langle a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \beta_q^{(j)} \rangle + \delta_{\lambda\lambda_1} f_{\lambda} \langle a_{\lambda_2}^{\dagger} a_{\lambda_2} \beta_q^{(j)} \rangle. \quad (13.4)$$

Подставляя (13.4) в (13.3), получаем

$$\left\{ \sum_{\substack{\lambda_2 \\ (\lambda_2 \neq \lambda_1)}} V(\lambda, \lambda_2) f_{\lambda_2} - \sum_{\substack{\lambda_2 \\ (\lambda_2 \neq \lambda)}} V(\lambda_1, \lambda_2) f_{\lambda_2} \right\} \langle a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \beta_q^{(j)} \rangle. \quad (13.5)$$

Члены (13.5), появляющиеся в уравнении (3.8), можно объединить с энергиями E_λ , E_{λ_1} , вводя перенормированные энергии

$$\tilde{E}_\lambda^{(\lambda_1)} = E_\lambda + \sum_{\substack{\lambda_2 \\ (\lambda_2 \neq \lambda_1)}} V(\lambda, \lambda_2) f_{\lambda_2}. \quad (13.6)$$

При рассмотрении некоторой пары состояний λ , λ_1 , между которыми происходит переход, перенормированные энергии (13.6) представляют собой уровни энергии, сдвинутые за счет полей, созданных носителями, локализованными в остальных состояниях. Нетрудно показать, что самосогласованные энергии, возникающие при аналогичном расщеплении одночастичной функции Грина, равны

$$E_\lambda^* = E_\lambda + \sum_{\lambda_2} V(\lambda, \lambda_2) f_{\lambda_2} \quad (13.7)$$

(это совпадает с определениями (II.16.6) при $T = 0$). Энергия $\tilde{E}_\lambda^{(\lambda_1)}$ из (13.6) отличается от E_λ^* из (13.7) на величину

$$\tilde{E}_\lambda^{(\lambda_1)} - E_\lambda^* = -V(\lambda, \lambda_1) f_{\lambda_1} \quad (13.8)$$

(см. Приложение VII). Это различие обусловлено тем, что в кинетике мы имеем дело с разностью энергий двух элементарных возбуждений. Заметим, что в кинетическом уравнении с перенормированными энергиями (13.6) частично учтены корреляционные эффекты. Именно, в нем уже принято во внимание, что среди двух центров, между которыми происходит переход, один (с которого уходит электрон) должен обязательно быть занят, а второй (на который электрон переходит) — пуст. По этой причине перенормированные энергии, появляющиеся при описании кинетики переходов между парой центров, не содержат функций заполнения самих рассматриваемых центров. Заметим, однако, что это обстоятельство несущественно, если переход происходит на «далекий» центр, так что член $V(\lambda, \lambda_1)$ в сумме в (13.7) мал. При этом изменение энергии при перескоке приблизительно определяется разностью энергий (13.7).

Если проделать в уравнении (3.8) замену $E_\lambda \rightarrow \tilde{E}_\lambda^{(\lambda_1)}$, $E_{\lambda_1} \rightarrow \tilde{E}_{\lambda_1}^{(\lambda)}$, то дальнейшие выкладки, приводящие к кинетическому уравнению (3.18), ничем не отличаются от соответствующих преобразований § 3. Кинетическое уравнение имеет тот же вид, однако вероятность перехода содержит перенормированные энергии (13.6).

Заметим, что получающееся таким образом уравнение сложнее, чем в отсутствие межэлектронного взаимодействия: энергии здесь зависят от функции заполнения узлов, а плотность состояний $\rho(E^*)$, вообще говоря, отличается от вычисленной без учета межэлектронного взаимодействия.

Ситуация, однако, заметно облегчается в линейном по внешнему полю приближении. Именно, согласно (13.7) линейные сдвиги энергии, связанные с изменениями чисел заполнения δf_λ , равны

$$\delta E_\lambda^* = \sum_{\lambda_2} \tilde{V}(\lambda, \lambda_2) \delta f_{\lambda_2}. \quad (13.9)$$

В пренебрежении разностью $\tilde{E}_\lambda^{(\lambda_1)} - E_\lambda^*$ мы получаем, что они входят в линеаризованное кинетическое уравнение так же, как и классические сдвиги уровней \mathcal{V}_λ (см. (4.2)), обусловленные внешним полем. Наличие сдвигов (13.9) можно принять во внимание, если под \mathcal{V}_λ в (4.12) понимать полные сдвиги уровней $\mathcal{V}_\lambda + \delta E_\lambda^*$, вызванные как непосредственно самим внешним полем, так и наведенным им перераспределением зарядов по локальным центрам. Поскольку обобщенные потенциалы в узлах U_λ , в которые лишь и входят \mathcal{V}_λ , сами подлежат определению в процессе решения кинетического уравнения, включение электрон-электронного взаимодействия при использовании простейшего расщепления (3.11) сказывается на вычислении проводимости в слабом поле лишь через изменение плотности состояний.

При учете различия между \tilde{E}_λ и E_λ^* изложенная выше процедура, основанная на расщеплении (3.11), представляется не вполне последовательной. Действительно, в определении энергий (13.6) динамическая корреляция между электронами частично учтена. Однако при более последовательной трактовке эффекты, относящиеся к выделенной паре состояний, надо было бы описывать точно. При этом уже нельзя расцеплять операторы, относящиеся к выделенным состояниям, как это делается в (3.11). Соответственно в правую часть (3.18) вместо $f_\lambda(1 - f_{\lambda'})$ будут входить функции $\langle a_\lambda^+ a_{\lambda\lambda'} a_{\lambda'}^+ \rangle$, отвечающие вероятности реализации такой ситуации, когда состояние λ заполнено, а состояние λ' пусто. Уравнение (3.18) при этом уже не замкнуто, следует дополнить его уравнением для функции $\langle a_\lambda^+ a_{\lambda\lambda'} a_{\lambda'}^+ \rangle$ и т. д. Мы рассмотрим подробнее возникающую ситуацию для частного случая модели Хаббарда, в рамках которой удастся последовательно принять во внимание динамическую корреляцию между электронами, попадающими на один и тот же локальный центр (И. П. Звягин, 1977; Х. Окамото, И. Хамакава, 1977).

Модели Хаббарда отвечает аппроксимация

$$V(\lambda, \lambda') = V \delta_{mn} \delta_{\sigma, -\sigma'}. \quad (13.10)$$

Тем самым в гамильтониане (13.1) отбрасывается взаимодействие электронов разных центров и, кроме того, энергия взаимодействия электронов на одном центре V_m считается не зависящей от номера узла m . Последнее предположение — того же

типа, что и обычно используемое в теории прыжковой проводимости предположение о постоянстве радиуса локализации γ (§ 8). Действительно, энергия взаимодействия локализованных в некоторой области электронов непосредственно связана с размерами области локализации.

При учете взаимодействия (13.10) состояние системы и ее энергия определяются не только средними числами заполнения f_λ , но зависят и от того, каковы соотношения между числами пустых, одно- и двукратно заполненных центров. Поэтому, наряду со средними числами заполнения узлов

$$f_m = \sum_{\sigma} f_{m\sigma} = \sum_{\sigma} \langle \hat{n}_{m\sigma} \rangle \quad (13.11)$$

($\hat{n}_{m\sigma} = a_{m\sigma}^+ a_{m\sigma}$), удобно ввести следующие функции:

а) вероятность того, что состояние $\{m\sigma\}$ заполнено, причем состояние $\{m, -\sigma\}$ пусто (центр заполнен однократно):

$$f_{m\sigma}^{(s)} = \langle \hat{n}_{m\sigma} (1 - \hat{n}_{m, -\sigma}) \rangle; \quad (13.12)$$

б) вероятность того, что центр m заполнен двукратно:

$$f_m^{(d)} = \langle \hat{n}_{m\sigma} \hat{n}_{m, -\sigma} \rangle; \quad (13.13)$$

в) вероятность того, что центр m пуст:

$$f_m^{(e)} = \langle (1 - \hat{n}_{m\sigma})(1 - \hat{n}_{m, -\sigma}) \rangle. \quad (13.14)$$

Функции (13.11) — (13.14) связаны между собой соотношениями

$$\begin{aligned} f_m^{(e)} &= 1 - f_m^{(s)} - f_{m, -\sigma}^{(s)} - f_m^{(d)}, \\ f_{m\sigma} &= f_{m\sigma}^{(s)} + f_m^{(d)}, \quad f_m = f_{m\sigma}^{(s)} + f_{m, -\sigma}^{(s)} + 2f_m^{(d)}. \end{aligned} \quad (13.15)$$

Таким образом, из всех введенных выше функций ($f_m, f_{m\sigma}, f_{m, -\sigma}, f_{m\sigma}^{(s)}, f_{m, -\sigma}^{(s)}, f_m^{(d)}, f_m^{(e)}$) независимы три (с учетом соотношений (13.11), (13.15)). Мы рассмотрим уравнения для функций $f_{m\sigma}^{(s)}$ (с двумя значениями σ) и $f_m^{(d)}$. В частном случае, когда энергии состояний не зависят от спина (магнитного поля нет), $f_{m\sigma}^{(s)} = f_{m, -\sigma}^{(s)}$ и число независимых уравнений сводится к двум.

Для вывода системы кинетических уравнений воспользуемся тем же методом, что и в § 3. Запишем уравнения движения для функций $f_{m\sigma}^{(s)}$ и $f_m^{(d)}$:

$$\frac{\partial f_{m\sigma}^{(s)}}{\partial t} = \frac{2}{\hbar} \text{Im} \sum_{nql} B_{nm}^q \left(\langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} (1 - \hat{n}_{m, -\sigma}) \beta_q^{(j)} \rangle - \langle \hat{n}_{m\sigma} a_{m, -\sigma}^+ a_{n, -\sigma} \beta_q^{(j)} \rangle \right), \quad (13.16a)$$

$$\frac{\partial f_m^{(d)}}{\partial t} = \frac{2}{\hbar} \text{Im} \sum_{nqj\sigma} B_{nm}^q \langle \hat{n}_{m\sigma} a_{m, -\sigma}^+ a_{n, -\sigma} \beta_q^{(j)} \rangle. \quad (13.16b)$$

Для функций $\langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} (1 - \hat{n}_{m, -\sigma}) \beta_q^{(j)} \rangle$ имеем

$$\begin{aligned} & \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + E_{m\sigma} - E_{n\sigma} + (-1)^j \hbar \omega_q \right\} \langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} (1 - \hat{n}_{m, -\sigma}) \beta_q^{(j)} \rangle - \\ & - V \langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} \hat{n}_{n, -\sigma} (1 - \hat{n}_{m, -\sigma}) \beta_q^{(j)} \rangle = \\ & = \sum_{klq'j'\sigma'} B_{kl}^{q'} \left(\langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} (1 - \hat{n}_{m, -\sigma}) a_{l\sigma'}^+ a_{k\sigma'} \beta_q^{(j)} \beta_{q'}^{(j')} \rangle - \right. \\ & \left. - \langle a_{l\sigma'}^+ a_{k\sigma'} a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} (1 - \hat{n}_{m, -\sigma}) \beta_{q'}^{(j')} \beta_q^{(j)} \rangle \right). \end{aligned} \quad (13.17)$$

Аналогичное уравнение можно записать и для функции $\langle \hat{n}_{m\sigma} a_{m, -\sigma}^+ a_{n, -\sigma} \beta_q^{(j)} \rangle$.

В левую часть (13.17) входит функция $\langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} \hat{n}_{n, -\sigma} \times \times (1 - \hat{n}_{m, -\sigma}) \beta_q^{(j)} \rangle$, уравнение для которой имеет вид

$$\begin{aligned} & \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + E_{m\sigma} - E_{n\sigma} + (-1)^j \hbar \omega_q + V \right) \langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} \hat{n}_{n, -\sigma} (1 - \hat{n}_{m, -\sigma}) \beta_q^{(j)} \rangle = \\ & = \sum_{klq'j'\sigma'} B_{kl}^{q'} \left(\langle a_{l\sigma'}^+ a_{k\sigma'} a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} \hat{n}_{n, -\sigma} (1 - \hat{n}_{m, -\sigma}) \beta_{q'}^{(j')} \beta_q^{(j)} \rangle - \right. \\ & \left. - \langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} \hat{n}_{n, -\sigma} (1 - \hat{n}_{m, -\sigma}) a_{l\sigma'}^+ a_{k\sigma'} \beta_{q'}^{(j')} \beta_q^{(j)} \rangle \right). \end{aligned} \quad (13.18)$$

В правых частях (13.17) и (13.18) выполним расщепление, обобщающее (3.11). Именно, будем расщеплять только электронные операторы, соответствующие разным центрам, например:

$$\begin{aligned} \langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} (1 - \hat{n}_{m, -\sigma}) a_{n\sigma}^+ a_{m\sigma} \rangle & \approx \langle \hat{n}_{m\sigma} (1 - \hat{n}_{m, -\sigma}) \rangle \langle 1 - \hat{n}_{n\sigma} \rangle = \\ & = f_{m\sigma}^{(s)} (1 - f_{n\sigma}^{(s)} - f_n^{(d)}). \end{aligned}$$

Это расщепление не связано ни с какими предположениями о величине корреляционной энергии V . Действительно, выражение (13.10) описывает только взаимодействие между электронами, находящимися на одном и том же центре. Расщепление электронных и фононных операторов справедливо при условии малости параметра g (§ 3); многофононное обобщение не отличается от обсуждавшегося в § 7. После расщепления уравнения (13.17) и (13.18) принимают вид

$$\begin{aligned} & \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + E_{m\sigma} - E_{n\sigma} + (-1)^j \hbar \omega_q \right\} \langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} (1 - \hat{n}_{m, -\sigma}) \beta_q^{(j)} \rangle - \\ & - V \langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} \hat{n}_{n, -\sigma} (1 - \hat{n}_{m, -\sigma}) \beta_q^{(j)} \rangle = \\ & = B_{mn}^{-q} f_{m\sigma}^{(s)} (1 - f_{n, -\sigma}^{(s)} - f_n^{(d)}) \varphi_q^{(j)} - B_{mn}^{-q} (f_{n\sigma}^{(s)} + f_n^{(d)}) f_m^{(e)} \varphi_q^{(3-l)} \end{aligned} \quad (13.19)$$

и

$$\begin{aligned} & \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + E_{m\sigma} - E_{n\sigma} + (-1)^j \hbar \omega_q + V \right\} \langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} \hat{n}_{n, -\sigma} (1 - \hat{n}_{m, -\sigma}) \beta_q^{(j)} \rangle = \\ & = B_{mn}^{-q} f_{m\sigma}^{(s)} f_{n, -\sigma}^{(s)} \varphi_q^{(j)} - B_{mn}^{-q} f_n^{(d)} f_m^{(e)} \varphi_q^{(3-l)}. \end{aligned} \quad (13.20)$$

Здесь функции $\varphi_q^{(j)}$ определяются равенствами (3.13).

Уравнения (13.16а), (13.16б), (13.19), (13.20) вместе с аналогичным образом расцепленными уравнениями для $\langle \hat{n}_{m\sigma} a_m^+, -\sigma a_n, -\sigma \beta_q^{(j)} \rangle$ образуют замкнутую систему. Уравнения (13.19), (13.20) можно проинтегрировать по времени. Подставляя результат интегрирования уравнения (13.19) в (13.16а) и используя марковское приближение (§ 3), мы получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{m\sigma}^{(s)}}{\partial t} = & - \sum_n \{ W_{mn|m\sigma|n}^{(00)} f_{m\sigma}^{(s)} f_n^{(e)} - W_{nm|n\sigma|m}^{(00)} f_n^{(s)} f_m^{(e)} + \\ & + W_{mn|m\sigma|n, -\sigma}^{(01)} f_{m\sigma}^{(s)} f_n^{(s)} - W_{nm|n\sigma|m}^{(10)} f_n^{(d)} f_m^{(e)} - W_{mn|m\sigma|n}^{(10)} f_m^{(d)} f_n^{(e)} + \\ & + W_{nm|n, -\sigma}^{(01)} f_n^{(s)} f_m^{(s)} - W_{mn|m\sigma|n, -\sigma}^{(11)} f_n^{(d)} f_m^{(s)} + W_{nm|n\sigma|m}^{(11)} f_n^{(d)} f_m^{(s)} \}. \end{aligned} \quad (13.21)$$

Аналогично находим

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_m^{(d)}}{\partial t} = & - \sum_n \{ W_{mn|m\sigma|n}^{(10)} f_m^{(d)} f_n^{(e)} - W_{nm|n\sigma|m, -\sigma}^{(01)} f_n^{(s)} f_m^{(s)} + \\ & + W_{mn|m\sigma|n, -\sigma}^{(11)} f_m^{(d)} f_n^{(s)} - W_{nm|n\sigma|m, -\sigma}^{(11)} f_n^{(d)} f_m^{(s)} \}. \end{aligned} \quad (13.22)$$

Здесь вероятности однофононных переходов $W_{mn}^{(\alpha\beta)}$ ($\alpha, \beta = 0, 1$) даются выражениями

$$W_{mn}^{(\alpha\beta)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{qj} |B_{mn}^q|^2 \Phi_q^{(j)} \delta \{ E_m - E_n + (\alpha - \beta) V + (-1)^j \hbar \omega_q \}. \quad (13.23)$$

Обозначения здесь выбраны так, что $W_{mn}^{(10)}$ отвечает вероятности перехода из состояния $\{m\sigma\}$ в состояние $\{n\sigma\}$, причем состояние $\{m, -\sigma\}$ заполнено ($\alpha = 1$), а состояние $\{n, -\sigma\}$ пусто ($\beta = 0$). Иначе говоря, речь идет о переходе с двукратно заполненного центра на пустой, причем, согласно (13.23), изменение энергии электронной системы есть $E_n - E_m - V$. Заметим, что в рамках принятой модели внутрицентровые переходы невозможны, так как они связаны с переворотом спина, а спиновыми взаимодействиями мы пренебрегаем. Таким образом, $W_{mm}^{(\alpha\beta)} = 0$.

Последние четыре слагаемых в фигурных скобках в сумме (13.21) отвечают уменьшению вероятности однократного заполнения центра за счет прихода электрона и образования пары и ее увеличению за счет распада пар. В равновесии имеет место принцип детального равновесия — каждый из членов сумм в правых частях уравнений (13.21), (13.22) обращается в нуль функциями

$$\begin{aligned} n_{m\sigma}^{(s)} = & z_m^{-1} \exp \left\{ - \frac{E_{m\sigma} - F}{T} \right\}, \\ n_m^{(d)} = & z_m^{-1} \exp \left\{ - \frac{E_{m\sigma} + E_{m, -\sigma} - 2F + V}{T} \right\}, \quad n_m^{(e)} = z_m^{-1}, \end{aligned} \quad (13.24)$$

где

$$z_m = 1 + \exp \left\{ -\frac{E_{m\sigma} - F}{T} \right\} + \exp \left\{ -\frac{E_{m, -\sigma} - F}{T} \right\} + \exp \left\{ -\frac{E_{m\sigma} + E_{m, -\sigma} - 2F + V}{T} \right\}. \quad (13.25)$$

Равновесные функции заполнения центров $n_{m\sigma}^{(s)}$, $n_m^{(d)}$, и $n_m^{(e)}$ изображены на рис. 16 для случаев $V > 0$ и $V < 0$ (соответствующие функции заполнения центров n_m обсуждались в § II. 19,

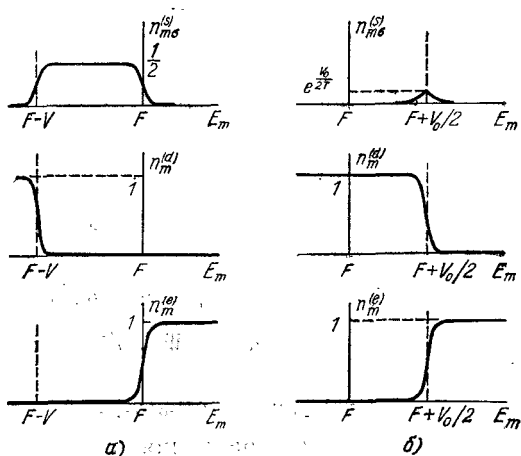


Рис. 16. Равновесные функции $n_{m\sigma}^{(s)}$, $n_m^{(d)}$ и $n_m^{(e)}$ при наличии отталкивания (а) и притяжения (б) между электронами, попадающими на один и тот же локальный центр.

см. рис. 9, 11). В случае притяжения почти все электроны спарены и все процессы, описываемые правыми частями уравнений (13.21), (13.22), маловероятны из-за малого числа неспаренных электронов $f_{m\sigma}^{(s)}$ — все эти процессы идут через состояния, содержащие неспаренные электроны. Вклады от прямых перескоков пар, будучи пропорциональными g^4 , не содержатся в этих уравнениях. Такие процессы, связанные с виртуальным распадом пар, могут тем не менее оказаться конкурентоспособными при низких температурах, поскольку они не содержат активационного множителя.

Согласно сказанному в § 4, учет приложенного поля можно провести, принимая во внимание сдвиги локальных уровней. Считая приложенное поле слабым и сдвиги малыми, можно, как и в § 4, линеаризовать кинетические уравнения (13.21), (13.22). Обозначим (линейные) добавки к равновесным функциям (13.24)

через $\delta f_{m\sigma}^{(s)}$, $\delta f_m^{(d)}$, $\delta f_m^{(e)}$. Тогда линеаризация первых двух слагаемых в скобках в правой части (13.21) дает

$$\begin{aligned} & \{W_{mn|m\sigma|n}^{(00)f(s)f(e)} - W_{nm|n\sigma|m}^{(00)f(s)f(e)}\}_{E_m \rightarrow E_m + \mathcal{V}_m} \approx \\ & \approx (\mathcal{V}_m - \mathcal{V}_n) \left\{ \frac{\partial W_{mn}^{(00)}}{\partial E_m} n_{m\sigma}^{(s)} n_n^{(e)} - \frac{\partial W_{nm}^{(00)}}{\partial E_m} n_{n\sigma}^{(s)} n_m^{(e)} \right\} + \\ & + W_{mn}^{(00)} n_{m\sigma}^{(s)} n_n^{(e)} \left\{ \frac{\delta f_{m\sigma}^{(s)}}{n_{m\sigma}^{(s)}} + \frac{\delta f_n^{(e)}}{n_n^{(e)}} - \frac{\delta f_{n\sigma}^{(s)}}{n_{n\sigma}^{(s)}} - \frac{\delta f_m^{(e)}}{n_m^{(e)}} \right\} = \\ & = \frac{1}{T} \Gamma_{mn\sigma}^{(00)} (\mathcal{V}_m - \mathcal{V}_n + \delta F_{m\sigma}^{(0)} - \delta F_{n\sigma}^{(0)}) \equiv \frac{1}{T} \Gamma_{mn\sigma}^{(00)} U_{mn}^{(00)}, \end{aligned}$$

где

$$\Gamma_{mn\sigma}^{(00)} = W_{mn}^{(00)} n_{m\sigma}^{(s)} n_n^{(e)} = W_{nm}^{(00)} n_{n\sigma}^{(s)} n_m^{(e)} = \Gamma_{nm\sigma}^{(00)}, \quad (13.26)$$

а

$$\delta F_{m\sigma}^{(0)}/T = \delta f_{m\sigma}^{(s)}/n_{m\sigma}^{(s)} - \delta f_m^{(e)}/n_m^{(e)}. \quad (13.27)$$

Аналогично линеаризуются и другие слагаемые, в которые входят величины

$$\Gamma_{mn\sigma}^{(01)} = \Gamma_{nm\sigma}^{(10)} = W_{mn}^{(01)} n_{m\sigma}^{(s)} n_n^{(s)} - \sigma = W_{nm}^{(10)} n_n^{(d)} n_m^{(e)}, \quad (13.28)$$

$$\Gamma_{mn\sigma}^{(11)} = \Gamma_{nm\sigma}^{(11)} = W_{mn}^{(11)} n_m^{(d)} n_{n\sigma}^{(s)} = W_{nm}^{(11)} n_n^{(d)} n_{m\sigma}^{(s)} \quad (13.29)$$

и

$$\delta F_{m\sigma}^{(1)}/T = \delta f_m^{(d)}/n_m^{(d)} - \delta f_{m\sigma}^{(s)}/n_{m\sigma}^{(s)}. \quad (13.30)$$

Линеаризованные кинетические уравнения в этих обозначениях принимают вид

$$\begin{aligned} \partial \delta f_{m\sigma}^{(s)}/\partial t = & -\frac{1}{T} \sum_n \{ \Gamma_{mn\sigma}^{(00)} U_{m\sigma n\sigma}^{(00)} + \Gamma_{mn\sigma}^{(01)} U_{m\sigma n, -\sigma}^{(01)} - \\ & - \Gamma_{mn, -\sigma}^{(10)} U_{m\sigma n, -\sigma}^{(10)} - \Gamma_{mn, -\sigma}^{(11)} U_{m\sigma n\sigma}^{(11)} \} \quad (13.31) \end{aligned}$$

и

$$\frac{\partial \delta f_m^{(d)}}{\partial t} = -\frac{1}{T} \sum_{n\sigma} (\Gamma_{mn\sigma}^{(10)} U_{m, -\sigma n\sigma}^{(10)} + \Gamma_{mn\sigma}^{(11)} U_{m, -\sigma n, -\sigma}^{(11)}), \quad (13.32)$$

где

$$U_{m\sigma n\sigma'}^{(\alpha\beta)} = \mathcal{V}_m - \mathcal{V}_n + \delta F_{m\sigma}^{(\alpha)} - \delta F_{n\sigma'}^{(\beta)}. \quad (13.33)$$

Непосредственное обобщение рассуждений § 5 приводит к следующему выражению для плотности тока (сравните с (5.14), (4.14)):

$$\begin{aligned} j = & -\frac{e}{ST} \sum_{\substack{m < S \\ n > S \\ \sigma}} \{ \Gamma_{mn\sigma}^{(00)} U_{m\sigma n\sigma}^{(00)} + \Gamma_{mn\sigma}^{(01)} U_{m\sigma n, -\sigma}^{(01)} + \\ & + \Gamma_{mn\sigma}^{(10)} U_{m, -\sigma n\sigma}^{(10)} + \Gamma_{mn\sigma}^{(11)} U_{m, -\sigma n, -\sigma}^{(11)} \}, \quad (13.34) \end{aligned}$$

где символы $m < S$, $n > S$, как и раньше, относятся к центрам, локализованным слева и справа от сечения площади S .

В случае, когда энергия не зависит от спина, мы имеем

$$\delta F_{m\sigma}^{(\alpha)} = \delta F_{m, -\sigma}^{(\alpha)} = \delta F_m^{(\alpha)}, \quad (13.35)$$

$$\Gamma_{mn\sigma}^{(\alpha\beta)} = \Gamma_{mn, -\sigma}^{(\alpha\beta)} = \Gamma_{mn}^{(\alpha\beta)} \quad (13.36)$$

и

$$j = - \frac{2e}{ST} \sum_{\substack{m < S \\ n > S \\ \alpha, \beta}} \Gamma_{mn}^{(\alpha\beta)} U_{mn}^{(\alpha\beta)}. \quad (13.37)$$

Из уравнений (13.31), (13.32) в статическом случае вновь, как и раньше, получаются условия, аналогичные закону Кирхгофа для разветвленной сетки сопротивлений. Однако из-за того, что существует два различных способа заполнения каждого центра, число узлов такой сетки вдвое превышает число локальных центров. Таким образом, задача сводится (в том же смысле, как обычно, см. § 4) к отысканию сопротивления случайной сетки, причем каждому локальному центру сопоставляются два ее узла, с $\alpha = 0, 1$ (напомним, что $\Gamma_{mm}^{(\alpha\beta)} = 0$). Коль скоро темпы переходов между центрами экспоненциально зависят от расстояний между ними и от соответствующих разностей энергий, можно надеяться и здесь использовать изложенные выше перколяционные соображения. Это будет сделано в § 14.

Отметим, что изложенная выше теория допускает непосредственное обобщение на случай, когда в системе имеется малый градиент температуры. Именно, введем локально-равновесные распределения

$$\bar{n}_{m\sigma}^{(s)} = n_{m\sigma}^{(s)}|_{T \rightarrow T_m} \quad \text{и т. д.}, \quad (13.38)$$

где T_m есть температура в точке локализации центра R_m , $T_m = T + R_m \nabla T$ (сравните с § 4). Линеаризация вновь приводит нас к уравнениям (13.31), (13.32), в которые вместо $\delta f_{m\sigma}^{(s)}$, $\delta f_m^{(d)}$ входят величины $\delta f_{m\sigma}^{(s)} - \frac{\partial n_{m\sigma}^{(s)}}{\partial T} R_m \nabla T$, $\delta f_m^{(d)} - \frac{\partial n_m^{(d)}}{\partial T} R_m \nabla T$. Поскольку

$$\frac{\partial n_{m\sigma}^{(s)}}{\partial T} = - \frac{n_{m\sigma}^{(s)}}{z_m} \frac{\partial z_m}{\partial T} + \frac{E_{m\sigma} - F}{T^2} n_{m\sigma}^{(s)}$$

и

$$\frac{\partial n_m^{(d)}}{\partial T} = - \frac{n_m^{(d)}}{z_m} \frac{\partial z_m}{\partial T} + \frac{E_{m\sigma} + E_{m, -\sigma} - 2F + V}{T^2} n_m^{(d)},$$

вместо величин $\delta F_{m\sigma}^{(\alpha)}$ из (13.27), (13.29) возникнут величины

$$\delta F_{m\sigma}^{(\alpha)} + (E_m - F + \alpha V) \mathbf{R}_m \frac{\nabla T}{T}.$$

Таким образом, при наличии градиента температуры роль разности обобщенных потенциалов вместо (13.33) играет величина

$$U_{m\sigma n\sigma'}^{(\alpha\beta)} = \mathcal{Y}_m - \mathcal{Y}_n + \delta F_{m\sigma}^{(\alpha)} - \delta F_{n\sigma'}^{(\beta)} + \\ + (E_m - F + \alpha V) \mathbf{R}_m \frac{\nabla T}{T} - (E_n - F + \beta V) \mathbf{R}_n \frac{\nabla T}{T}. \quad (13.39)$$

Уравнения (13.31), (13.32) вместе с (13.39) описывают термоэлектрические явления при учете хаббардовской корреляции электронов, попадающих на один центр.

Небезынтересно проследить, каким образом полученные соотношения переходят в уравнения § 3 при исчезновении корреляции. Когда $V = 0$, вероятности $W_{mn}^{(\alpha\beta)}$ одинаковы при любых α и β , т. е. $W_{mn}^{(\alpha\beta)} = W_{mn}$. Соответственно сумму $\sum_{\alpha\beta} \Gamma_{mn}^{(\alpha\beta)} U_{mn}^{(\alpha\beta)}$, входящую в (13.37) и (13.31), можно преобразовать следующим образом:

$$\sum_{\alpha\beta} \Gamma_{mn}^{(\alpha\beta)} U_{mn}^{(\alpha\beta)} = W_{mn} \{ (n_{m\sigma}^{(s)} n_n^{(e)} + n_{m\sigma}^{(s)} n_{n\sigma}^{(s)} + \\ + n_m^{(d)} n_n^{(e)} + n_m^{(d)} n_{n\sigma}^{(s)}) (\mathcal{Y}_m - \mathcal{Y}_n + [(E_m - F) \mathbf{R}_m - (E_n - F) \mathbf{R}_n] \frac{\nabla T}{T}) + \\ + n_{m\sigma}^{(s)} n_n^{(e)} (\delta F_m^{(0)} - \delta F_n^{(0)}) + n_{m\sigma}^{(s)} n_{n\sigma}^{(s)} (\delta F_m^{(0)} - \delta F_n^{(1)}) + \\ + n_m^{(d)} n_n^{(e)} (\delta F_m^{(1)} - \delta F_n^{(0)}) + n_m^{(d)} n_{n\sigma}^{(s)} (\delta F_m^{(1)} - \delta F_n^{(1)}) \} = \\ = W_{mn} n_F(E_m) [1 - n_F(E_n)] \{ \mathcal{Y}_m - \mathcal{Y}_n + \delta F_{m\sigma} - \delta F_{n\sigma} + \\ + [(E_m - F) \mathbf{R}_m - (E_n - F) \mathbf{R}_n] \frac{\nabla T}{T} \}. \quad (13.40)$$

Здесь $\delta F_{m\sigma} = \frac{\delta f_{m\sigma}}{n_F(E_m) [1 - n_F(E_m)]}$ есть сдвиг химического потенциала для состояния $\{m\sigma\}$. Это преобразование легко выполнить, явно используя определения (13.27), (13.30), а также соотношение $\delta f_{m\sigma} = \delta f_{m\sigma}^{(s)} + \delta f_m^{(d)} = -\delta f_{m\sigma}^{(s)} - \delta f_m^{(e)}$, которое следует из (13.15).

Таким образом, определение плотности тока (13.37) переходит в (5.14), а сумма уравнений (13.31) и (13.32) — в уравнение (4.13). Единственное очевидное отличие состоит лишь в появлении спинного множителя 2 в формуле для плотности тока,

§ 14*. Учет динамической корреляции между электронами при расчете проводимости и термоэдс

Посмотрим теперь, как можно применить перколяционные соображения для вычисления термоэлектрических кинетических коэффициентов с помощью соотношений, полученных в предыдущем параграфе. Рассмотрим отдельно случаи отталкивающего ($V > 0$) и притягивающего ($V < 0$) взаимодействия.

В случае отталкивающего взаимодействия темпы переходов (13.26), (13.28), (13.29) даются выражениями

$$\Gamma_{mn}^{(\alpha\beta)} = \omega_{mn}^{(\alpha\beta)} 2^{-\theta(-E_m^{(0)})} \theta(E_m^{(1)}) - \theta(-E_n^{(0)}) \theta(E_n^{(1)}) e^{-\tilde{\eta}_{mn}^{(\alpha\beta)}}. \quad (14.1)$$

Здесь

$$\tilde{\eta}_{mn}^{(\alpha\beta)} = \frac{1}{T} \left\{ \frac{|E_m^{(\alpha)} - E_n^{(\beta)}| + |E_m^{(\alpha)}| + |E_n^{(\beta)}|}{2} + \right. \\ \left. + (-1)^{1-\alpha} E_m^{(1-\alpha)} \theta[(-1)^{1-\alpha} E_m^{(1-\alpha)}] + (-1)^{1-\beta} E_n^{(1-\beta)} \theta[(-1)^{1-\beta} E_n^{(1-\beta)}] \right\}. \quad (14.2)$$

$$E_m^{(\alpha)} = E_m - F + \alpha V, \quad (14.3)$$

$\alpha = 0, 1$, а $\omega_{mn}^{(\alpha\beta)}$ — множители, не зависящие от температуры, отличающиеся от (3.21) лишь заменой $E_m \rightarrow E_m^{(\alpha)}$, $E_n \rightarrow E_n^{(\beta)}$. Выражение (14.1) записано в предположении, что характерные разности энергий превосходят T (сравните с (8.5)). Члены с $\alpha = \beta$ в (14.1) отвечают переходам с однократно заполненного на пустой центр ($\alpha = \beta = 0$) и с двукратно заполненного — на однократно заполненный ($\alpha = \beta = 1$). При таких переходах энергия взаимодействия между электронами не меняется — речь идет о перескоках в окрестностях фермиевских ступенек, расположенных при $E = F$ и при $E = F - V$ (см. рис. 9). Члены с $\alpha \neq \beta$ отвечают переходам с двукратно заполненного на пустой ($\alpha = 1, \beta = 0$) и с однократно заполненного на однократно заполненный центр ($\alpha = 0, \beta = 1$). Двукратно заполненные центры появляются лишь при энергиях, близких к $F - V$ или более низких, а пустые — при энергиях, близких к энергии Ферми или больших ее. Поэтому при переходе с двукратно заполненного центра на пустой выделяющаяся энергия в основном компенсируется разностью энергий центров. Аналогично, проигрыш V в энергии при образовании двукратно заполненного центра почти полностью компенсируется за счет того, что переход происходит между состояниями с энергиями $E \approx F$ и $E \approx F - V$. Таким образом, все темпы переходов с различными α, β — одного поряд-

ка, и, вообще говоря, нельзя разделить рассматриваемую сетку на две независимых подсетки, отвечающие перескокам около каждой из ступенек.

Если корреляционная энергия V велика по сравнению с характерной разностью энергий при переходе (а последняя, как можно ожидать, порядка $\eta_c T$), то в правой части формулы (14.2) можно опустить последние два слагаемых. В самом деле, эти слагаемые содержат энергии, сдвинутые на V . Например,

$$\eta_{mn}^{(00)} = \frac{1}{T} \left\{ \frac{|E_m - E_n| + |E_m - F| + |E_n - F|}{2} + (F - E_m - V) \theta(F - E_m - V) + (F - E_n - V) \theta(F - E_n - V) \right\}.$$

Отсюда видно, что последние два слагаемых дают вклад лишь в области $E_m, E_n < F - V$. Поскольку, однако, мы предположили, что энергия V велика по сравнению с толщиной активного слоя, названная область практически не играет роли в явлениях переноса, что и оправдывает пренебрежение последними членами. При этом получаем

$$\eta_{mn}^{(\alpha\beta)} = \frac{1}{T} \frac{|E_m^{(\alpha)} - E_n^{(\beta)}| + |E_m^{(\alpha)}| + |E_n^{(\beta)}|}{2}, \quad (14.2')$$

и темпы переходов принимают тот же вид, что и раньше, когда мы не учитывали корреляцию, с тем лишь отличием, что энергия теперь отсчитывается от соответствующей ступеньки. Таким образом, если приписать каждому узлу $\{m\alpha\}$ энергию $E_m^{(\alpha)}$, то задача сведется к вычислению сопротивления случайной сетки, с тем лишь отличием, что переходы между некоторыми узлами (внутрицентровые переходы) оказываются запрещенными. Мы увидим, что это обстоятельство и в самом деле не существенно. Будем, как и раньше (§ 9), считать два узла связанными, если аргумент экспоненциальной функции в выражении для темпа переходов меньше некоторого значения η :

$$\eta_{mn}^{(\alpha\beta)} = 2\gamma R_{mn} + \tilde{\eta}_{mn}^{(\alpha\beta)} < \eta. \quad (14.4)$$

Зацепляющиеся случайные связи образуют бесконечный кластер, когда величина η достигает критического значения η_c , отвечающего порогу протекания. Это значение соответствует критической средней плотности связей в системе (§ 9); в нашем случае можно ввести величину $\nu^{(\alpha)}(E)$ — среднее число связей узла подсетки (α) с энергией E со всеми другими узлами подсеток (α) и $(1 - \alpha)$. В отсутствие корреляции между пространственными координатами центров и их энергиями ($\Psi = 1$)

величина $v^{(\alpha)}(E_m)$ дается выражением

$$\begin{aligned} v^{(\alpha)}(E_m) &= v(E_m^{(\alpha)}) = \\ &= \sum_{\beta} 4\pi \int dE_n \rho(E_n) \int_0^{\infty} dR R^{2\theta} \left[\eta - 2\gamma R - \frac{|E_m^{(\alpha)} - E_n^{(\beta)}| + |E_m^{(\alpha)}| + |E_n^{(\beta)}|}{2T} \right] = \\ &= 4\pi \int dE_n \tilde{\rho}(F + E_n) \int_0^{\infty} dR R^{2\theta} \left[\eta - 2\gamma R - \frac{|E_m^{(\alpha)} - E_n| + |E_m^{(\alpha)}| + |E_n|}{2T} \right], \end{aligned} \quad (14.5)$$

где

$$\tilde{\rho}(E) = \rho(E) + \rho(E - V). \quad (14.6)$$

Таким образом, для $v(E)$ получается то же выражение, что и в § 9, однако роль плотности состояний играет величина $\tilde{\rho}(E)$, которую мы будем называть кажущейся плотностью состояний. Усреднение числа связей по эффективному слою энергий должно теперь проводиться с весовой функцией $\mathcal{P}^{(\alpha)}(E)$, определяющей вероятность того, что центр подсетки (α) с энергией E принадлежит одной из проводящих цепочек бесконечного кластера. Соответственно критерий связей (§ 9) имеет вид

$$\bar{v} = \frac{\sum_{\alpha} \int dE v^{(\alpha)}(E) \mathcal{P}^{(\alpha)}(E)}{\sum_{\alpha} \int dE \mathcal{P}^{(\alpha)}(E)}, \quad (14.7)$$

причем усреднение проводится как по энергии, так и по подсеткам (α). Из (14.7) видно, что критерий, определяющий температурную зависимость проводимости, содержит лишь кажущуюся плотность состояний (14.6):

$$\bar{v} = \frac{\int dE \tilde{\rho}(E + F) v^2(E)}{\int dE \tilde{\rho}(E + F) v(E)}, \quad (14.8)$$

где $v(E)$ дается формулой (14.5) и также зависит от $\tilde{\rho}(E)$.

Величина (14.6) входит и в формулу для термоэдс. Обобщение (12.12) на случай, когда есть две подсетки, как видно из (13.39), дается выражением

$$\alpha = - \frac{1}{eT} \frac{\sum_{\alpha} \int dE E^{(\alpha)} \mathcal{P}^{(\alpha)}(E)}{\sum_{\alpha} \int dE \mathcal{P}^{(\alpha)}(E)}. \quad (14.9)$$

Отсюда получаем

$$\alpha = -\frac{1}{eT} \frac{\int dE E \bar{\rho}(E+F) v(E)}{\int dE \bar{\rho}(E+F) v(E)}. \quad (14.10)$$

Тот факт, что кинетические характеристики системы определяются функцией $\bar{\rho}(E)$, а не $\rho(E)$, может оказаться существенным, если плотность состояний не постоянна. Например, плотности локализованных состояний, изображенной на рис. 17, а, соответствует кажущаяся плотность состояний, показанная на рис. 17, б. Видно, что при энергии, сдвинутой на V , появляется корреляционное повторение пика.

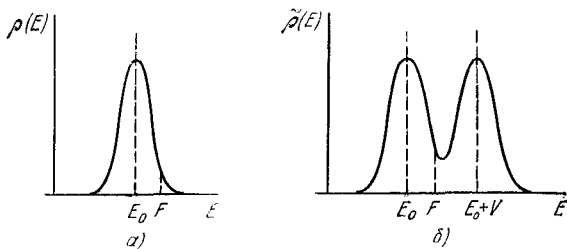


Рис. 17. Кажущаяся плотность состояний $\bar{\rho}(E)$ (б), отвечающая плотности состояний $\rho(E)$ (а).

Можно ожидать, что к числу характеристик системы, связанных с кажущейся плотностью состояний, будут относиться и оптические характеристики, такие, как коэффициенты поглощения и испускания. В то же время положение уровня химического потенциала не определяется одной лишь функцией $\bar{\rho}(E)$. Если плотность состояний имеет пик (рис. 17, а), то вычисление положения уровня F , как и в § II.19, показывает, что он располагается вблизи минимума кажущейся плотности состояний, а смещение его с температурой линейно при низких температурах (см. (II.19.10)).

Обратимся теперь к случаю, когда эффективное хаббардовское взаимодействие отвечает притяжению, т. е. $V = -V_0 < 0$. Это означает, что спаривание электронов энергетически выгодно и число неспаренных электронов убывает при $T \rightarrow 0$. Пусть $V_0 \gg T$, тогда равновесные функции заполнения узлов имеют вид

$$n_{m\sigma}^{(s)} \approx \frac{e^{-V_0/2T}}{e^{\tilde{E}_m/T} + e^{-\tilde{E}_m/T}}, \quad n_m^{(d)} \approx \frac{1}{1 + e^{2\tilde{E}_m/T}}, \quad (14.11)$$

где \tilde{E}_m — энергия, отсчитанная от уровня $F + V_0/2$:

$$\tilde{E}_m = E_m - F - V_0/2. \quad (14.12)$$

На основании выражений (13.26) и (13.29) получаем

$$\Gamma_{mn}^{(00)} = \omega_{mn}^{(00)} e^{-V_0/2T} \exp \left\{ -\frac{1}{T} \left[\frac{|\tilde{E}_m - \tilde{E}_n| + |\tilde{E}_m| + |\tilde{E}_n|}{2} - \tilde{E}_m \theta(-\tilde{E}_m) - \tilde{E}_n \theta(-\tilde{E}_n) \right] \right\}, \quad (14.13a)$$

$$\Gamma_{mn}^{(11)} = \omega_{mn}^{(11)} e^{-V_0/2T} \exp \left\{ -\frac{1}{T} \left[\frac{|\tilde{E}_m - \tilde{E}_n| + |\tilde{E}_m| + |\tilde{E}_n|}{2} + \tilde{E}_m \theta(\tilde{E}_m) + \tilde{E}_n \theta(\tilde{E}_n) \right] \right\}, \quad (14.13b)$$

а темпы переходов $\Gamma_{mn}^{(01)}$ и $\Gamma_{mn}^{(00)}$ пропорциональны $e^{-V_0/T}$. Таким образом, при $V_0 \gg T$ мы имеем $\Gamma_{mn}^{(\alpha\alpha)} \gg \Gamma_{mn}^{(\alpha\beta)}$ ($\beta \neq \alpha$). Это позволяет считать сетку сопротивлений состоящей из двух почти независимых сеток.

Выделим явно множитель $e^{-V_0/2T}$ в темпах переходов, положив

$$\Gamma_{mn}^{(\alpha\alpha)} = e^{-V_0/2T} \tilde{\Gamma}_{mn}^{(\alpha\alpha)}. \quad (14.14)$$

Тогда выражение для плотности тока (13.37) можно переписать в виде

$$j = \frac{2e}{ST} e^{-V_0/2T} \sum_{\substack{m < S \\ n > S}} \left\{ \tilde{\Gamma}_{mn}^{(00)} (\mathcal{Y}_m - \mathcal{Y}_n + \delta F_m^{(0)} - \delta F_n^{(0)}) + \tilde{\Gamma}_{mn}^{(11)} (\mathcal{Y}_m - \mathcal{Y}_n + \delta F_m^{(1)} - \delta F_n^{(1)}) \right\}. \quad (14.15)$$

Правая часть (14.15) складывается из двух составляющих, соответствующих двум подсеткам; одна из них ($\alpha = 0$) может рассматриваться как электронная, а вторая ($\alpha = 1$) — как дырочная. Действительно, перескоки электрона по однократно заполненным центрам можно описывать как движение дырки. В силу (13.31), (13.32) закон Кирхгофа имеет место для каждой из подсеток. Температурная зависимость вкладов, отвечающих двум подсеткам в (14.15), может быть найдена отдельно для каждой из подсеток; в стандартных предположениях (§ 10) она имеет моттовский вид для обеих составляющих. Полная температурная зависимость проводимости определяется произведением экспоненты $e^{-V_0/2T}$ на моттовский множитель:

$$j \sim e^{-V_0/2T} e^{-(T_0/T)^{1/4}}. \quad (14.16)$$

Отсюда видно, что при низких температурах главной оказывается простая активационная зависимость, отражающая просто процесс диссоциации пар и появления однократно заполненных центров, через которые может идти перенос. Если использо-

вать аналогию с кристаллическими полупроводниками, то эта активационная зависимость аналогична зависимости термической генерации свободных носителей. Второй множитель в (14.16) отражает температурную зависимость прыжковой подвижности; он может стать главным с повышением температуры при $T \gtrsim (V_0/2)(V_0/2T_0)^{1/3}$. При осуществлении указанного перехода ситуация была бы в известной степени обратной обычно наблюдаемой в неупорядоченных полупроводниках, когда переход от активационной зависимости проводимости к моттовской происходит с понижением температуры. Разумеется, моттовская зависимость, связанная с прыжковой проводимостью при наличии диссоциированных пар, может наблюдаться, лишь если температура достаточно низка, так что проводимость в зонах не играет роли. Температурный интервал, отвечающий закону Мотта, может существовать или отсутствовать в зависимости от параметров материала: V_0 , ширины запрещенной зоны, плотности состояний и т. д.

Заметим, что величина проводимости, связанной с рассмотренным механизмом, как правило, очень мала из-за малости множителя $e^{-V_0/2T}$, особенно при низких температурах. По этой причине другой механизм — проводимость путем прямых перескоков пар — может оказаться конкурентоспособным. Этот механизм появляется лишь в следующем (g^4) порядке теории возмущений, однако он не содержит активационного множителя. Перескок пары с одного узла на другой происходит через виртуальное состояние, отвечающее диссоциированной паре, в связи с чем и появляется энергетический знаменатель типа $(E_m - E_n + V_0)^{-1} \approx V_0^{-1}$. Таким образом, вероятность перескока пары пропорциональна g^4/V_0 .

§ 15. Проводимость неоднородных полупроводников с крупномасштабными флуктуациями потенциала

Изложенная выше теория прыжковых явлений переноса относилась к условиям, когда основную роль играли перескоки между сильно локализованными состояниями, причем длина перескока намного превышала радиус локализации. Для локализованных состояний, близких к порогу локализации E_c , последнее условие может и не выполняться, поскольку при $E \rightarrow E_c$ возрастает как радиус локализации, так и плотность соответствующих уровней. При этом радиус локализации может и превысить среднее расстояние между центрами. В таких условиях становятся неприменимыми представления об оптимальных путях перескоков и перколяционные соображения § 8, использованные для отыскания решения кинетического уравнения.

С другой стороны, как мы видели в § II. 12, в полупроводнике со случайным полем возникает и плавное искривление зон, представляющее собой не что иное, как длинноволновую часть указанного поля. Иначе говоря, рассматриваемые материалы, будучи макроскопически однородными, оказываются все же неоднородными в масштабе «промежуточной» длины l_0 . Разумеется, роль этих неоднородностей может быть различной в зависимости от природы системы (в частности, от технологии приготовления образцов).

Плавные крупномасштабные флуктуации потенциала можно рассматривать классически, коль скоро вероятность туннельного прохождения электронов сквозь горбы потенциального рельефа мала, а потенциальные ямы содержат много электронных уровней *). При этом влияние случайного поля на энергетический спектр полупроводника, в соответствии с гл. II, можно описать, пользуясь картиной искривленных зон:

$$E_{c, v}(\mathbf{x}) = E_{c, v}^{(0)} + U_{c, v}(\mathbf{x}). \quad (15.1)$$

Здесь $E_{c, v}^{(0)}$ — края зон в полупроводнике в отсутствие флуктуаций случайного поля, а $U_{c, v}(\mathbf{x})$ — потенциальная энергия электрона в случайном поле. По определению (см. § II. 7) среднее значение $U_{c, v}(\mathbf{x})$ по макроскопическому объему равно нулю:

$$\langle U_{c, v}(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{x} U_{c, v}(\mathbf{x}) = 0. \quad (15.2)$$

Классическую задачу о возможности инфинитного движения электрона с заданной энергией в искривленной зоне называют континуальной задачей теории протекания. Очевидно, инфинитные траектории могут существовать лишь при достаточно больших энергиях, превышающих некоторое критическое значение $E_c^{(кл)}$. Оно называется классическим уровнем протекания для электронов (аналогично вводится и классический уровень протекания для дырок $E_v^{(кл)}$). Электрон с энергией $E > E_c^{(кл)}$ имеет возможность либо пройти над «горбами» потенциального рельефа $E_c(\mathbf{x})$, либо обойти их; при $E < E_c^{(кл)}$ движение электрона по классически доступным областям $E > E_c(\mathbf{x})$ финитно — классически доступные для электрона области изолированы друг от друга.

Величина $E_c^{(кл)}$, вообще говоря, отлична от $E_c^{(0)}$ и зависит от размерности задачи d . В одномерной классической задаче ($d = 1$) электрон может преодолеть потенциальный барьер, лишь если его энергия E превышает высоту барьера, а возмож-

*) Подчеркнем, что, вообще говоря, возможность пренебрежения туннелированием сквозь случайный потенциальный рельеф отнюдь не очевидна.

ность инфинитного движения появляется, лишь если $E > \max \{E(\mathbf{x})\}$. Возможность обхода выступов потенциального рельефа появляется, начиная с двумерного случая (при $d \geq 2$)*. Ясно, что положение уровня протекания $E_c^{(к,л)}$ зависит от характера рельефа, т. е. от статистических свойств случайного поля. При вычислении средних значений величин, зависящих только от локальных значений случайного поля, вместо функционального интегрирования (§ II.7) можно воспользоваться обычным; при этом функционал $\mathcal{P}[U]$ превращается в функцию распределения случайной величины U . Например, доля всего объема, классически доступная для электрона с энергией E , дается интегралом

$$\begin{aligned} v &= \int d\mathbf{x} \theta(E - E_c(\mathbf{x})) = \int \delta U(\mathbf{x}) \theta(E - E_c(\mathbf{x})) \mathcal{P}[U(\mathbf{x})] = \\ &= \int_{-\infty}^{E - E_c^{(0)}} dU \mathcal{P}(U). \end{aligned} \quad (15.3)$$

При заданных свойствах случайного поля величину (15.3) можно выбрать в качестве характеристики свойств классически доступной области. Именно, протекание в системе наступает при $v > v_c$, причем критическое значение v_c , отвечающее порогу протекания, зависит от размерности пространства и от статистических свойств случайного поля.

Заметим, что континуальная задача протекания связана с решеточными задачами ([51], Приложение XI). Действительно, если ввести некоторую решетку с периодом, малым по сравнению с характерной длиной изменения случайного поля, и считать все узлы, попадающие в области $E_c(\mathbf{x}) < E$, «открытыми», а все узлы, лежащие в областях $E_c(\mathbf{x}) > E$, — «блокированными», то окажется, что протекание в системе возникает как раз при $E = E_c^{(к,л)}$. При этом вероятность того, что узел «открыт», совпадает с вероятностью попадания его в классически доступную область. Согласно Приложению XI, для решеточных задач протекания с блокированными узлами пороговая величина разрешенного объема $v_c^{(реш)}$, связанного со сферами, описанными вокруг разрешенных узлов, в критической точке слабо зависит от типа решетки, а зависит лишь от размерности пространства ($v_c^{(реш)} \approx 0,45$ для $d = 2$ и $v_c^{(реш)} \approx 0,15$ для $d = 3$). Именно с этим связано предположение о том, что и для континуальной задачи доля классически доступного объема в критической точке

*) Напомним, что при учете квантомеханических эффектов в одномерном случайном потенциале все состояния локализованы (см. § II.1). Если так же обстоит дело и при $d = 2$, то задача требует особого рассмотрения.

будет той же, т. е. будет совпадать с соответствующим инвариантом решеточной задачи. Справедливость этого предположения непосредственно проверяется в двумерном случае, где для симметричной функции распределения $\mathcal{P}(U) = \mathcal{P}(-U)$ порог $E_c^{(кл)}$ определяется точно. Он просто равен невозмущенному краю зоны $E_c^{(0)}$, поскольку в двумерном случае появление бесконечно протяженной области, где $E \geq E_c(\mathbf{x})$, сопровождается тем, что становится невозможным бесконечное перемещение по области $E \leq E_c(\mathbf{x})$ (под рельефом). Единственная точка сосуществования протекания над и под рельефом есть $E = E_c^{(0)}$, при этом доля классически доступного объема равна $v_c = 0,5$. Последнее значение не очень сильно отличается от значения $v_c^{(реш)} \approx 0,45$, отвечающего решеточным задачам. Аналогично, в трехмерном случае можно принять, что $v_c \approx v_c^{(реш)} \approx 0,15$. Численный расчет для гауссова потенциала дал близкое значение $v_c = 0,17$; величина v_c может оказаться иной для негауссовой статистики (А. С. Скал, Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, 1973).

Если в формуле (15.3) воспользоваться гауссовой статистикой, то мы непосредственно получим соотношение, определяющее положение классического порога протекания (Р. Заллен, Х. Шер, 1971):

$$v_c = \frac{\int_{-\infty}^{E_c^{(кл)} - E_c^{(0)}} dU \exp(-U^2/2\psi_1)}{\int_{-\infty}^{\infty} dU \exp(-U^2/2\psi_1)} = \frac{1}{2} \left(1 - \operatorname{erf} \frac{E_c^{(0)} - E_c^{(кл)}}{\sqrt{2\psi_1}} \right). \quad (15.4)$$

Отсюда следует, что

$$E_c^{(кл)} = E_c^{(0)} - \xi \psi_1^{1/2}, \quad (15.5)$$

где ξ — постоянная, определяемая из условия $\operatorname{erf} \frac{\xi}{\sqrt{2}} = 1 - 2v_c$ ($\xi > 0$ при $v_c < 0,5$). Таким образом, в трехмерном случае наложение случайного поля сдвигает вниз границу, определяющую возможность инфинитного движения электронов. Повторяя аналогичные рассуждения для дырок, нетрудно найти, что классический уровень протекания для дырок $E_v^{(кл)}$ лежит выше прежнего дна зоны $E_v^{(0)}$. В пренебрежении квантовыми эффектами (туннелированием сквозь горбы потенциального рельефа) порог локализации совпадает с классическим уровнем протекания. Соответственно в этом приближении электрическая ширина запрещенной зоны E_g , определяемая как разность порогов локализа-

ции для электронов и для дырок, равна $E_c^{(кл)} - E_v^{(кл)}$. Это значение меньше величины $E_{g, opt} = E_c^{(0)} - E_v^{(0)}$ (Б. И. Шкловский, 1971). Величина $E_{g, opt}$ может проявляться как оптическая ширина запрещенной зоны при плавном одинаковом ($U_c(x) = U_v(x)$) искривлении зон (см. гл. V). Вывод о различии между оптической и электрической шириной запрещенной зоны подтверждается экспериментально; это различие, в соответствии с (15.5), связано с величиной флуктуаций случайного потенциала.

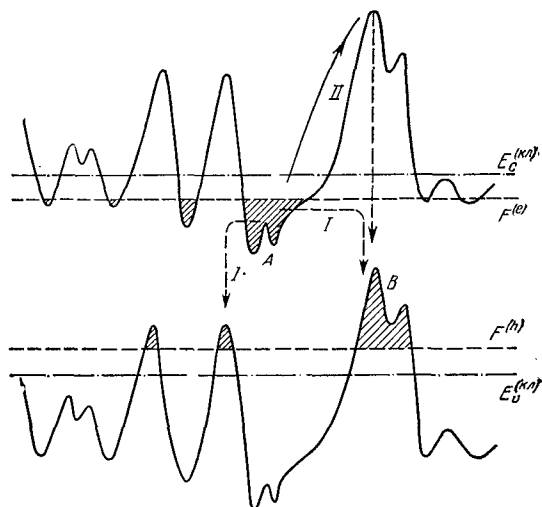


Рис. 18. Каналы рекомбинации в неоднородном полупроводнике с плавным искривлением зон; $F^{(e)}$ и $F^{(h)}$ — квазиуровни Ферми для электронов и для дырок.

Плавное искривление зон приводит к некоторым интересным особенностям, связанным с рекомбинацией неравновесных носителей в полупроводниках со случайным полем (Г. Фриче, 1971). Именно, если термализация неравновесных электронов и дырок в зонах происходит быстрее, нежели их рекомбинация, то неравновесные электроны в зоне проводимости скапливаются в минимумах потенциального рельефа (области типа А на рис. 18), а неравновесные дырки — в максимумах (области типа В). Таким образом, неравновесные электроны и дырки оказываются пространственно разделенными, что может сильно замедлить их рекомбинацию. Действительно, области пространства, где находятся дырки, отвечают горбам потенциального рельефа для электронов. Поэтому электроны могут попасть

туда, лишь обладая энергией, которая может заметно превышать уровень протекания. Таким образом, энергия активации рекомбинации через канал II на рис. 18 может превысить энергию активации проводимости, т. е. энергию, требуемую для заброса носителей на уровень протекания. Соответственно при низких температурах может наблюдаться «замороженная» фотопроводимость неравновесных носителей, сохраняющаяся длительное время.

Заметим, что в описанной выше модели плавного искривления зон не учитывались возможности туннельного проникновения электронов в классически недоступные области и надбарьерного отражения. Фактически квантовые эффекты могут быть более или менее существенными в зависимости от масштаба и амплитуды флуктуаций, эффективных масс носителей и т. д. Учет квантовых эффектов приводит к тому, что порог локализации E_c оказывается отличным от классического уровня протекания $E_c^{(кл)}$. Наряду с этим может оказаться, что определяющую роль играет рекомбинация путем туннелирования в области максимумов потенциального рельефа (канал I на рис. 18). Это, в частности, существенно отражается на виде спектров рекомбинационного излучения (А. П. Леванюк, В. В. Осипов, 1973; В. В. Осипов, Т. И. Соболева, М. И. Фойгель, 1978).

Для описания явлений переноса в неоднородных полупроводниках можно воспользоваться макроскопичностью флуктуаций, вводя локальные характеристики системы (§ II.13). Последние определяются с помощью усреднения по объему, размеры которого малы по сравнению с характерным масштабом неоднородностей, но велики по сравнению с длиной свободного пробега, определяемой мелкомасштабными флуктуациями (и, возможно, фононами). Соответственно в неоднородных полупроводниках можно ввести случайную концентрацию электронов $n(\mathbf{x})$, их подвижность $\mu(\mathbf{x})$, локальную функцию распределения $f(\mathbf{x}, E)$ и локальную подвижность, зависящую от энергии $\mu(\mathbf{x}, E)$. Ясно, что в рассматриваемой модели вклад в проводимость среды могут давать лишь электроны с энергиями, превосходящими порог протекания E_c . При $F < E_c$ это обстоятельство и определяет активационный характер температурной зависимости числа электронов, заброшенных в область $E > E_c$, а с ним — и проводимости системы. С другой стороны, при перемещении уровня Ферми в область $E > E_c$ происходит переход к безактивационной металлической проводимости. Заметим, однако, что вычисление проводимости неупорядоченного полупроводника представляет собой далеко не простую задачу, даже если известны статистические свойства локальных характеристик случайной среды. Дело в том, что форма связанной инфинит-

ной области пространства, классически доступной для электрона с энергией E , может быть весьма сложной. По этой причине вклады в полную проводимость от различных областей пространства с близкими значениями локальной проводимости могут существенно различаться. Например, можно ожидать, что вклад от «залитых», аналогичных «тупикам» в бесконечном кластере связей, будет малым. Соответственно, вообще говоря, нельзя считать, что проводимость системы при $E > E_c$ пропорциональна объему бесконечной классически доступной области пространства. Отыскание характера изменения проводимости в области вблизи порога требует более детальной информации о свойствах системы вблизи порога протекания.

§ 16*. Критическое поведение в задачах протекания

Выше при рассмотрении прыжковой проводимости по локализованным состояниям мы установили, при каких условиях задача о проводимости трехмерной случайной сетки сопротивлений может быть приближенно решена методами теории протекания. Как мы видели в § 15, вычисление проводимости неоднородных полупроводников с крупномасштабными флуктуациями потенциала в определенных случаях также сводится к одной из задач теории протекания; к теории протекания приводит и ряд других задач о проводимости различных неупорядоченных систем. Характерная особенность задач протекания в бесконечных системах состоит в существовании порога, при котором скачкообразно меняются топологические свойства системы. Именно, в пороговой точке возникает бесконечный кластер зацепляющихся связей (или связанных открытых узлов), или бесконечно протяженная связная область пространства, доступная для носителей заряда. В этом смысле можно говорить об изменении свойств связности системы при появлении в ней возможности протекания и о появлении корреляции между свойствами системы на больших расстояниях. Ситуация здесь в известном смысле напоминает ту, что возникает при фазовых переходах второго рода. Эту аналогию оказалось возможным использовать для распространения методов, развитых в теории фазовых переходов второго рода, на задачи протекания (П. В. Кастелайн, К. М. Фортун, 1969).

Связь теории протекания с теорией фазовых переходов можно проиллюстрировать на примере модели разбавленного ферромагнетика [51, 54]. Пусть часть немагнитных атомов в узлах регулярной решетки заменена ферромагнитными, доля которых есть p . Будем считать, что взаимодействие между ферромагнитными атомами устанавливает одинаковую ориентацию спинов, если они расположены в соседних узлах, а для более

далеких атомов этим взаимодействием можно пренебречь. При малых концентрациях ферромагнитных атомов вероятность их попадания на соседние узлы мала, и кластеры, внутри которых ориентация спинов одинакова, изолированы друг от друга. При этом макроскопический магнитный момент системы равен нулю в силу случайности ориентаций спинов в различных кластерах. С возрастанием концентрации возрастают и размеры кластеров. Наконец, при некотором пороговом значении $p = p_c$ в системе появляется бесконечный кластер, возникновение которого отвечает переходу в ферромагнитное состояние. Действительно, при $p > p_c$ в системе появляется отличный от нуля магнитный момент, поскольку ориентация всех спинов бесконечного кластера одинакова. Эта задача о разбавленном ферромагнетике совпадает с перколяционной задачей узлов, если принять, что открытые узлы соответствуют ферромагнитным атомам.

Величина $\mathcal{P}(p)$ — доля узлов, принадлежащих бесконечному кластеру, — играет в задачах протекания ту же роль, что и параметр порядка в теории фазовых переходов: $\mathcal{P}(p) \equiv 0$ ниже порога (при $p < p_c$) и $\mathcal{P}(p) \neq 0$ при $p > p_c$. Вблизи порога, согласно численным расчетам, поведение величины $\mathcal{P}(p)$ может быть описано простым степенным законом [53]:

$$\mathcal{P}(p) \sim (p - p_c)^\beta, \quad (16.1)$$

где $0,3 \leq \beta \leq 0,4$. Величина p играет роль, аналогичную той, которую играет температура при фазовых переходах, а величина $\mathcal{P}(p)$ аналогична, например, намагниченности. Аналогию с термодинамическими системами можно развить и дальше, вводя для задач протекания функции, подобные свободной энергии, восприимчивости и т. д. Этой аналогией можно воспользоваться для описания критического поведения системы вблизи порога протекания. Именно, можно предположить, что и в задачах протекания поведение соответствующих величин описывается степенными функциями от $p - p_c$, и ввести критические индексы.

Важную роль при изучении критического поведения играет корреляционная функция, вводимая для задач протекания по аналогии с теорией фазовых переходов [51]. В качестве примера рассмотрим задачу связей для регулярной решетки. Введем для любых двух узлов, расположенных в точках \mathbf{x} и \mathbf{x}' , величину $\Delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, равную единице, если оба узла принадлежат одному и тому же конечному кластеру, и равную нулю в противном случае. Корреляционная функция $G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', p)$ может быть получена усреднением величины $\Delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ по всем узлам или по ансамблю конфигураций связей при заданном $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$; она характеризует средний размер кластеров конечных размеров при

заданном ρ . Из определения $G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \rho)$ видно, что функция $G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \rho) = G(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, \rho)$ убывает при $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \rightarrow \infty$; корреляционный радиус L_c определяет то характерное расстояние, на котором существенно убывает корреляционная функция. Как и в теории фазовых переходов, корреляционный радиус расходится при $\rho \rightarrow \rho_c$:

$$L_c \sim |\rho - \rho_c|^{-\nu}. \quad (16.2)$$

Здесь ν — критический показатель, который, согласно численным расчетам, близок к единице ($\nu = 0,83 \div 1,00$).

Для континуальных задач протекания роль величины ρ играет доля классически доступного пространства ν (15.3), а роль параметра порядка — доля классически доступного пространства, занятого областью инфинитного движения. И в этом случае можно ввести корреляционную функцию и корреляционный радиус, расходящийся при приближении к порогу протекания ν_c . Еще один критический показатель характеризует поведение проводимости неоднородной системы в области $E > E_c$. Если для простоты считать локальную проводимость в областях $V(\mathbf{x}) > E$ постоянной, а в областях $V(\mathbf{x}) < E$ равной нулю, то в окрестности порога протекания

$$\sigma(\nu) \sim (\nu - \nu_c)^t. \quad (16.3)$$

Здесь критический индекс t , согласно сказанному в § 15, отличается от критического индекса β , характеризующего поведение функции $\mathcal{P}(\rho)$. Подчеркнем, что в непосредственной окрестности порога протекания туннелирование сквозь классически недоступные области может привести к заметным отклонениям от формулы (16.3).

Отметим, что, как и в теории фазовых переходов, различные критические индексы оказываются связанными между собой рядом соотношений. Последние можно установить, пользуясь гипотезой масштабной инвариантности, согласно которой корреляционный радиус L_c есть наибольшая из характерных длин задачи и единственная длина, определяющая критическое поведение. Обоснование этой гипотезы и применение метода ренормализационной группы для задач протекания сталкиваются с трудностями, аналогичными тем, которые встречаются в теории фазовых переходов [55, 56].

Информация о критическом поведении корреляционного радиуса, проводимости, зависящей от энергии, и т. д. позволяет более полно описать свойства системы. В частности, в задаче о прыжковой проводимости вдоль тонких пленок знание крити-

ческого поведения корреляционного радиуса позволяет описать размерные эффекты, возникающие в условиях, когда толщина образца ω становится меньше корреляционного радиуса L_c даже при $\omega > r_h$ (Б. И. Шкловский, 1975). Аналогичные эффекты могут иметь место и при изменении толщины проводящей области электрическим полем (И. П. Звягин, 1977). Более подробное рассмотрение эффектов, основанных на описании критического поведения характерных величин в задачах протекания, выходит, однако, за рамки этой книги.

МЕЖДУЗОННЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

§ 1. Общие соотношения. Роль случайного поля

Изучение междузонных оптических переходов в кристаллических полупроводниках принадлежит к числу важнейших методов исследования их зонной структуры. Выясним, какую информацию об энергетическом спектре вещества дают аналогичные опыты с неупорядоченными полупроводниками.

Как известно из электродинамики, коэффициент поглощения света в изотропной среде (или в кубическом кристалле) дается выражением

$$\alpha(\omega) = \frac{2\omega}{c} \left\{ -\frac{\epsilon_1}{2} + \sqrt{\frac{\epsilon_1^2}{4} + \left[\frac{2\pi}{\omega} \operatorname{Re} \sigma(\omega) \right]^2} \right\}^{1/2}. \quad (1.1)$$

Здесь c — скорость света в пустоте, σ — комплексная электропроводность, ϵ_1 — вещественная часть диэлектрической проницаемости. В интересующих нас условиях частота ω ($\sim E_g, \text{opt}/\hbar$) такова, что выполняется неравенство

$$\omega \gg \frac{4\pi}{\epsilon_1} \operatorname{Re} \sigma(\omega). \quad (1.2)$$

При этом формула (1.1) принимает более простой вид*):

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi}{c \sqrt{\epsilon_1}} \operatorname{Re} \sigma(\omega). \quad (1.3)$$

Вместо коэффициента поглощения часто пользуются связанной с ним величиной — мнимой частью диэлектрической проницаемости $\epsilon_2(\omega)$. Поскольку комплексная диэлектрическая проницаемость системы электронов связана с комплексной электропроводностью $\sigma = \sigma_1 + i\sigma_2$ соотношением

$$\epsilon = \frac{4\pi i}{\omega} \sigma,$$

мы имеем, с учетом (1.3),

$$\epsilon_2 = \frac{4\pi}{\omega} \sigma_1 = \frac{c \sqrt{\epsilon_1}}{\omega} \alpha. \quad (1.4)$$

*) В указанных выше условиях $\epsilon_1(\omega) > 0$.

Эта величина может оказаться более удобной для исследования, так как она не содержит показателя преломления $\sqrt{\epsilon_1}$. Последний, как и ϵ_2 , может изменяться как при изменении концентрации носителей заряда, так и под действием внешних полей. В интересующих нас условиях первый из этих эффектов, видимо, не играет роли, но второй (при наличии электрического поля — см. ниже, §§ 3, 4) может оказаться существенным.

Рассмотрим прежде всего простейшую ситуацию, когда случайное поле практически отсутствует. При этом, как мы знаем, хвосты плотности состояний не возникают, и, следовательно, в спектре поглощения должна наблюдаться четкая красная граница при $\omega = E_{g, \text{opt}}/\hbar^*$. Будем также пренебрегать экситонными эффектами (последние рассматриваются ниже, в § 5,6).

Для вычисления электропроводности воспользуемся формулой (IV.11.7). С учетом (IV.11.13) мы получаем

$$\text{Re } \sigma(\omega) = \frac{\pi e^2}{3\omega\Omega} \sum_{\lambda', \lambda''} [n_F(E_{\lambda'}) - n_F(E_{\lambda''})] \times \\ \times \delta(E_{\lambda''} - E_{\lambda'} - \hbar\omega) |\langle \lambda' | \mathbf{v} | \lambda'' \rangle|^2. \quad (1.5)$$

Очевидно, при $\omega > 0$ индексы λ' и λ'' отвечают, соответственно, состояниям в валентной зоне**) и в зоне проводимости. Как правило, с большим запасом выполняется неравенство

$$E_g \gg T. \quad (1.6)$$

По этой причине в отсутствие инжекции носителей заряда можно считать

$$n_F(E_{\lambda'}) \approx 1, \quad n_F(E_{\lambda''}) = 0. \quad (1.7)$$

В случае кристаллического полупроводника индексы λ' и λ'' содержат квазиимпульсы электронов. При этом матричный элемент скорости может быть отличен от нуля лишь при сохранении квазиимпульса, и формула (1.5) приводит к обычному выражению для коэффициента поглощения при прямых переходах [3]. С другой стороны, в отсутствие дальнего порядка компоненты квазиимпульса, как мы знаем, уже не являются хорошими квантовыми числами (этот факт не связан с наличием или отсутствием случайного поля). При этом уже нет оснований считать, что квадрат модуля матричного элемента $|\langle \lambda' | \mathbf{v} | \lambda'' \rangle|^2$ будет особенно велик или особенно мал при каких-то специаль-

*) В этой главе электрическая ширина запрещенной зоны не фигурирует. Поэтому в дальнейшем мы будем писать просто E_g вместо $E_{g, \text{opt}}$.

**) Для краткости и единообразия обозначений мы пользуемся «электронной» нормировкой энергии, говоря о валентной, а не о дырочной зоне. Хорошо известно, однако, что это не более чем способ выразиться, и фактически используемые нами понятия имеют точный многоэлектронный смысл.

ных значениях λ' и λ'' . По этой причине имеет смысл просто вынести этот матричный элемент за знак суммы, рассматривая его как некоторую постоянную C (Дж. Лэшер, Ф. Штерн, 1964). В сущности, этот прием есть не более чем применение теоремы о среднем, оправданное в силу предполагаемой плавной зависимости матричного элемента скорости от λ' и λ'' . Заметим, однако, что при этом не учитывается возможная зависимость C от содержащегося в подынтегральном выражении параметра ω . Далее, удобно ввести вспомогательное интегрирование по переменной E , вводя одновременно множитель $\delta(E_{\lambda''} - E)$. Тогда равенство (1.5) с учетом (1.7) принимает вид

$$\operatorname{Re} \sigma(\omega) \sim \frac{1}{\omega} \int dE \sum_{\lambda''} \delta(E_{\lambda''} - E) \sum_{\lambda'} \delta(E - E_{\lambda'} - \hbar\omega). \quad (1.8)$$

Здесь и в дальнейшем мы опускаем постоянный коэффициент, не влияющий на частотную зависимость электропроводности; соответственно знак равенства заменяется знаком пропорциональности. Сравнивая теперь правую часть (1.8) с выражением (I.6.11') для плотности состояний в данной зоне, получаем

$$\operatorname{Re} \sigma(\omega) \sim \frac{1}{\omega} \int dE \rho_c(E) \rho_v(E - \hbar\omega), \quad (1.9)$$

где индексы v и c отвечают, соответственно, валентной зоне и зоне проводимости. Эта формула неоднократно использовалась для обработки ряда экспериментальных данных. Переменная интегрирования E изменяется здесь (как и в (1.8)) в пределах, определяемых видом плотности состояний. Именно, по определению понятия «разрешенная зона» $\rho_c(E) \neq 0$ при $E \geq E_c$, а $\rho_v(E - \hbar\omega) \neq 0$ при $E - \hbar\omega \leq E_v \equiv E_c - E_g^*$ (напомним, что мы пользуемся электронной нормировкой энергии: E_v есть верхний край валентной зоны). Таким образом,

$$E_c \leq E \leq \hbar\omega + E_c - E_g. \quad (1.10)$$

Непосредственно видно, что выражение (1.9) (а с ним и коэффициент поглощения $\alpha(\omega)$) может быть отлично от нуля, лишь если выполняется условие (I.5.11). На основании третьей теоремы о корреляции этого, разумеется, и следовало ожидать. Заметим, однако, что простая связь типа (1.9) отнюдь не носит общего характера. Действительно, помимо гипотезы о примерном постоянстве матричного элемента скорости, мы сделали еще два фундаментальных предположения:

- а) справедлива модель невзаимодействующих квазичастиц;
- б) случайное поле отсутствует.

* В рассматриваемой системе случайное плавное искривление зон отсутствует, а оптическая и электрическая ширины запрещенной зоны совпадают.

Отказавшись от предположения а), мы не смогли бы заменить вершинную часть единицей в формуле (II.13.6). При этом переход от общего выражения (II.13.5) к более простому (IV.11.7) был бы невозможен.

Отказавшись от предположения б), мы должны были бы поставить в (1.5), (1.8) и (I.6.11') знаки усреднения. При этом факторизация подынтегрального выражения в (1.8) была бы, вообще говоря, невозможна, ибо среднее значение от произведения не обязано совпадать с произведением средних. Кроме того, предположение о практическом постоянстве величины $|\langle \lambda' | \hat{v} | \lambda'' \rangle|^2$ при наличии случайного поля также представляется менее оправданным.

В условиях применимости формулы (1.9) частотная зависимость коэффициента поглощения определяется видом двух плотностей состояний. Положим для ориентации (Я. Тауц, К. Григоровичи, А. Ванку, 1966)

$$\begin{aligned} \rho_c(E) &\sim \sqrt{E - E_c} \theta(E - E_c), \\ \rho_v(E - \hbar\omega) &\sim \sqrt{\hbar\omega - E - E_g + E_c} \theta(\hbar\omega - E - E_g + E_c), \end{aligned} \quad (1.11)$$

где θ — ступенчатые функции*).

Подставляя выражения (1.11) в правую часть (1.9) и выполняя интегрирование, легко находим

$$\alpha(\omega) \sim \frac{(\omega - \omega_0)^2}{\omega} \theta(\hbar\omega - E_g), \quad (1.12)$$

где

$$\omega_0 = E_g/\hbar. \quad (1.13)$$

Это есть не что иное, как экспериментально полученное соотношение (I.3.5).

Независимо от явного вида плотности состояний из формулы (1.9) сразу вытекает необходимость размытия особенностей Ван Хофа в неупорядоченных полупроводниках. Действительно, возможные сингулярности коэффициента поглощения связаны с законом сохранения квазиимпульса. В отсутствие такового правая часть (1.9) есть гладкая функция. Это иллюстрируется, в частности, и формулой (1.12): вместо корневой особенности при $\omega \rightarrow \omega_0$ здесь имеет место обращение в нуль по параболическому закону. Вывод о «размазке» особенностей Ван Хофа согласуется с указанными в § I.3 экспериментальными данными.

*) Разумеется, таким путем можно получить лишь ориентировочную оценку — использование формул (1.11) у краев зон, вообще говоря, не обосновано.

С другой стороны, применение формулы (1.9) для описания коэффициента поглощения в области «хвоста» ($\omega < \omega_0$) было бы, вообще говоря, не оправдано. По-видимому, есть случаи, когда аппроксимация такого типа имеет известный смысл, но это каждый раз нуждается в специальном доказательстве. Известны также и случаи, когда эта формула дает заведомо не правильный результат (см. ниже, §§ 3, 4).

Обратимся теперь к полупроводникам со случайным полем. Общие соотношения (1.1)—(1.4), конечно, остаются в силе и здесь. Однако пользоваться формулой (1.5) теперь, видимо, не совсем удобно (хотя в принципе и можно), ибо фигурирующие в ней матричные элементы скорости могут довольно чувствительно зависеть от вида случайной потенциальной энергии $U(x)$. По этой причине может быть целесообразно выбрать представление, базисные функции которого не зависели бы от случайного поля. Это всегда можно сделать, так как функции Грина, через которые выражается комплексная электропроводность, представляют собой шпуры некоторых матриц [14]. Следовательно, результаты вычислений с ними не зависят от выбора представления. В теории сильно легированных полупроводников роль такого базиса естественно исполняли блоховские волновые функции задачи о соответствующем беспримесном кристалле. В общем случае удобно выбрать в качестве базисных блоховские функции вспомогательной задачи об «идеальном материале» (§ II.1, II.8). Интересуясь, далее, не слишком «глубоким» хвостом, мы можем воспользоваться методом эффективной массы [18], после чего задача сводится к вычислению правой части (1.5) или (1.8) в координатном представлении. Пренебрегая по-прежнему корреляционными эффектами и взаимодействием носителей заряда с фононами, мы получаем тогда [35, 37]

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{32\pi^2 e^2 \Gamma}{\hbar \omega^2 \Omega} \int dx \int dx' \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' [n_F(\omega' - \omega) - n_F(\omega')] \times \\ \times \langle \text{Im } G_r^v(x, x'; \omega' - \omega) \text{Im } G_r^c(x', x; \omega') \rangle. \quad (1.14)$$

Здесь

$$\Gamma = 1/3 \left| \int dx u_c^*(x) (\hbar/im_0) \nabla u_v(x) \right|^2, \quad (1.15)$$

u_c и u_v — периодические части функций Блоха для соответствующих зон; как часто делается в оптике кристаллических полупроводников, принято, что зависимостью u_c и u_v от квазиволнового вектора k можно пренебречь.

Для дальнейшего необходимо вычислить фигурирующие в (1.14) функции Грина как явные функционалы от случайной потенциальной энергии $U(x)$. Это удастся сделать в рамках

квазиклассического приближения (Л. В. Келдыш, 1962; В. Л. Бонч-Бруевич, 1962; Э. Кейн, 1963).

Изложение основных идей квазиклассического метода можно найти в книге [13] и обзоре [35] (см. также Приложение XII). Здесь мы только реферлируем основные результаты.

Будем рассматривать два типа случайных полей — гладкое и кулоновское.

Характеристический функционал гладкого гауссова поля дается формулой (II.7.20), а гладкого поля общего вида — выражением (II.7.34') при дополнительных условиях

$$\int k^2 \Phi(\mathbf{k}) d\mathbf{k} < \infty, \quad \varphi_2 = \frac{\hbar^2}{4m_r} \int k^2 \Phi(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \ll \varphi_1^{3/2}, \quad (1.16)$$

где функция φ_1 дается выражением (II.7.43), а m_r обозначает приведенную эффективную массу носителей заряда.

Условия (1.16) приобретают особенно ясный смысл в случае гауссова поля, когда $\Phi(\mathbf{k})$ заменяется фурье-образом корреляционной функции Ψ (§ II.7)*). Мы имеем при этом

$$\langle (\nabla U)^2 \rangle < \infty, \quad \frac{\hbar^2}{4m_r} \langle (\nabla U)^2 \rangle \ll \langle (U^2) \rangle^{3/2}. \quad (1.17)$$

Видно, что речь идет о поле, в среднем медленно изменяющемся в пространстве, причем роль характерной длины, на которой потенциальная энергия $U(\mathbf{x})$ в среднем почти не изменяется, играет величина $[2(\sqrt{m_r}/\hbar) \langle (U^2) \rangle^{1/4}]^{-1}$.

Согласно § II.8, задача об электроне в гладком случайном поле может представить интерес в связи с изучением материалов, содержащих полумакроскопические дефекты. Последние могут возникнуть, в частности, в результате облучения.

Неравенства (1.16), (1.17) позволяют вычислять функцию Грина с помощью формального разложения аргумента экспоненциальной функции в формуле (II.XII.14) по пространственным производным потенциальной энергии. Таким путем можно рассматривать как переходы с участием дискретных уровней (если их достаточно много), так и переходы между состояниями непрерывного спектра при наличии плавного случайного искрив-

*) Рассмотрение задачи о поведении электронов в гауссовом случайном поле представляет интерес с двух точек зрения. Во-первых, это — простейший нетривиальный пример неупорядоченной системы, удовлетворяющий всем физически разумным условиям, связанным с ограниченностью флуктуаций и т.д. Во-вторых, ряд случайных полей (в том числе физически очень важное пуассоновское поле) приближенно сводится к гауссову (см. § II.7), коль скоро речь идет о не слишком больших флуктуациях потенциальной энергии электрона. Следует, однако, помнить, что в условиях, когда существенны большие флуктуации, использование представления о гауссовом поле может оказаться неоправданным. Видимо, так обстоит дело, когда речь идет о достаточно глубоких флуктуационных уровнях.

ления зон. Заметим, что в последнем случае величина $U(x)$ меняет свой смысл по сравнению с тем, который придавался ей в предыдущих параграфах: теперь это есть не истинная потенциальная энергия носителя заряда, а случайная функция $E_c(x)$ (или, для дырок, $-E_v(x)$). Изначальное случайное поле проявляется здесь косвенно — через плавное искривление зон, связанное с наличием случайного начала отсчета энергии (§ II. 12).

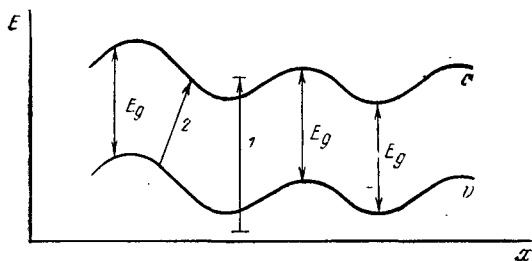


Рис. 19. Искривление зон случайным полем при $U_c(x) = U_v(x)$. 1 — оптический переход в классическом приближении (возможен лишь при $\hbar\omega \geq E_g$); 2 — оптический переход с учетом квантовых поправок (возможен и при $\hbar\omega < E_g$).

Следует различать два вида гладких случайных полей в соответствии с тем, зависит или не зависит флуктуация потенциальной энергии электрона от номера зоны. В последнем случае случайное поле одинаковым образом сдвигает дно зоны проводимости и потолок валентной зоны (рис. 19):

$$U_c(x) = U_v(x). \quad (1.18a)$$

Локальное значение ширины запрещенной зоны при этом не изменяется. Соответственно в чисто классическом приближении оптические переходы происходят так же, как и в отсутствие случайного поля (в частности, энергия поглощаемого или испускаемого фотона не должна быть меньше E_g). Следовательно, учет квантовых поправок здесь необходим принципиально. Как видно из рис. 19, они действительно могут привести к появлению хвоста коэффициента поглощения. Происхождение его очевидно: это есть просто эффект Келдыша — Франца в гладком случайном поле. В случае

$$U_c(x) \neq U_v(x) \quad (1.18б)$$

флуктуации потенциальной энергии электрона влекут за собой и флуктуации ширины запрещенной зоны. При этом хвост коэффициента поглощения появляется уже в чисто классическом приближении (рис. 20).

Соответствующий характеристический функционал кулоновского поля имеет вид (II.7.32), причем фигурирующая там потенциальная энергия V_a дается формулой (II.7.31). Поле этого

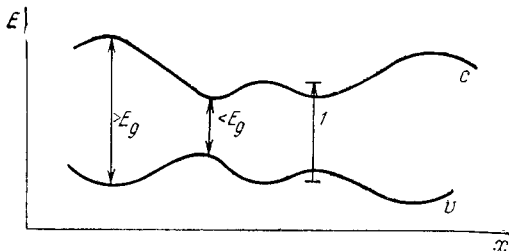


Рис. 20. Искривление зон случайным полем при $U_c(x) \neq U_v(x)$. I — оптический переход в классическом приближении (возможен и при $\hbar\omega < E_g$).

типа представляет интерес, прежде всего, для теории сильно легированных полупроводников и халькогенидных стекол.

§ 2. Поглощение света в гладком гауссовом случайном поле

Рассмотрение междузонных переходов при наличии **гладкого** случайного поля удобно производить порознь для двух случаев, указанных в § 1:

А) $U_c(x) = U_v(x)$ и Б) $U_c(x) \neq U_v(x)$.

А) *Одинаковое искривление зон* *): $U_c(x) = U_v(x)$. Как мы видели в § 1, в данном случае принципиально необходим учет квантовых поправок. Вычисление одночастичных функций Грина содержится в Приложении XII. Подставляя выражения (П. XII.25) — (П. XII.27) в формулу (1.14) и учитывая, что взятие мнимой части от $G_r(\mathbf{R}, \mathbf{r}; \omega)$ эквивалентно замене

$i \int_0^{\infty} ds(\dots) \rightarrow \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} ds(\dots)$ в интегральном представлении (П. XII. 25), получаем для $\varepsilon_2(\omega)$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{2e^2\Gamma\hbar}{(2\pi)^6 \omega^2\Omega} \left\langle \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \int_{-\infty}^{\infty} ds \int_{-\infty}^{\infty} ds' \int d\mathbf{k} \int d\mathbf{k}' \times \right. \\ \left. \times [n_F(\omega' - \omega) - n_F(\omega')] \exp \{is[\hbar\omega' - E_c(\mathbf{k}) - U(\mathbf{R})] + \right. \\ \left. + i\mathbf{k}\mathbf{r} + \varphi_c(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{k}, s) + is'[\hbar\omega' - \hbar\omega - E_v(\mathbf{k}') - U(\mathbf{R})] - \right. \\ \left. - i\mathbf{k}'\mathbf{r} + \varphi_v(\mathbf{R}, -\mathbf{r}, \mathbf{k}', s')\} \right\rangle. \quad (2.1)$$

*) Так обстоит дело, например, в случае полей электростатической природы (мы употребляем термин «электростатическая» в узком смысле, исключая взаимодействие типа потенциала деформации).

Множественный интеграл в правой части (2.1) вычисляется следующим образом.

а) Возьмем интеграл по ω' , принимая во внимание условия (1.7), в которых λ' и λ'' относятся, соответственно, к валентной зоне и к зоне проводимости. В Приложении XIII доказывается, что в таких условиях

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' [n_F(\omega' - \omega) - n_F(\omega')] \exp[i(s + s') \hbar \omega'] \approx \frac{2\pi}{\hbar} \delta(s + s'). \quad (2.2)$$

Интеграл по s' в формуле (2.1) теперь легко берется. При этом сама потенциальная энергия $U(\mathbf{R})$ вообще выпадает. В согласии с рассуждениями § 1, остаются лишь квантовые поправки, связанные с производными $U(\mathbf{R})$ по координатам.

б) Выполним усреднение по случайному полю, т. е. вычислим выражение

$$A \equiv \langle \exp[\varphi_c(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{k}, s) + \varphi_v(\mathbf{R}, -\mathbf{r}, \mathbf{k}', -s)] \rangle. \quad (2.3)$$

Удобно привести экспоненту к виду линейного дифференциального оператора, действующего на $U(\mathbf{R})$. Это легко достигается путем введения вспомогательного интегрирования, линеаризующего квадратичный по градиенту случайного поля член в экспоненте в (2.3):

$$\begin{aligned} \exp \left\{ -i \frac{s^3 \hbar^2}{24m_r} (\nabla_{\mathbf{R}} U)^2 \right\} &= \\ &= \frac{1}{\pi^{3/2}} \int d\mathbf{q} \exp \left\{ -q^2 - (\mathbf{q}, \nabla_{\mathbf{R}} U) \left(\frac{|s|^3 \hbar^2}{6m_r} \right)^{1/2} \exp \left(-i \frac{\pi}{4} \text{sign } s \right) \right\}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Мы объединили здесь слагаемые $(\nabla_{\mathbf{R}} U)^2$ из φ_c и φ_v в выражении (2.3) и ввели приведенную эффективную массу

$$\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_v}. \quad (2.5)$$

Теперь легко выполнить усреднение с помощью формул (II.7.8), (II.7.20) и (II.XII.32). Оставляя, в духе принятого приближения, лишь члены порядка до \hbar^2 включительно, мы получаем

$$A = A(s) = \left[1 + i \frac{s^3 \hbar^2 \psi_2}{36m_r} \right]^{-3/2}. \quad (2.6)$$

Здесь $2\psi_2/e^2$ — средний квадрат напряженности случайного поля (II.XII.1). Заметим, что из формулы (2.6) выпал аргумент \mathbf{R} , чего и следовало ожидать в макроскопически однородной системе.

в) Подставим (2.3) в (2.1) и вычислим интегралы по \mathbf{R} и по \mathbf{r} . Первый из них дает просто множитель Ω и сокращается с таким же множителем в знаменателе (2.1).

Второй дает δ -функцию $\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, после чего сразу вычисляется интеграл по \mathbf{k}' . При этом используется соотношение

$$E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}) = E_g + \hbar^2 k^2 / 2m_r. \quad (2.7)$$

Таким образом, находим окончательно

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{2e^2\Gamma}{(2\pi)^2\omega^2} \int_{-\infty}^{\infty} ds \int d\mathbf{k} \frac{\exp[-is(E_g - \hbar\omega + \hbar^2 k^2 / 2m_r)]}{(1 + is^3 \hbar^2 \psi_2 / 36m_r)^{3/2}}. \quad (2.8)$$

Заметим, что комплексную междузонную диэлектрическую проницаемость можно найти из формулы (2.8), заменяя интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} ds(\dots)$ на $2i \int_0^{\infty} ds(\dots)$. Действительно, легко убедиться, что определенная таким образом функция аналитична в верхней полуплоскости комплексной переменной ω . Но тогда на действительной оси ω действительная и мнимая части ее связаны соотношениями Крамерса — Кронига, чем и доказывается сделанное выше утверждение.

Рассмотрим асимптотическую область

$$S \cdot (E_g - \hbar\omega) \gg 1, \quad (2.9)$$

где

$$S = (\hbar^2 \psi_2 / 36m_r)^{-1/3}. \quad (2.10)$$

Тогда равенство (2.8) дает экспоненциальный хвост коэффициента поглощения, простирающийся в запрещенную зону (В. Л. Бонч-Бруевич, 1970):

$$\varepsilon_2(\omega) = \bar{A} \exp[S \cdot (\hbar\omega - E_g)]. \quad (2.11)$$

Величина \bar{A} в формуле (2.11) содержит постоянные и более слабые частотные зависимости, чем экспонента.

Видим, что теория действительно объясняет правило Урбаха (I.3.1). Тот же результат получается и в негауссовом гладком поле [35]. Таким образом, результат (2.11) не связан с какими-либо частными модельными представлениями. Как и следовало ожидать (§ 1), эффект оказывается существенно квантовым: согласно (2.10) характерная энергия $\bar{E} = S^{-1}$ обращается в нуль при $\hbar \rightarrow 0$. Хвост коэффициента поглощения при этом исчезает.

Отметим, что выражение (2.11), вообще говоря, отнюдь не совпадает по виду с плотностью состояний электронов или дырок, равно как и с комбинированной плотностью состояний. Так,

в гладком гауссовом случайном поле хвост плотности электронных состояний при $|E - E_c| \gg \psi_1^{1/2}$ описывается формулой (III.7.14) (в которой энергия E отсчитывается от E_c). В силу условия (1.17) правая часть (III.7.14) убывает с ростом $|E - E_c|$ медленнее, нежели функция (2.11) с ростом $\hbar\omega - E_g$. Это означает, что между плотностью состояний и коэффициентом поглощения света действительно имеется корреляция, соответствующая третьей из теорем § I.5, однако это — в данном случае — только корреляция, а не явная связь. В соответствии со сказанным в § I.5, явный вид плотности состояний в оптических исследованиях в общем случае не воспроизводится (хотя иногда это и возможно — см. ниже, п. Б)).

Из сказанного следует, что попытка оценить плотность состояний в запрещенной зоне по оптическим данным, обработанным, например, с помощью формул типа (1.12), может дать весьма заниженный результат.

Далее, сделаем еще три замечания.

Во-первых, согласно (2.10) выражение (2.11) не аналитично по «константе связи электрона со случайным полем», роль которой в данном случае играет величина $2\psi_2$. Следовательно, этот результат нельзя получить ни в каком конечном порядке теории возмущений.

Во-вторых, случайное поле входит в выражение (2.6) так, как если бы мы с самого начала оставили только квантовую поправку, связанную с напряженностью случайного поля (она дается тем выражением, которое подвергалось линейаризации (см. формулу (2.4))). Иначе говоря, в принятых приближениях

$$A(s) = \langle \exp \{ -is^3 \hbar^2 (\nabla U)^2 / 24m_r \} \rangle. \quad (2.12)$$

Но тогда «полное» усреднение с функционалом $\mathcal{P}[U]$ должно быть эквивалентно усреднению с некоторой функцией распределения напряженностей случайного поля ξ_i . Эта функция определяется по заданному функционалу $\mathcal{P}[U]$ с помощью равенства

$$P(\xi_i) = \int \delta U \mathcal{P}[U] \delta(e\xi_i - \nabla U). \quad (2.13)$$

Вычисляя функциональный интеграл в (2.13), получаем для гауссова функционала $\mathcal{P}[U]$ (Б. Эссер, 1972)

$$P(\xi_i) = (3e^2/2\pi\psi_2)^{3/2} \exp \{ -3e^2\xi_i^2/2\psi_2 \}. \quad (2.14)$$

Выполняя усреднение в формуле (2.12) с функцией $P(\xi_i)$ (2.14), получаем опять выражение (2.6). Таким образом, формула (2.8)

эквивалентна представлению

$$\varepsilon(\omega) = \int d\xi_i P(\xi_i) \varepsilon_{KF}(\omega, \xi_i), \quad (2.15)$$

где

$$\begin{aligned} \varepsilon_{KF}(\omega, \xi_i) = \\ = \frac{e^2 \Gamma_i}{\pi^2 \omega^2} \int_0^\infty ds \int dk \exp \left\{ -is \left(E_g - \hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} \right) - i \frac{s^3 \hbar^2 (e\xi_i)^2}{24m_r} \right\} \end{aligned} \quad (2.16)$$

есть интегральное представление для диэлектрической функции при наличии постоянного электрического поля (эффект Келдыша — Франца).

Возможность представить результат в таком виде не должна вызывать удивления: в принятом выше приближении мы отбросили слагаемые, содержащие вторые производные от потенциальной энергии $U(\mathbf{r})$.

Выражение (2.15), с учетом (2.14) и (2.16), эквивалентно предложенному ранее Д. Редфилдом (1963) и Дж. Д. Доу и Д. Редфилдом (1973 г.) на основании соображений полуинтуитивного характера. Подчеркнем, однако, что оно оказывается справедливым только для гладкого случайного поля. Для поля, созданного совокупностью хаотически распределенных в пространстве заряженных центров, представление (2.15) (с сохранением точного физического смысла величины $P(\xi_i)$) оказывается невозможным (Б. Эссер, 1973).

В-третьих, рассмотрим область частот, заметно превышающих оптическую ширину запрещенной зоны:

$$S \cdot (\hbar\omega - E_g) \gg 1. \quad (2.17)$$

При этом мы получим из (2.8)

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{A}{\omega^2} \sqrt{\hbar\omega - E_g}. \quad (2.18)$$

Такая связь ε_2 с частотой характерна для прямых разрешенных переходов в кристаллических полупроводниках — в отличие от часто наблюдаемой в аморфных и стеклообразных материалах квадратичной зависимости (I.3.5). Причина того, что формула (2.8) не описывает последнюю зависимость, заключается в сравнительно слабом рассеянии электронов в гладком поле: в условиях (2.17) силы, действующие со стороны такого поля, почти не снимают закон сохранения квазиимпульса и практически не изменяют вида плотности состояний глубоко в разрешенных зонах. Это позволяет обычным образом ввести комбинированную плотность состояний, вид которой и воспроизводится выраже-

нием (2.18). Можно, однако, построить полуфеноменологическую теорию (Б. Эссер, Р. Кайпер, П. Кляйнерт, 1976), единым образом описывающую обе зависимости — асимптотику (2.11) и пороговую формулу (I.3.5). Для этой цели заменим плотности состояний ρ_c и ρ_v в (1.9) локальными их значениями (II.13.2), введя в аргументы функций Грина индексы c, v . Тем самым неявно принимаются во внимание возможные коротковолновые флуктуации случайного поля (они могут иметь и другую природу, нежели длинноволновые). Естественно, результат надо будет еще дополнительно усреднить по плавным флуктуациям, которые как раз и описываются моделью гладкого поля, использованной выше в этом параграфе. Таким образом, вместо (1.9) мы получим

$$\operatorname{Re} \sigma(\omega) \sim \frac{1}{\omega} \int dE \langle \rho_c(\mathbf{x}, E) \rho_v(\mathbf{x}, E - \hbar\omega) \rangle_{\text{гл}}; \quad (2.19)$$

символ $\langle \dots \rangle_{\text{гл}}$ означает здесь усреднение лишь по гладкому полю. Это поле мы будем для простоты считать гауссовым (в асимптотической области это ограничение несущественно).

В рамках принятой модели плотности состояний ρ_c и ρ_v надо вычислять с помощью функций Грина, полученных в Приложении XII. Производя вычисления в полной аналогии с предыдущими выкладками, описанными в этом параграфе, мы получаем из (2.19) (в соответствующих интервалах частот) как экспоненциальный хвост (2.11), так и квадратичный закон (I.3.5).

Формулы (2.8), (2.11) не содержат в явном виде температурных эффектов. Это есть следствие условий (1.7) и пренебрежения взаимодействием носителей заряда с фонами. Очевидно, такая постановка задачи имеет смысл при достаточно низких температурах (в частности, при $T < \bar{E} = S^{-1}$). С другой стороны, при $T \gg \bar{E}$ влияние статического случайного поля становится не очень существенным и главную роль в образовании хвоста коэффициента поглощения играют многофонные переходы (А. С. Давыдов, 1968).

Б) *Неодинаковое искривление зон* *): $U_c(\mathbf{x}) \neq U_v(\mathbf{x})$. В этом случае говорят о флуктуациях ширины запрещенной зоны. Локальная оптическая ширина запрещенной зоны есть

$$E_g(\mathbf{x}) = U_c(\mathbf{x}) - U_v(\mathbf{x}). \quad (2.20)$$

Она различна в разных частях образца. Как отмечалось в § 1, здесь может быть достаточна чисто классическая трактовка:

*) Так может обстоять дело, например, в результате зависимости псевдопотенциала от энергии (§ II.8) или при рассмотрении случайного поля, обусловленного потенциалом деформации.

квантовыми поправками можно пренебречь, коль скоро удовлетворяется неравенство

$$\left[\frac{\hbar^2}{m_c} \langle (\nabla U_c)^2 \rangle + \frac{\hbar^2}{m_v} \langle (\nabla U_v)^2 \rangle \right]^{1/3} \ll [\langle (U_c - U_v)^2 \rangle]^{1/2}, \quad (2.21)$$

т. е. коль скоро достаточно велики флуктуации ширины запрещенной зоны (правая часть неравенства (2.21)). В этом случае в функции Грина (П. XII.25) можно положить $\varphi_c = \varphi_v = 0$. Подставляя функции Грина, вычисленные в этом приближении, в формулу (1.14) и выполняя интегрирование по ω' (по-прежнему в условиях (1.7)), мы получаем

$$\begin{aligned} \varepsilon_2(\omega) &= \\ &= \frac{2e^2\Gamma}{(2\pi)^2\omega^2} \int_{-\infty}^{\infty} ds \int dk B(s) \exp[-is(E_g - \hbar\omega + \hbar^2 k^2/2m_r)], \end{aligned} \quad (2.22)$$

где

$$B(s) = \langle \exp[-is(U_c(\mathbf{R}) - U_v(\mathbf{R}))] \rangle. \quad (2.23)$$

Для гауссова функционала $\mathcal{P}[U_c, U_v]$ усреднение в (2.23) выполняется по формуле (П. XII.35) и выражается через корреляционные функции (П. XII.36). Таким путем мы получаем

$$B(s) = \exp\left(-\frac{s^2}{2} \psi_1^- \right), \quad (2.24)$$

где

$$\psi_1^- = \psi_{1cc} + \psi_{1vv} - 2\psi_{1cv} \quad (2.25)$$

и

$$\psi_{1ll'} = \Psi_{ll'}(0). \quad (2.26)$$

В частности, при $U_c = U_v$ мы имеем $\Psi_{cc} = \Psi_{vv} = \Psi_{cv}$ и $\psi_1^- = 0$. С другой стороны, для статистически независимых случайных полей $\Psi_{cv} = 0$, т. е. $\psi_1^- = \psi_{1cc} + \psi_{1vv}$.

В асимптотической области, т. е. при

$$(E_g - \hbar\omega)/(\psi_1^-)^{1/2} \gg 1, \quad (2.27)$$

вычисление интеграла в (2.22) дает (Е. В. Бурцев, 1972)

$$\varepsilon_2(\omega) = C \exp[-(E_g - \hbar\omega)^2/2\psi_1^-]. \quad (2.28)$$

Множитель C здесь представляет собой сравнительно медленно меняющуюся функцию частоты. Видим, что в этом случае вид функции ε_2 на хвосте в основном воспроизводит ход плотности состояний.

Заметим, что функцию $B(s)$ (см. (2.24)) можно представить в виде

$$B(s) = \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x) e^{-isx}. \quad (2.29)$$

Мы ввели здесь функцию распределения для флуктуаций ширины запрещенной зоны

$$P(x) = [2\pi(\psi_1^-)^{1/2}]^{-1/2} \exp(-x^2/2\psi_1^-). \quad (2.30)$$

Таким образом, формула (2.22) эквивалентна представлению (Д. Л. Декстер, 1958)

$$\varepsilon(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x) \varepsilon^{(0)}(\omega, E_g + x), \quad (2.31)$$

где $\varepsilon^{(0)}(\omega, E_g + x)$ есть диэлектрическая проницаемость кристалла с шириной запрещенной зоны $E_g + x$.

Как и в случае А), при достаточно большой частоте света, когда

$$(\hbar\omega - E_g)/(\psi_1^-)^{1/2} \gg 1, \quad (2.32)$$

мы получаем из (2.22) зависимость (2.18). Причины этого — те же, что и раньше, и здесь также можно использовать указанный в п. А) полуфеноменологический подход, основанный на формуле (2.19). При этом асимптотическая формула (2.28) остается в силе, а в области $\hbar\omega \gg E_g$ вновь получается выражение (I.3.5).

Рассмотренный выше расчет был основан на простейшей — изотропной и параболической — форме вспомогательного закона дисперсии и на повсеместно использовавшемся нами неравенстве $\psi_1^{1/2} \ll E_g$. Такой подход, обладая достаточно широкой сферой применимости, может все же оказаться не вполне удовлетворительным в применении к неупорядоченным узкозонным полупроводникам. К числу последних относятся некоторые сильно легированные материалы (например, InSb), неупорядоченные сплавы ($\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ и др.).

Можно обобщить теорию на случай узкозонного полупроводника, описываемого (в отсутствие примесей и иных структурных дефектов) моделью Кейна (В. А. Федирко, 1974).

Здесь следует различать две возможности:

$$\text{а) } \bar{E} \equiv S^{-1} \ll E_g \leq \psi_1^{1/2} \quad (2.33a)$$

и

$$\text{б) } E_g \leq \bar{E} \equiv S^{-1} \ll \psi_1^{1/2}. \quad (2.33б)$$

В случае а) ширина запрещенной зоны оказывается слишком малой, чтобы могла реализоваться асимптотическая форма хвоста плотности состояний (П. XII.38): вполне вероятно возникновение флуктуационных потенциальных ям с глубиной порядка $E_g/2$, и плотность состояний лишь довольно медленно убывает по мере углубления в запрещенную зону. В результате потолок валентной зоны может оказаться выше уровня Ферми. Это приводит к образованию в пространстве областей с вырожденным дырочным газом; в пределах названных областей возможны оптические переходы между зонами тяжелых и легких дырок. Очевидно, поглощение такого типа не имеет порога, и $\alpha(\omega)$ оказывается сравнительно медленно изменяющейся функцией частоты. С другой стороны, поглощение электромагнитных волн, связанное с переходами между зоной проводимости и зоной тяжелых дырок, в условиях (2.33а) по-прежнему описывается формулами (2.8), (2.11). То же относится и к переходам между зоной проводимости и зоной легких дырок. Однако они менее существенны ввиду сравнительной малости плотности состояний в последней зоне.

Полный коэффициент поглощения дается суммой вкладов от двух указанных механизмов. Видимо, таким путем удастся успешно интерпретировать некоторые экспериментальные данные по поглощению электромагнитного излучения в $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$.

В случае б) не может реализоваться не только асимптотика плотности состояний, но и асимптотика коэффициента поглощения (см. (2.11)). Функция $\alpha(\omega)$ оказывается здесь линейной: $\alpha \sim |\omega|$.

§ 3. Электропоглощение в гладком поле

Эффект электропоглощения состоит в изменении комплексной диэлектрической проницаемости вещества под действием постоянного и однородного электрического поля напряженности \mathcal{E} (в отсутствие постоянного тока):

$$\Delta \varepsilon(\omega, \mathcal{E}) = \varepsilon(\omega, \mathcal{E}) - \varepsilon(\omega, 0). \quad (3.1)$$

В этих условиях напряженность поля, действующего на электрон, есть $\mathcal{E} + \frac{1}{e} \nabla U$, где $\frac{1}{e} \nabla U$ — напряженность внутреннего случайного поля. Строго говоря, внешнее поле могло бы изменить и статистические характеристики внутреннего. Однако в интересующих нас условиях опыта величина \mathcal{E} обычно бывает гораздо меньше $\frac{1}{e} \psi_2^{1/2}$. Это позволяет пренебречь в теории электропоглощения указанным эффектом, учитывая однородное внешнее поле просто добавлением слагаемого $e \mathcal{E} \mathbf{R}$ к потен-

циальной энергии электрона. Заметим, что внешнее поле не всегда можно рассматривать как однородное во всем образце. Неоднородность внешнего поля может быть существенной или несущественной в зависимости от соотношения между радиусом экранирования r_0 и корреляционной длиной случайного поля ξ_0 , которая может определяться и технологическими причинами. В частности, при $r_0 \gg \xi_0$ интересующие нас функции Грина можно вычислять (со всеми дальнейшими усреднениями), считая внешнее поле локально однородным.

Измерение частотной и полевой зависимости $\Delta\varepsilon$ составляет дополнительный способ получения информации об электронных состояниях в данном материале.

Вычислим в принятых выше приближениях диэлектрическую проницаемость системы электронов при наличии постоянного и однородного внешнего электрического поля. Согласно сказанному выше, соответствующая одночастичная функция Грина получается из формул (П. XII. 25) — (П. XII. 27) заменой $U(\mathbf{R})$ на $U(\mathbf{R}) + e\mathcal{E}\mathbf{R}$. Таким образом, мы приходим к выражениям (П. XII. 28) — (П. XII. 30). Подставляя их в формулу (1.14), находим интегральное представление для $\varepsilon(\omega, \mathcal{E})$.

Будем считать внешнее электрическое поле слабым и в том смысле, что оно не ведет к междузонному пробою, оставляя валентную зону заполненной, а зону проводимости — пустой. Это справедливо для полей \mathcal{E} , для которых

$$\left[\frac{\hbar^2}{m_r} (e\mathcal{E})^2 \right]^{1/3} \ll E_{g, \text{el.}} \quad (3.2)$$

Тогда интеграл от функций Ферми вычисляется, как и прежде (см. Приложение XIII), и возникающая при этом δ -функция, $\delta(s + s')$, приводит к тому, что потенциальная энергия в постоянном поле $e\mathcal{E}\mathbf{R}$ выпадает из $\varepsilon(\omega, \mathcal{E})$ (подобно тому, как $U(\mathbf{R})$ выпадает при $U_c(\mathbf{R}) = U_v(\mathbf{R})$). Далее следует различать случаи $U_c = U_v$ и $U_c \neq U_v$. Рассмотрим здесь более подробно первый из них. Поскольку дополнительные квантовые поправки, связанные с \mathcal{E} , зависят только от \mathbf{R} (см. формулы (П. XII. 29) и (П. XII. 30)), схема расчета остается такой же, как и в предыдущем параграфе (пункт А)). Надо вычислить теперь величину

$$A_{\mathcal{E}}(s) = \left\langle \exp \left\{ -i \frac{s^3 \hbar^2}{12m_r} (e\mathcal{E}, \nabla_{\mathbf{R}} U) + \varphi_c(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{k}, s) + \right. \right. \\ \left. \left. + \varphi_v(\mathbf{R}, -\mathbf{r}, \mathbf{k}', -s) \right\} \right\rangle. \quad (3.3)$$

Воспользовавшись преобразованием (2.4), мы можем выполнить усреднение в (3.3) по формуле (П. XII. 32). В результате

получаем (Б. Эссер, 1972)

$$\epsilon_2(\omega, \xi) = \frac{2e^2\Gamma}{(2\pi)^2\omega^2} \int_{-\infty}^{\infty} ds \int dk \left(1 + i \frac{s^3\hbar^2\psi_2}{36m_r}\right)^{-3/2} \times \\ \times \exp\left\{-is\left(E_g - \hbar\omega + \frac{\hbar^2k^2}{2m_r}\right) - i \frac{s^3\hbar^2(e\xi)^2}{24m_r} \left(1 + i \frac{s^3\hbar^2\psi_2}{36m_r}\right)^{-1}\right\}. \quad (3.4)$$

При $\xi = 0$ формула (3.4) переходит в (2.8). С другой стороны, при $\psi_2 = 0$ (т. е. в пренебрежении влиянием случайного поля) из формулы (3.4) получается хорошо известное выражение (2.16) для диэлектрической проницаемости кристалла в постоянном внешнем поле ξ . Далее, легко убедиться, что, подобно (2.15), выражение (3.4) можно переписать в виде

$$\epsilon(\omega, \xi) = \int d\xi_i P(\xi_i - \xi) \epsilon_{KF}(\omega, \xi_i). \quad (3.5)$$

Здесь $P(\xi_i - \xi)$ есть функция распределения напряженности гладкого гауссова поля (2.14), зависящая на сей раз от аргумента $\xi_i - \xi$. Представление (3.5) естественно обобщает прежнее представление (2.15).

Диэлектрическая проницаемость (3.5) зависит от параметра $(e\xi)^2/\psi_2$. Наиболее интересен с точки зрения влияния случайного поля на электронные состояния случай $(e\xi)^2 \ll \psi_2$ (слабое внешнее поле); в противном случае, $(e\xi)^2 \gg \psi_2$ (сильное внешнее поле), случайное поле в основном только сглаживает функцию (2.16). Разлагая правую часть (3.4) в ряд по степеням $(e\xi)^2/\psi_2$ и ограничиваясь первыми двумя членами разложения, мы получаем

$$\Delta\epsilon_2(\omega, \xi) = \frac{(-i)2e^2\Gamma}{(2\pi)^2\omega^2} \int_{-\infty}^{\infty} ds \int dk \frac{s^3\hbar^2(e\xi)^2}{24m_r} \times \\ \times \exp\left[-is\left(E_g - \hbar\omega + \frac{\hbar^2k^2}{2m_r}\right)\right] \left(1 + i \frac{s^3\hbar^2\psi_2}{36m_r}\right)^{-5/2}. \quad (3.6)$$

Очевидно, это соотношение можно переписать в виде

$$\Delta\epsilon_2(\omega, \xi) = (e\xi)^2 \frac{\partial}{\partial\psi_2} \epsilon_2(\omega, 0), \quad (3.7)$$

удобном при обработке экспериментальных результатов.

В области оптического хвоста мы получаем из (2.11) и (3.7)

$$\Delta\epsilon_2(\omega, \xi) = \frac{(e\xi)^2}{3\psi_2} S \cdot (E_g - \hbar\omega) \epsilon_2(\omega, 0). \quad (3.8)$$

Соответственно для относительного изменения $\Delta\epsilon_2/\epsilon_2$ находим

$$\frac{\Delta\epsilon_2(\omega, \xi)}{\epsilon_2(\omega, 0)} = \frac{(e\xi)^2}{3\psi_2} S \cdot (E_g - \hbar\omega). \quad (3.9)$$

Расчет функции $\varepsilon(\omega, \xi)$ можно обобщить и на случай $U_c \neq U_v$. Однако теперь, в отличие от того, что делалось в § 2, п. Б), надо принимать во внимание и квантовые поправки по случайному полю. Последние, как и раньше, могут быть малыми в смысле неравенств (2.21); однако они не обязательно малы по сравнению с поправками, обусловленными внешним электрическим полем. Как и в отсутствие электрического поля, здесь может быть интересна ситуация, когда случайное поле обусловлено потенциалом деформации. При этом $U_l(\mathbf{R}) = C_l \Delta(\mathbf{R})$, где C_l — потенциал деформации, а $\Delta(\mathbf{R})$ — относительное изменение объема. Соответствующее выражение для $\varepsilon(\omega, \xi)$ имеет вид (Б. Эссер, П. Кляйнерт, 1975)

$$\begin{aligned} \varepsilon(\omega, \xi) = & \frac{e^2 \Gamma}{\pi^2 \omega^2} i \int_0^\infty ds \int d\mathbf{k} \left[1 + i \frac{\hbar^2 s^3 \psi_{2c}}{36 m_r} \right]^{-3/2} \times \\ & \times \exp \left\{ -is \left(E_g - \hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} \right) - \frac{s^2}{2} (1 - \gamma)^2 \psi_{1c} + \right. \\ & \left. + i \frac{\hbar^2 s^3 \psi_{2c}}{8 m_r'} \left(1 - \gamma \frac{m_r'}{m_r} \right) - i \frac{\hbar^2 s^3 (e\xi)^2}{24 m_r} \left[1 + i \frac{\hbar^2 s^3 \psi_{2c}}{36 m_r} \right]^{-1} \right\}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Здесь

$$\gamma = C_v / C_c, \quad (3.11)$$

$$\frac{1}{m_r'} = \frac{1}{m_c} + \frac{\gamma^2}{m_v}, \quad (3.12)$$

а величины ψ_{1c} и ψ_{2c} относятся к случайному полю U_c . При $\gamma = 1$ мы возвращаемся к случаю одинакового искривления зон, $U_c = U_v$, и представление (3.10) переходит в (3.4). На рис. 21 представлена частотная зависимость хвоста коэффициента поглощения для разных значений параметра γ , вычисленная по формуле (3.10). Для одинакового искривления зон ($\gamma = 1$) виден экспоненциальный хвост коэффициента поглощения (2.11); с ростом флуктуаций ширины запрещенной зоны (т. е. с возрастанием величины $|\gamma - 1|$) экспоненциальный хвост (2.11) переходит в гауссов (2.28).

Из формул (3.4), (3.10) можно также вычислить спектральные зависимости $\Delta\varepsilon_1(\omega, \xi)$ и $\Delta\varepsilon_2(\omega, \xi)$ в области $\hbar\omega \sim E_g$. При этом оказывается, что в рассматриваемой области частот внутреннее случайное поле приводит к сглаживанию спектральных зависимостей, аналогичному тепловому уширению в обычном эффекте Келдыша — Франца. Флуктуации ширины запрещенной зоны приводят к дополнительной размазке спектральных зависимостей $\Delta\varepsilon_1(\omega, \xi)$ и $\Delta\varepsilon_2(\omega, \xi)$.

Исследуем теперь, как изменяются частотные зависимости коэффициента поглощения и величин $\Delta \varepsilon_1(\omega, \xi)$, $\Delta \varepsilon_2(\omega, \xi)$ при отклонении функции распределения напряженностей поля

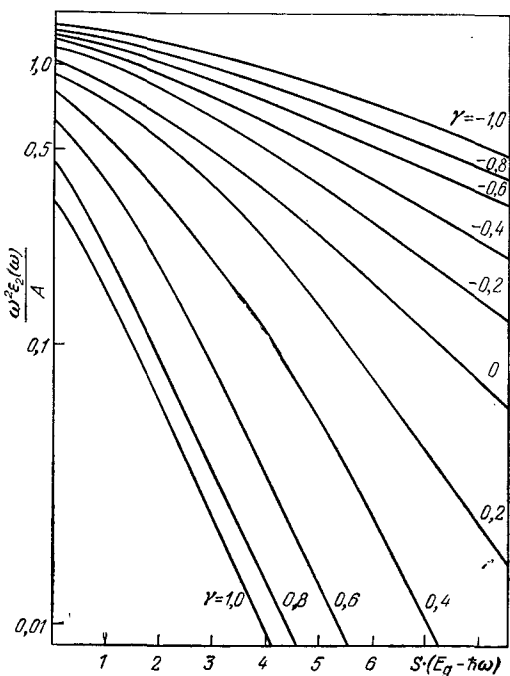


Рис. 21. Область хвоста мнимой части диэлектрической проницаемости для разных значений параметра γ (3.11). В случае $\gamma = 1$ (одинаковое искривление зон) наблюдается экспоненциальный хвост (2.11), который с возрастанием флуктуаций ширины запрещенной зоны переходит в гауссов (2.28).

$P(|\xi_i|)$ от гауссова вида. На рис. 22 представлены кривые $P(|\xi_i|)$, отличающиеся от гауссовой (последней соответствует кривая 1). Эти кривые были получены путем разложения $P(|\xi_i|)$ по полиномам Эрмита с сохранением только двух первых членов:

$$P(|\xi_i|) = \left(\frac{3e^2}{2\pi\psi_2}\right)^{3/2} e^{-x^2/2} \frac{1}{c_1} \left[1 + c_1 H_1(x) + \frac{c_2}{2} H_2(x)\right]. \quad (3.13)$$

Здесь $x = \sqrt{3} e |\xi_i| / \sqrt{\psi_2}$, $H_1(x) = 2x$, $H_2(x) = 4x^2 - 2$, а величина c_1 определяется из условия нормировки

$$\int_0^{\infty} d\xi_i 4\pi \xi_i^2 P(\xi_i) = 1.$$

На рис. 23 и 24 представлены соответствующие частотные зависимости $\omega^2 \epsilon_2(\omega)$ и $\omega^2 \Delta \epsilon_2(\omega, \xi)$, вычисленные по формулам (2.15) и (3.5) (Б. Эссер, Ф. Н. Герцог, 1975); через A обозначен несущественный постоянный множитель. Рассматривался случай слабого внешнего поля

$$\left(\rho = \frac{(e\mathcal{E})^2}{\Psi_2} \ll 1 \right);$$

как видно из сопоставления рис. 23 и 24, при изменении функции распределения случайного поля частотная зависимость коэффициента поглощения почти не меняется, в то время как $\Delta \epsilon_2(\omega, \xi)$ меняется весьма заметно, когда $P(|\xi_i|)$ отклоняется от гауссовой формы; функция $\Delta \epsilon_1(\omega, \xi)$ также чувствительна к виду $P(|\xi_i|)$. Таким образом, изучение частотных за-

висимостей $\Delta \epsilon_2(\omega, \xi)$ и $\Delta \epsilon_1(\omega, \xi)$ могло бы дать информацию о виде статистики случайного поля.

Как и в отсутствие электрического поля, мы можем уточнить расчет электропоглощения с помощью полуфеноменологического

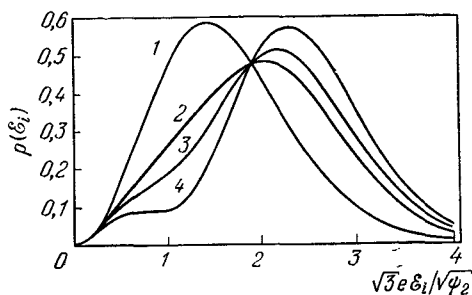


Рис. 22. Функции распределения напряженности случайного поля для разных значений коэффициентов c_1 и c_2 в (3.13). 1 — $c_1 = 0$, $c_2 = 0$ (гауссово распределение); 2 — $c_1 = -0,40$, $c_2 = 0,20$; 3 — $c_1 = -0,5$, $c_2 = 0,25$; 4 — $c_1 = -0,60$, $c_2 = 0,30$.

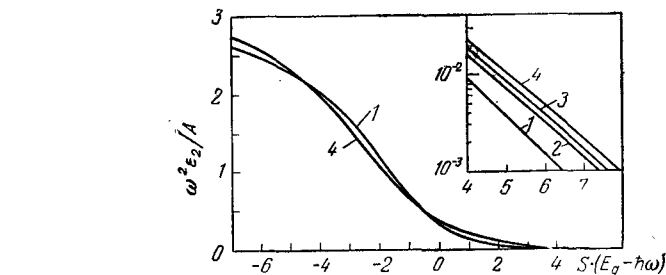


Рис. 23. Край поглощения для распределений 1 и 4 рис. 22. На врезке сверху хвосты коэффициента поглощения для распределений 1 — 4 показаны в полулогарифмическом масштабе. Видно, что частотная зависимость коэффициента поглощения почти не меняется.

приема, основанного на формуле (2.19). При этом в определение локальной плотности состояний следует включить и потенциальную энергию электрона в однородном внешнем поле, т. е. мы должны исходить из формулы (П. XII.28) для функции Грина. Вычисленные таким образом частотные зависимости $\omega^2 \Delta \epsilon_2(\omega, \xi)$

и $\Delta\epsilon_2/\epsilon_2$ в экспериментально важном случае слабого внешнего поля ($\rho = \frac{(e\xi)^2}{\psi_2} \ll 1$) представлены на рис. 25 вместе с кривой для коэффициента поглощения в области хвоста (Б. Эссер, Р. Кайпер, П. Кляйнерт, 1976). (Соотношение (3.7) остается справедливым и здесь, следует лишь под $\epsilon_2(\omega, 0)$ понимать выражение, получающееся из (2.19).) В соответствии с выражениями (3.8)

и (3.9), функция $\Delta\epsilon_2(\omega)$ характеризуется таким же экспоненциальным хвостом, как и ϵ_2 , тогда как относительное изменение $\Delta\epsilon_2/\epsilon_2(\omega)$ быстро выходит на линейную зависимость (3.9). Поскольку множители, содержащие частоту в экспоненте, — одни и те же в $\Delta\epsilon_2$ и $\epsilon_2(\omega)$, отношение этих величин определяется предэкспоненциальными множителями в коэффициенте поглощения и потому особенно трудно поддается расчету. На рис. 25 зависимость (3.9) сопоставляется с экспериментальными данными, полученными для аморфного селенида мышьяка As_2Se_3 *).

Видно, что теоретическая зависимость удовлетворительно согласуется с экспериментальной в области $\hbar\omega \sim E_g$. Однако более глубоко в запрещенной зоне экспериментальная зависимость $\Delta\epsilon_2/\epsilon_2$ оказывается не линейной, а более сложной: сначала имеет место возрастание по закону $\Delta\epsilon_2/\epsilon_2 \sim (E_g - \hbar\omega)^n$, где $n \sim 0,5 \div 0,6$, а затем, при меньших частотах, происходит выход $\Delta\epsilon_2/\epsilon_2$ на насыщение или начинается убывание с углублением в запрещенную зону.

Причины расхождения теории с опытом пока не вполне ясны. Возможно, что здесь играют роль сильно локализованные состояния, для полного описания которых квазиклассический подход недостаточен. Заметим в связи с этим, что в теории электропоглощения возникают более сложные проблемы, нежели при $\xi = 0$.

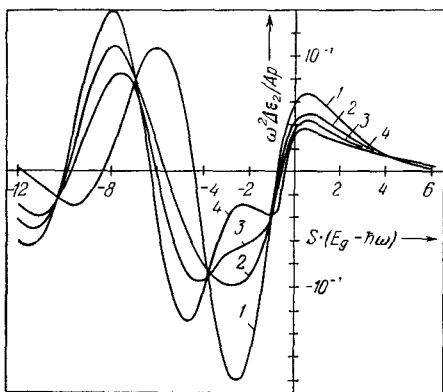


Рис. 24. Спектральные зависимости $\omega^2\Delta\epsilon_2(\omega, \xi)$ для функций распределения $P(|\xi_i|)$, указанных на рис. 22, вычислены по формуле (3.5). Видно, что спектральная зависимость чувствительна к форме функций $P(|\xi_i|)$.

*) Мазец Т. Ф., Павлов С. К. — В сб.: Труды VI Межд. конф. по аморфным и жидким полупроводникам/Под ред. Б. Т. Колонийца. — Л.: Наука, 1976, с. 260; Sussman R. S., Austin J. G., Searle T. M., там же, с. 256.

Действительно, в отсутствие внешнего электрического поля основной интерес для нас представляла частотная зависимость логарифма коэффициента поглощения в области оптического хвоста. С другой стороны, при $\xi \neq 0$ экспериментально интересны спектральная и полевая зависимости относительного изменения коэффициента поглощения света. Эти зависимости описываются отношением предэкспоненциальных множителей, фигурирующих в выражениях для ϵ_2 и $\Delta\epsilon_2$. Соответственно они более чувствительны к поведению локализованных волновых функций.

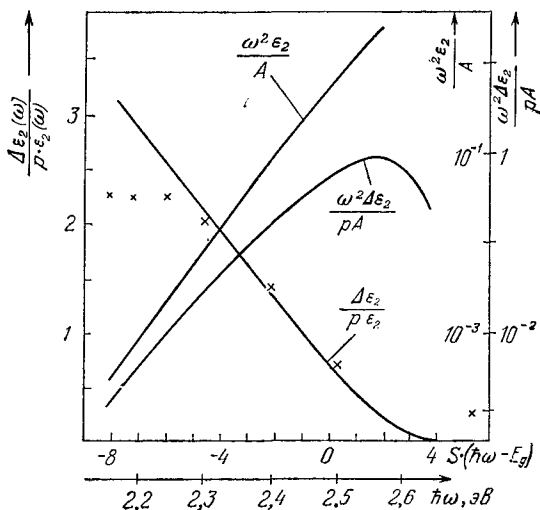


Рис. 25. Спектральные зависимости $\omega^2 \epsilon_2(\omega)$, $\omega^2 \Delta\epsilon_2(\omega, \xi)$ и $\Delta\epsilon_2(\omega, \xi)/\epsilon_2(\omega)$ в условиях полного нарушения правила отбора по квазимпульсу. Рассматривается случай слабого внешнего поля: $p = (e\xi)^2/\psi_2 \ll 1$. Крестиками указаны экспериментальные данные для аморфного As_2Se_3 , полученные при $\xi_0 = 2,5 \cdot 10^5$ В/см; $\sqrt{\psi_2} \approx 7 \cdot 10^6$ эВ/см.

Экспериментальные результаты часто интерпретируют, вводя в рассмотрение зависимость оптической ширины запрещенной зоны от напряженности внешнего электрического поля. Строго говоря, эта интерпретация не вполне точна, ибо влияние электрического поля на оптические эффекты, связанные с междузонами переходами, состоит не просто в изменении ширины запрещенной зоны, а в изменении самого вида частотной зависимости коэффициента поглощения света. Все же, в силу популярности указанной интерпретации, имеет смысл установить связь полученных выше формул с этим представлением. Для этой цели перепишем выражение (2.11) в виде

$$\epsilon_2(\omega, \xi) = A \exp \{ S \cdot [\hbar\omega - (E_g - \delta E_g)] \}. \quad (3.14)$$

Здесь через δE_g обозначено «изменение ширины запрещенной зоны» за счет внешнего поля ξ . Очевидно, представление (3.14) имеет смысл только для слабых внешних полей, когда можно ожидать, что функциональная зависимость ε_2 от $E_g - \delta E_g - \hbar\omega$ будет такой же, как и при $\xi = 0$. Разлагая (3.14) в ряд по степеням δE_g , мы получаем

$$\frac{\Delta\varepsilon_2(\omega, \xi)}{\varepsilon_2(\omega, 0)} = S\delta E_g. \quad (3.15)$$

Подставляя в левую часть (3.15) соотношение (3.9) и пользуясь определением S , находим

$$\delta E_g = \frac{S(E_g - \hbar\omega)}{108} \frac{(e\xi)^2 \hbar^2 S^2}{m_r}. \quad (3.16)$$

Сравним теперь (3.14) с формулой Франца (1958):

$$\delta E_g = \frac{(e\xi)^2 \hbar^2 S^2}{24m_r}. \quad (3.17)$$

Последнее выражение было получено полуфеноменологическим путем — наличие экспоненциального края поглощения с параметром S просто постулировалось, и исследовался сдвиг этого края во внешнем электрическом поле. В развитой здесь теории причина появления хвоста связывается с наличием случайного поля, и величина S выражается через параметры теории по формуле (2.10). Формулы (3.16) и (3.17) довольно близки, однако первая из них содержит и частотную зависимость. Последнее обстоятельство лишает величину δE_g строгого и вместе с тем наглядного смысла, чем и демонстрируется отмеченная ранее неточность этого способа интерпретации результатов. По этой причине кажется более правильным вычислять непосредственно функции $\Delta\varepsilon_{1,2}$ и $\Delta\varepsilon_{1,2}/\varepsilon_{1,2}$ и сравнивать их с экспериментом.

Наконец, отметим, что рассмотрение оптических переходов в гладком поле можно обобщить и на случаи высших критических точек, переходов с участием фононов, а также на случаи анизотропного закона дисперсии и анизотропного случайного поля (Е. В. Бурцев, 1972, 1973; Б. Эссер, 1973; Б. Эссер, П. Кляйнерт, 1975, В. Д. Искра, 1979). Последнее может представить известный интерес в связи с оптическими явлениями в полупроводниках — сегнетоэлектриках.

§ 4. Поглощение в примесном случайном поле

Обратимся теперь к междузонным переходам в случайном поле, созданном хаотически распределенными в пространстве атомами заряженной примеси. С такой ситуацией мы сталкиваемся, в частности, при изучении примесных кристаллических

полупроводников. Потенциальная энергия $U(x)$ дается при этом формулой (II.7.23). Будем рассматривать сильно легированные и сильно компенсированные материалы. Условие сильного легирования сводится к неравенству

$$n_t a_B^3 \gg 1, \quad (4.1)$$

где $a_B = e\hbar^2/me^2$ — боровский радиус в кристалле, а n_t — эффективная концентрация примеси. Она дается выражением

$$n_t = \sum_a Z_a^2 n_a, \quad (4.2)$$

где Z_a — заряд примесного центра a -го типа в единицах элементарного заряда, n_a — концентрация таких центров.

Условие сильной компенсации означает, что при низких температурах уровень Ферми лежит все же глубоко в запрещенной зоне. Указанные условия, равно как и неравенство (4.1), остаются в силе и при рассмотрении халькогенидных стекол; эффективная концентрация примеси при этом приближенно дается формулой (II.8.24).

Экранирование в сильно легированном компенсированном полупроводнике может быть обусловлено разными механизмами: корреляцией в пространственном распределении доноров и акцепторов, взаимодействием свободных и связанных электронов друг с другом и взаимодействием их с атомами примеси. По этой причине удобнее не выражать радиус экранирования r_0 через другие характеристики системы, а рассматривать его как феноменологический параметр. Мы будем предполагать лишь, что r_0 удовлетворяет неравенствам

$$n_t^{-1/3} < r_0 \leq a_B. \quad (4.3)$$

Отсюда следует, что отдельные ионы примеси не создают дискретных уровней (см. [13] и цитированную там литературу). Иначе говоря, связанные состояния электронов формируются лишь в коллективном поле примесных центров. В силу левого неравенства (4.3) случайное поле плавно меняется в подавляющей части объема образца, что, казалось бы, оправдывает квазиклассическую трактовку задачи. Однако в точках расположения примесных центров функция (II.7.23) имеет кулоновские особенности. Попытавшись непосредственно воспользоваться здесь квазиклассическим методом (как для гладкого поля), мы получили бы для ψ_2 выражение

$$\psi_2 = \frac{1}{2} n_t \int dx [\nabla V_a(x)]^2. \quad (4.4)$$

Коль скоро в качестве V_a фигурирует экранированный кулоновский потенциал, выражение (4.4) расходится в нуле. Таким образом, прямое применение квазиклассического метода в данном случае невозможно.

Выход можно найти, если просуммировать бесконечный ряд наиболее сингулярных членов квазиклассического разложения по \hbar^2 [35]. Соответствующее вычисление одночастичной запаздывающей функции Грина содержится в Приложении XIV. При этом предполагается выполнение неравенств

$$(n_r a_B^3)^{-2/5} (a_B/r_0)^2 \ll 1 \quad (4.5)$$

и

$$m_c/m_v \ll 1. \quad (4.6)$$

Последнее неравенство используется лишь для упрощения вычислений. Оно фактически выполняется во многих полупроводниках. Подставляя одночастичные функции Грина (П. XIV.16) и (П. XIV.17) в общую формулу (1.14) и выполняя интегрирование по ω' , как в Приложении XIII, мы получаем

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{e^2 \Gamma}{2\pi^2 \omega^2} \int_{-\infty}^{\infty} ds \int d\mathbf{k} \exp\left[-is\left(E_g - \hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}\right)\right] G(s), \quad (4.7)$$

где

$$G(s) = \left\langle \exp\left\{-is \int_0^1 dt \int d\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} U(\mathbf{q}) \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \left[\exp\left(-it \frac{\hbar^2 q^2 s}{4m_c}\right) - \exp\left(-it \frac{\hbar^2 q^2 s}{4m_v}\right)\right]\right\}\right\rangle \Big|_{m_v \rightarrow \infty}. \quad (4.8)$$

Как видно из формулы (4.8), в $\varepsilon_2(\omega)$ входит разность «перенормированных» потенциальных энергий электрона в зоне проводимости и в валентной зоне, которая при $m_v \neq m_c$ отлична от нуля за счет квантовых поправок. (При $\hbar \rightarrow 0$ мы получаем $G(s) \rightarrow 1$ — случайное поле не влияет на картину поглощения.)

Обратимся к усреднению по конфигурациям примеси. Положим в (4.8)

$$U(\mathbf{q}) = \sum_{a,j} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{aj}) U_a(\mathbf{q}), \quad (4.9)$$

где

$$U_a(\mathbf{q}) = -\frac{Z_a e^2}{2\pi^2 \varepsilon} (q^2 + r_0^{-2})^{-1} \quad (4.10)$$

есть фурье-образ экранированного потенциала отдельного центра a -го типа. Тогда выражение (4.8) принимает вид

$$G(s) = \left\langle \exp\left\{\sum_{a,j} f(\mathbf{R} - \mathbf{R}_{aj}, s)\right\}\right\rangle, \quad (4.11)$$

где функция $f(\mathbf{R} - \mathbf{R}_{aj}, s)$ относится к отдельному примесному центру. Явный вид ее ясен из формул (4.8) — (4.10). Выполняя усреднение, будем рассматривать простейшую ситуацию, когда заряженные центры расположены совершенно некоррелированно и в среднем равномерно; при этом справедливы формулы (II. 7.27) — (II. 7.32), и мы получаем (в пределе при $N_a \rightarrow \infty$, $\Omega \rightarrow \infty$, $n_a = N_a/\Omega < \infty$)

$$G(s) = \exp \left\{ \sum_a n_a \int d\mathbf{R} [\exp(f(\mathbf{R}, s)) - 1] \right\}. \quad (4.12)$$

Как будет видно из дальнейшего, в условиях (4.5) в интеграле по s главную роль играют сравнительно небольшие значения s , в силу чего выражение (4.12) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \exp \left\{ \sum_a n_a \int d\mathbf{R} [\exp(f(\mathbf{R}, s)) - 1] \right\} &\approx \\ &\approx \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_a n_a \int d\mathbf{R} f^2(\mathbf{R}, s) \right\}. \end{aligned} \quad (4.12')$$

Здесь было использовано равенство

$$\int f(\mathbf{R}, s) d\mathbf{R} = 0,$$

вытекающее из определения $f(\mathbf{R}, s)$ и условия полной нейтральности образца. Вычисляя в (4.12') интеграл по \mathbf{R} и переходя к безразмерным переменным интегрирования, получаем

$$G(s) = \exp \left\{ - \frac{n_t e^4 r_0 s^2}{\pi \epsilon^2} (J_{cc} - 2J_{cv} + J_{vv}) \right\}, \quad (4.13)$$

где

$$J_{ll'} = \int_0^1 dt \int_0^1 dt' \int \frac{dy}{(1+y^2)^2} \exp \left\{ - \frac{is\hbar^2}{4r_0^2} \left(\frac{t}{m_l} + \frac{t'}{m_{l'}} \right) y^2 \right\}. \quad (4.14)$$

В силу (4.5) в наиболее существенной области интеграла по s в (4.7) выполняется неравенство

$$\frac{s\hbar^2}{m_l r_0^2} \ll 1. \quad (4.15)$$

В первом порядке по параметру, стоящему в левой части (4.15), мы получаем

$$\begin{aligned} J_{ll'} = \pi^2 \left\{ 1 - \frac{16}{15} \sqrt{\frac{|s|\hbar^2}{4\pi r_0^2}} \exp\left(i \frac{\pi}{4} \text{sign } s\right) m_l m_{l'} \times \right. \\ \left. \times \left[\left(\frac{1}{m_l} + \frac{1}{m_{l'}} \right)^{5/2} - \frac{1}{m_l^{5/2}} - \frac{1}{m_{l'}^{5/2}} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Подставляя (4.16) в (4.13) и пренебрегая членами порядка m_c/m_v , находим *)

$$G(s) = \exp\{-5,1(1 + i \operatorname{sign} s) |s|^{5/2} E_0^{5/2}\}, \quad (4.17)$$

где

$$E_0^{5/2} = (n_i a_B^3) E_B^{5/2}, \quad (4.18)$$

а E_B есть боровская энергия в кристалле:

$$E_B = m_c e^4 / 2 \epsilon^2 \hbar^2.$$

В асимптотической области, в которой

$$(E_g - \hbar\omega) / E_0 \gg 1, \quad (4.19)$$

равенства (4.7) и (4.17) дают

$$\epsilon_2(\omega) \sim \exp\{-((E_g - \hbar\omega) / 2E_0)^{5/3}\}. \quad (4.20)$$

Основной экспериментальный интерес представляет, однако, область, расположенная не слишком далеко от края поглощения. Так, при энергиях фотона, удовлетворяющих неравенствам

$$0 \leq (E_g - \hbar\omega) / E_0 \leq 4, \quad (4.21)$$

правая часть (4.7) аппроксимируется экспонентой [35]:

$$\epsilon_2(\omega) = A \exp\{S_n \cdot (\hbar\omega - E_g)\}. \quad (4.22)$$

Здесь A — медленно меняющаяся функция частоты, а

$$S_n = (2,2 E_0)^{-1} = [2,2 (n_i a_B^3)^{2/5} E_B]^{-1}. \quad (4.23)$$

Частотная зависимость вида (4.22) наблюдалась вблизи края поглощения во многих сильно легированных полупроводниках. Заметим также, что согласно (4.23) $S_n^{-1} \sim n_i^{2/5}$; анализ экспериментальных данных для ряда полупроводников $A^{III}B^V$ (смотрите § I.3) привел к эмпирическому соотношению $S_n^{-1} \sim n_i^{0,39}$. Частотная зависимость (4.22) характерна и для халькогенидных стекол. При этом значения S_n^{-1} оказываются порядка 0,1 эВ. Именно это и получается из формул (4.23) и (II.8.24), если положить $\epsilon = 10$, $Z_a \approx 0,1$, а Ω_0 — порядка 10^2 атомных единиц.

Как и при рассмотрении гладкого поля (§ 3), изложенный выше расчет можно обобщить на случай узкозонных полупроводников (В. А. Федирко, 1975). Здесь следует различать те же две возможности, что и в § 3; результаты вполне аналогичны получающимся в случае гладкого поля. Возможно также обоб-

*) Число 5,1 в экспоненте (4.17) получилось из комбинации констант:

$\frac{32}{15} \sqrt{\pi} (7 - 2^{5/2}) \approx 5,1.$

шение расчета на случай электропоглощения. Отправляясь от одночастичных функций Грина при наличии как примесного, так и постоянного и однородного внешнего поля, (П.XIV.21) и (П. XIV.22), получаем $G(s)$ в виде

$$G(s) = \exp \left\{ -5,1 (1 + i \operatorname{sign} s) |s|^{5/2} E_0^{5/2} - \right. \\ \left. - 0,12 (1 - i \operatorname{sign} s) |s|^{11/2} W_0^{11/2} - \frac{is^3}{12} (\hbar\Theta)^3 \right\}. \quad (4.24)$$

Здесь

$$\Theta^3 = \frac{(e\mathcal{E})^2}{2m_c\hbar} \quad (4.25)$$

и

$$W_0^{11/2} = n_i a_B^3 E_B^{7/2} (e\mathcal{E} a_B)^2. \quad (4.26)$$

Роль внешнего поля становится заметной, когда напряженность его достигает величины порядка напряженности характерного «внутреннего поля» \mathcal{E}_i . Последняя определяется равенством

$$\mathcal{E}_i = (n_i a_B^3)^{3/5} \frac{E_B}{ea_B}. \quad (4.27)$$

Вычисление частотной зависимости $\varepsilon_2(\omega, \mathcal{E})$ для внешних полей порядка \mathcal{E}_i приводит к результату, сильно отличающемуся от того, что получается в отсутствие примесного случайного поля. Нам еще неизвестны экспериментальные данные по электропоглощению в сильно легированных компенсированных полупроводниках, с которыми можно было бы сравнивать теорию.

§ 5*. Экситонное поглощение света в слабом случайном поле

Обратимся к исследованию экситонных эффектов в поглощении света (В. Д. Искра, 1972, 1974, 1975). Здесь можно выделить два эффекта. Во-первых, рассеяние экситона случайным полем, равно как и ограничение времени его жизни за счет «ударов второго рода» (§ II.15), приводит к уширению экситонных линий поглощения. Во-вторых, кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой влияет на форму коэффициента поглощения. В обычных кристаллических полупроводниках это влияние особенно заметно вблизи порога поглощения. Следует ожидать, что и в неупорядоченных материалах роль кулоновских эффектов может оказаться заметной как в этой области частот, так и на хвосте.

В настоящем параграфе мы рассмотрим первый из названных эффектов. Разумеется, эта постановка задачи имеет смысл, лишь если выполняются сами условия существования экситона, указанные в § II.15. С другой стороны, по соображениям,

также высказанным в § II. 15, интересно рассматривать только экситоны Мотта.

Второй из указанных выше эффектов рассматривается в § 6 (также для экситонов Мотта).

Для вычисления комплексной электропроводности (и, далее, коэффициента поглощения по формуле (1.1)) здесь надо воспользоваться общим выражением (II. 13.5) или эквивалентным ему соотношением между электропроводностью и двухчастичной функцией Грина [14]*). В условиях (1.2) мы имеем, выбирая базисные функции так же, как и в § 2, и пренебрегая, как обычно, импульсом фотона:

$$\alpha(\omega) = \lim_{\substack{r_{1p} \rightarrow r_{1n} \\ r_{2p} \rightarrow r_{2n}}} \text{Im} \int d\mathbf{r}_{2n} \langle K_0(\mathbf{r}_{1n}, \mathbf{r}_{1p}; \mathbf{r}_{2n}, \mathbf{r}_{2p}; \omega) \rangle. \quad (5.1)$$

Здесь K_0 есть фурье-образ двухчастичной запаздывающей функции Грина K_T при $T = 0$. Он удовлетворяет уравнению (обозначения те же, что в § II. 15; принята система единиц, в которой $\hbar = 1$)

$$\left\{ \omega - E_g + \frac{1}{2m_c} \nabla_{\mathbf{r}_{1n}}^2 + \frac{1}{2m_v} \nabla_{\mathbf{r}_{1p}}^2 - V(\mathbf{r}_{1n} - \mathbf{r}_{1p}) - U_n(\mathbf{r}_{1n}) - U_p(\mathbf{r}_{1p}) \right\} K_T = \\ = -\delta(\mathbf{r}_{1n} - \mathbf{r}_{2n}) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} n_v(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \exp[i(\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_{2p} - \mathbf{k}_2 \mathbf{r}_{1p})] + \\ + \delta(\mathbf{r}_{1p} - \mathbf{r}_{2p}) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} n_c(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \exp[i(\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_{1n} - \mathbf{k}_2 \mathbf{r}_{2n})]. \quad (5.2)$$

Здесь

$$n_{c, v}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \int_{-\infty}^{\infty} n_F(\omega') J_{c, v}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \omega') d\omega' \quad (5.3)$$

суть элементы одночастичной матрицы плотности для зон проводимости и валентной, $J_{c, v}$ — спектральные функции, стандартным образом выражающиеся через соответствующие одночастичные функции Грина.

Введем, как и в § II. 15, координаты Якоби \mathbf{R} и \mathbf{r} , (II. 15.2). Получим вместо (5.1)

$$\alpha(\omega) \sim \lim_{\substack{r_1 \rightarrow 0 \\ r_2 \rightarrow 0}} \text{Im} \int d\mathbf{R}_2 \langle K_0(\mathbf{R}_1, \mathbf{r}_1; \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_2; \omega) \rangle. \quad (5.4)$$

Функцию K_T удобно представить в виде разложения по собственным функциям $\Psi_{N, p}(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ уравнения Шредингера, описывающего стандартные состояния экситона в отсутствие слу-

* Эта эквивалентность имеет место, коль скоро оказывается несущественным различие между внешним и действующими полями (Т. Изюяма, 1961).

чайного поля. Через \mathbf{p} и N здесь обозначены, соответственно, квазиимпульс центра инерции экситона и набор квантовых чисел, описывающих внутреннее движение в нем при заданных значениях компонент \mathbf{p} . Подобно (II. 15.6),

$$\Psi_{N, \mathbf{p}}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \Phi_N(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{p}\mathbf{R}) \quad (5.5)$$

и

$$\left\{ -\frac{1}{2m_r} \nabla_r^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \Phi_N(\mathbf{r}) = E_N \Phi_N(\mathbf{r}). \quad (5.6)$$

Величины $E_N (\leq 0)$ суть собственные значения задачи об экситоне в отсутствие случайного поля (значение $E_N = 0$ есть граница непрерывного спектра). Если радиус экранирования значительно превышает боровский радиус a_B , то величины E_N образуют обычный водородоподобный спектр. При этом $N = \{n, l, m\}$, где n, l, m — «водородные» квантовые числа, $E_N = E_n$.

Положим

$$\begin{aligned} K_T(\mathbf{R}_1, \mathbf{r}_1; \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_2; \omega) = \\ = \sum_{N_1, N_2} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} K_T(N_1, \mathbf{p}_1; N_2, \mathbf{p}_2; \omega) \Psi_{N_1, \mathbf{p}_1}(\mathbf{R}_1, \mathbf{r}_1) \Psi_{N_2, \mathbf{p}_2}(\mathbf{R}_2, \mathbf{r}_2). \end{aligned} \quad (5.7)$$

В макроскопически однородной системе

$$\langle K_T(N_1, \mathbf{p}_1; N_2, \mathbf{p}_2; \omega) \rangle \sim \delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2}. \quad (5.8)$$

Из формул (5.8) и (5.4) явствует, что в выражение для $\alpha^i(\omega)$ входит только значение $\langle K_T \rangle$ при $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$. Далее, пусть уровень Ферми лежит достаточно глубоко в запрещенной зоне:

$$T \ll E_c - F, \quad T \ll F - E_v. \quad (5.9)$$

Тогда усреднение в (5.1) можно проводить по основному состоянию системы, т. е. заменить функцию K_T ее значением K_0 при $T = 0$. Для вычисления $\langle K_0 \rangle$ можно воспользоваться обычной фейнмановской техникой. Будем считать случайное поле слабым, предполагая выполненным неравенство *)

$$\eta \equiv 4 \left(\frac{M}{m_r} \right)^2 \frac{\Psi_1}{E_B^2} \left(\frac{\xi_0}{a_B} \right)^2 \ll 1, \quad (5.10)$$

и ограничимся областью частот

$$\omega \gtrsim E_g - E_v. \quad (5.11)$$

Тогда роль ударов второго рода оказывается сравнительно несущественной. В самом деле, как мы только что видели, квази-

*) Пользуясь значениями параметров вещества, принятыми в § II.15, легко убедиться, что в случае примесного поля неравенство (5.10) удовлетворяется при концентрации заряженной примеси $n_i \lesssim 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

импульс центра инерции оптически созданного экситона \mathbf{p} практически равен нулю. По этой причине удары второго рода могут сыграть здесь какую-нибудь роль либо если экситон появляется в одном из возбужденных состояний, либо за счет неопределенности \mathbf{p} , обусловленной рассеянием экситона. Очевидно, последний эффект — высшего порядка малости по сравнению с самим рассеянием. Таким образом, имеется существенное различие между ролью ударов второго рода в кинетике фотопроводимости и в экситонном поглощении света: в последнем случае «прямой» экситон появляется в том единственном состоянии, в котором у него не хватает энергии для распада. С другой стороны, линии рекомбинационного излучения через экситоны могут уширяться и за счет ударов второго рода, если только экситоны успевают термализоваться. Иначе говоря, в рассматриваемой задаче весьма существенной оказывается зависимость времени затухания данного состояния экситона от его энергии.

В указанных условиях расчет становится совершенно аналогичным тому, что выполняется в задаче об электропроводности в слабом случайном поле примеси [59]. Результат оказывается довольно очевидным:

$$\alpha \sim \text{Re } K(\mathbf{r}, \omega) |_{\mathbf{r}=0}, \quad (5.12)$$

где $K(\mathbf{r}, \omega)$ — функция Грина, описывающая внутреннее движение в экситоне с учетом случайного поля. Она удовлетворяет эффективному волновому уравнению

$$\left[\omega - E_g + \frac{1}{2m_r} \nabla_r^2 - V(\mathbf{r}) \right] K(\mathbf{r}, \omega) + \int M(\mathbf{r}-\mathbf{r}'; \omega) K(\mathbf{r}', \omega) d\mathbf{r}' = i\delta(\mathbf{r}). \quad (5.13)$$

Здесь через M обозначен массовый оператор, сопоставленный двухчастичной функции Грина; в первом исчезающем приближении

$$M(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \int d\mathbf{k}' \Psi(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \times \\ \times \left\{ \frac{1}{\omega - E_c(\mathbf{k}') + i\varepsilon} + \frac{1}{\omega - E_v(\mathbf{k}') + i\varepsilon} \right\}, \quad (5.14)$$

где $\Psi(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ — фурье-образ корреляционной функции (II. 15.8). Функцию $K(\mathbf{r}, \omega)$ легко найти, рассматривая последнее слагаемое в левой части (5.13) как возмущение.

В результате получаем

$$\alpha(\omega) \sim \text{Im} \left\{ - \sum_N \frac{|\Phi_N^{(0)}|^2}{\omega - E_g - E_N - \delta E_N} \right\}, \quad (5.15)$$

где

$$\delta E_N = - \int \Phi_N^*(\mathbf{r}) M(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \omega) \Phi_N(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (5.16)$$

Соотношение (5.15) имеет простой физический смысл: в правой части его стоит сумма пиков, разделенных по частоте. Они описывают не что иное, как линии поглощения, уширенные случайным полем (величина δE_N имеет мнимую часть). Вообще говоря, это уширение не лоренцево: как видно из (5.16), величина δE_N сама зависит от частоты. Может случиться, однако, что эта зависимость слабая. Так обстоит дело в условиях (5.10), если, сверх того, $a_B \ll \xi_0$. Пользуясь корреляционной функцией (II. 15.8), мы получаем для полуширины первой экситонной линии ($N = (1, 0, 0)$)

$$\gamma_{100} \equiv |\operatorname{Im} \delta E_{100}| = \frac{8\psi_1 \xi_0}{3E_B a_B} \frac{(m_n + m_p)^2}{m_n m_p}. \quad (5.17)$$

Заметим, что в условиях (5.10) величина γ_{100} может оказаться сравнимой с расстоянием между первым и вторым невозмущенными уровнями экситона. Таким образом, уширение линий может быть заметно уже в условиях, когда экситон как таковой еще не разрушается случайным полем. Видимо, такое «размытие» экситонной структуры действительно наблюдалось на опыте (Л. Н. Курбатов, В. Б. Машенко, А. Я. Дирочка, 1968; В. И. Сафонов, И. С. Шлимак, А. М. Титков, 1970).

§ 6*. Влияние экситонных эффектов на хвост коэффициента поглощения

Здесь достаточно рассмотреть случай гладкого поля (В. Л. Бонч-Бруевич, В. Д. Искра, 1975). Действительно, влияние поля заряженной примеси становится существенным лишь при достаточно большой ее концентрации, когда $n^* r_0^3 \gtrsim 1$. При этом, однако, и сам экситон обычно перестает существовать как стационарное состояние (§ II. 15).

Ограничимся, далее, случаем гауссова поля: как уже отмечалось в § 2, получающиеся при этом результаты с логарифмической точностью остаются в силе для довольно широкого класса случайных полей. В данной задаче удобно не вводить массовый оператор типа (5.14), а поступать по образцу § 2.

Введем в уравнении (5.2) координаты Якоби (II. 15.2) и представим функцию $K_T(\mathbf{R}_1, \mathbf{r}_1; \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_2; \omega)$ в виде

$$\begin{aligned} K_T(\mathbf{R}_1, \mathbf{r}_1; \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_2; \omega) = \\ = \int d\omega' d\mathbf{R}' d\mathbf{r}' n_F(\omega') K(\mathbf{R}_1, \mathbf{r}_1; \mathbf{R}', \mathbf{r}'; \omega) \{J_v(\mathbf{R}', \mathbf{r}'; \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_2; \omega') - \\ - J_c(\mathbf{R}', \mathbf{r}'; \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_2; \omega')\}. \quad (6.1) \end{aligned}$$

При этом для функции K получится уравнение

$$\left\{ \omega - E_g + \frac{1}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + \frac{1}{2m_r} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - U(\mathbf{R}, \mathbf{r}) - V(\mathbf{r}) \right\} K(\mathbf{R}, \mathbf{r}; \mathbf{R}', \mathbf{r}'; \omega) = -\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (6.2)$$

где, как и в § II.15, через M и m_r обозначены полная и приведенная эффективные массы, а функция $U(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ дается выражением (II.15.4). Ограничимся по-прежнему условиями (5.9). Тогда, согласно (6.1), (6.2) и (5.1), мы получаем (сравните с (П. XII.13) и (П. XII.14))

$$\alpha(\omega) \sim \lim_{\substack{\mathbf{r} \rightarrow 0 \\ \mathbf{r}' \rightarrow 0}} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} ds \int d\mathbf{R}' e^{is(\omega - E_g)} \langle \hat{L} \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rangle, \quad (6.3)$$

где

$$\hat{L} = \exp \left\{ is \left[\frac{1}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + \frac{1}{2m_r} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - U(\mathbf{R}, \mathbf{r}) - V(\mathbf{r}) \right] \right\}. \quad (6.4)$$

Как и в § 2, разложим U в ряд Тейлора по \mathbf{r} , сохраняя лишь первые два члена разложения. Получим

$$\hat{L} = \exp \{-is(H_0 + \delta H)\} \exp \left(\frac{is}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \right), \quad (6.4')$$

где

$$H_0 = -\frac{1}{2m_r} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}), \quad \delta H = (\mathbf{r}, \nabla_{\mathbf{R}} U(\mathbf{R})). \quad (6.5)$$

Дальнейшее зависит от соотношения между боровской энергией экситона и характерной энергией электрона в случайном поле. Согласно (2.10) последняя в данном случае дается выражением

$$\bar{E} \equiv S^{-1} = \left(\frac{\hbar^2}{36m_r} \psi_2 \right)^{1/3}. \quad (6.6)$$

При $E_B \ll \bar{E}$ экситонные эффекты не играют роли: случайное поле «разрывает» экситон (§ II.15), и мы возвращаемся к задаче, изученной в § 2.

Ограничимся поэтому случаем

$$E_B > \bar{E}. \quad (6.7)$$

Как мы знаем, аппроксимация, которая приводит к (6.5), состоит в пренебрежении пространственными производными от градиента потенциальной энергии электрона в случайном поле, т. е. от напряженности случайного поля. Иначе говоря, независимо от фактической природы $U(\mathbf{r})$ мы получаем формально ту же задачу, что и в однородном электрическом поле напряженности $\nabla U/e$.

В условиях (6.7) здесь можно воспользоваться стандартной теорией эффекта Штарка. Если потенциальная энергия $V(\mathbf{r})$ имеет чисто кулоновский вид, то, как известно [19], собственные значения оператора $H_0 + \delta H$ даются выражением

$$E_{n_1 n_2 m} = E_n + a_{n_1 n_2} |\tilde{\xi}| - b_{n_1 n_2} \tilde{\xi}^2 + O(\tilde{\xi}^3). \quad (6.8)$$

Здесь n_1, n_2, m — целые числа или нули, $\tilde{\xi} = \frac{a_B}{E_B} \nabla U$ — безразмерная напряженность поля,

$$\begin{aligned} n &= n_1 + n_2 + |m| + 1, & E_n &= -E_B/n^2, \\ a_{n_1 n_2} &= \frac{3}{2} E_B (n_1 - n_2) n, \\ b_{n_1 n_2} &= \frac{n^4}{16} E_B [17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19]. \end{aligned} \quad (6.9)$$

Соответствующие волновые функции $\Phi_{n_1 n_2 m}$ удобно выражать в параболических координатах $\xi = \rho + z, \eta = \rho - z, \varphi$ (ρ — радиальная координата, φ — азимутальный угол).

Второе слагаемое в правой части (6.8) описывает линейный эффект Штарка. Видимо, в рассматриваемой задаче оно несущественно. Действительно, во-первых, это слагаемое появляется только в рамках чисто водородной модели. Во-вторых, явная оценка вклада, вносимого им в интеграл (6.3), показывает, что этот вклад мал, коль скоро

$$(E_g - \omega + E_B)^2 \gg \frac{1}{6} a^2_{n_1 n_2} \frac{\bar{E}^3}{E_B^3}.$$

По этой причине в дальнейшем мы ограничимся учетом только квадратичного эффекта Штарка.

С учетом (6.4) интеграл по \mathbf{R}' в правой части (6.3) легко вычисляется. Для реализации оператора \mathcal{L} в применении к функции $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ удобно представить последнюю в виде разложения по функциям $\Phi_{n_1 n_2 m}$ и воспользоваться приближенным соотношением

$$(H_0 + \delta H) \Phi_{n_1 n_2 m} = E_{n_1 n_2 m} \Phi_{n_1 n_2 m}. \quad (6.10)$$

Таким путем легко находим

$$\alpha(\omega) = \sum_{n_1, n_2} \alpha_{n_1 n_2}(\omega), \quad (6.11)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha_{n_1 n_2}(\omega) &\sim \text{Re} \int_0^\infty ds \exp [is(\omega - E_g) - E_n] \times \\ &\times \langle \exp \{isb_{n_1 n_2} \tilde{\xi}^2\}_{m=0} | \Phi_{n_1 n_2 0}(\xi=0, \eta=0) \rangle^2. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Усреднение по гауссову полю ξ выполняется так же, как и в § 2, и, возвращаясь к обычным единицам, мы получаем:

а) При $E - \hbar\omega - E_B/n^2 > 0$

$$\alpha_{n_1 n_2}(\omega) \sim \frac{1}{n^4 B} \left(\frac{E_g - \hbar\omega - E_B/n^2}{B} \right)^{1/2} \exp\left(- \frac{E_g - \hbar\omega - E_B/n^2}{B} \right). \quad (6.13)$$

Здесь

$$B = \frac{4}{3} b_n n_2 \left(\frac{\bar{E}}{E_B} \right)^3, \quad (6.14)$$

а множитель n^{-4} связан с тем, что [19]

$$\Phi_{n_1 n_2 0}(\xi = 0, \eta = 0) = n^{-2} \pi^{-1/2}.$$

б) При $E_g - \hbar\omega - E_B/n^2 < 0$

$$\alpha_{n_1 n_2}(\omega) = 0.$$

Выражение (6.13) описывает хвост коэффициента поглощения, простирающийся в область энергий, лежащих ниже соответствующего невозмущенного экситонного уровня: $\hbar\omega < E_g - E_B/n^2$.

Сумма (6.11) могла бы оказаться довольно сложной функцией частоты. Заметим, однако, что при $E_B \gg \bar{E}$ показатель экспоненты в (6.13) быстро возрастает по модулю с увеличением числа n : как видно из (6.14), при $m = 0$

$$\frac{E_B}{n^2 B} = \frac{12}{n^4 [17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 + 19]} \left(\frac{E_B}{\bar{E}} \right)^3.$$

Сверх того, предэкспоненциальный множитель в (6.13) быстро убывает с ростом n .

Таким образом, при $\hbar\omega < E_g - E_B$ главную роль в сумме в (6.11) играет слагаемое с $n = 1$ (т. е. с $n_1 = n_2 = 0$), и мы вновь получаем экспоненциальный хвост коэффициента поглощения:

$$\alpha(\omega) = C \exp\left\{ - \frac{E_g - \hbar\omega}{\bar{E}} \right\}, \quad (6.15)$$

где C — медленно меняющаяся функция частоты, а

$$\bar{E} = \frac{4}{3} \frac{\bar{E}^3}{E_B^2} = \frac{\hbar^2 \psi_2}{27 m_r E_B^2}. \quad (6.16)$$

Видим, что в рассматриваемых условиях кулоновское притяжение между электроном и дыркой не меняет частотной зависимости коэффициента поглощения на хвосте, но приводит к измене-

нию соответствующей характерной энергии: вместо \bar{E} (см. (6.6)) появляется величина $\bar{\bar{E}}$. Поскольку $\bar{\bar{E}} \gg \bar{E}$, коэффициент поглощения на хвосте спадает в этом случае гораздо быстрее, нежели в «сильном» случайном поле.

С другой стороны, при больших частотах, когда условие $E_g - \hbar\omega - E_B/n^2 > 0$ выполняется лишь для больших значений n , вид коэффициента поглощения оказывается не экспоненциальным, а более плавным. Действительно, величина $(n^4/12)(17n^2 + 19)\bar{E}^3/E_B^2$ может оказаться сравнимой с E_B , и тогда в сумме (6.11) заметную роль будут играть сразу много членов.

РЕЗОНАНСНОЕ КОМБИНАЦИОННОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТА В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

§ 1. Введение. Общее выражение для сечения рассеяния и конфигурационное усреднение

Комбинационное рассеяние света представляет собой важный метод изучения электронных и фононных возбуждений в кристаллах. Оно используется и при исследовании неупорядоченных материалов: смешанных кристаллов, сплавов, аморфных и сильно легированных полупроводников. Между рассеянием электромагнитного излучения в неупорядоченных материалах и в кристаллах имеются существенные различия, обусловленные в конечном счете отсутствием дальнего порядка в неупорядоченных системах. В рассеянии света это проявляется двояким образом. Во-первых, появляется дополнительное по сравнению с тем, что имеет место в кристаллах, рассеяние электромагнитных волн. Во-вторых, меняется сама динамика электронов и фононов, что приводит к изменению характера комбинационного рассеяния обычного типа.

Второе обстоятельство сказывается и при резонансном комбинационном рассеянии, в котором исследуется интенсивность рассеянного излучения как функция частоты падающей волны. В случае кристаллического полупроводника исследование резонансного рассеяния позволяет получить информацию о зонной структуре вещества. Так, при энергии кванта, близкой к ширине запрещенной зоны, на дисперсионной кривой, изображающей зависимость сечения рассеяния от частоты падающего света, имеется характерная структура. Естественно ожидать, что перестройка энергетического спектра при переходе в неупорядоченное состояние приведет и к изменениям этой кривой по сравнению с кристаллом.

Далее, важную роль может играть уже известное нам (гл. V) нарушение правила отбора по квазиимпульсу при оптических переходах в неупорядоченных полупроводниках. Действительно, в кристалле это правило отбора приводит к тому, что в однофононном комбинационном рассеянии могут участвовать лишь оптические фононы с нулевым квазиимпульсом (в пренебрежении импульсом фотона). В неупорядоченном полупроводнике это ограничение снимается. В результате вместо дискретной линии

может возникать целый спектр рассеянного света. Вид этого спектра при условии, что матричные элементы перехода изменяются достаточно плавно, отражает ход плотности состояний фононов.

В настоящей главе изучаются эффекты, связанные в основном лишь с одним из указанных выше факторов — влиянием случайного поля на поведение электронов, участвующих в комбинационном рассеянии света. Предварительно, однако, удобно выписать общую формулу для дифференциального сечения рассеяния.

Обозначим через ω_i и ω_s круговые частоты падающей и рассеянной световых волн, через \mathbf{e}_i и \mathbf{e}_s — векторы их поляризации, усредненное по случайному полю дифференциальное сечение рассеяния — через $\langle \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} \rangle$. Здесь $d\Omega$ обозначает элемент телесного угла, а σ — полное сечение рассеяния. Для явного вычисления этой величины надо написать выражение для вектора Пойнтинга рассеянной волны, выразив фигурирующие там напряженности электрического и магнитного полей через запаздывающие потенциалы. Последние можно связать с флуктуациями плотности тока; соответственно после квантостатистического усреднения дифференциальное сечение рассеяния выражается через коррелятор названных величин. В дипольном приближении при этом получается (Р. Эндерлайн, К. Пойкер, Ф. Бехштедт, 1979)

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} \right\rangle &= \\ &= \frac{1}{2\pi c^3 I} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega'_s \omega'_s \omega_s \eta_{\tau}(\omega'_s - \omega_s) = \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' e^{-i\mathbf{q}_s \mathbf{x} + i\mathbf{q}'_s \mathbf{x}'} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt dt'}{(2\pi)^2} \times \\ &\quad \times e^{i(\omega_s t - \omega'_s t')} \langle \text{Sp} \{ \rho' \Delta j_s(\mathbf{x}', t') \Delta j_s(\mathbf{x}, t) \} \rangle. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Здесь через I обозначена интенсивность падающего света,

$$\eta_{\tau}(\omega) = 2 \sin(\omega\tau/2)/\omega\tau, \quad (1.2)$$

$$\mathbf{q}_s = \omega_s \mathbf{n}_s / c, \quad (1.3)$$

$$\mathbf{q}'_s = \omega'_s \mathbf{n}_s / c, \quad (1.4)$$

а \mathbf{n}_s — единичный вектор в направлении распространения рассеянной волны; через $\Delta \mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ обозначена часть оператора плотности тока, связанная с наличием падающей световой волны,

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) &= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [H' + H_{\text{int}}(t')] \right\} \times \\ &\quad \times \mathbf{j}(\mathbf{x}) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [H' + H_{\text{int}}(t')] \right\}, \end{aligned} \quad (1.5)$$

где H' — гамильтониан системы в отсутствие электромагнитного поля, а H_{int} — гамильтониан взаимодействия электронов с падающей световой волной. Нижний индекс s соответствует компоненте $\Delta \mathbf{j}$, параллельной вектору \mathbf{e}_s . Наконец, через ρ' обозначен статистический оператор для данного большого канонического ансамбля:

$$\rho' = [\text{Sp} \exp[-\beta(H' - FN)]]^{-1} \exp[-\beta(H' - FN)], \quad (1.6)$$

где $\beta = 1/T$, N — оператор полного числа частиц, а F — электрохимический потенциал.

В дальнейшем нас будет интересовать комбинационное рассеяние света на электронах (может быть, с участием фононов). Соответственно положим

$$H' = H + U + H_{e, \text{ph}} + H_{\text{ph}}. \quad (1.7)$$

Здесь, как и раньше, через H обозначена неслучайная часть гамильтониана электронов, U есть флуктуация потенциальной энергии электрона, $H_{e, \text{ph}}$ — оператор энергии взаимодействия электронов с фононами, H_{ph} — гамильтониан фононов.

При рассеянии только на электронах в правой части (1.7) достаточно сохранить только первые два слагаемых. Если же в процессе рассеяния носители заряда обмениваются энергией и импульсом с фононами, то следует пользоваться полным выражением для H' . При этом мы будем считать взаимодействие электронов с фононами достаточно слабым, ограничиваясь только однофононными процессами. Тогда при вычислении временной зависимости $\Delta j_s(\mathbf{x}, t)$ следует учитывать слагаемые, линейные по операторам $H_{\text{int}}(t)$ и $H_{e, \text{ph}}$. Вновь, как и в гл. IV, воспользуемся приемом с адиабатическим включением взаимодействия электронов с электромагнитным полем и с фононами при $t \rightarrow -\infty$. Тогда в матрице плотности ρ' , с которой проводится усреднение по начальному состоянию системы, следует опустить слагаемое $H_{e, \text{ph}}$ в H' . Явное вычисление оператора $\Delta j_s(\mathbf{x}, t)$ (или среднего от него) удобно производить по отдельности для различных частных случаев (см. далее § 2 и § 3). Здесь мы лишь обсудим вопрос об усреднении выражения (1.1) по случайному полю (очевидно, этому усреднению подлежит корреляционная функция плотностей тока $\Delta \mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$). Будем считать, что рассматриваемое случайное поле — квазиклассическое. Тогда

$$\langle \text{Sp} \rho' \{ \Delta j_s(\mathbf{x}', t') \Delta j_s(\mathbf{x}, t) \} \rangle = \langle \text{Sp} \rho' \{ \Delta j_s(\mathbf{x}', t'; C(\mathbf{x}')) \Delta j_s(\mathbf{x}, t; C(\mathbf{x})) \} \rangle. \quad (1.8)$$

Мы ввели здесь в аргументы плотностей тока плавно меняющуюся случайную функцию $C(\mathbf{x})$. Роль последней может играть, например, локальная ширина запрещенной зоны или напряжен-

ность случайного электрического поля (случай Б) и А), § V. 2). Согласно принципу ослабления корреляции в любой реальной системе выражение (1.8) убывает до нуля, когда расстояние $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$ становится достаточно большим. Обозначим соответствующую длину корреляции через l_c . По условию при $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| > l_c$

$$\langle \text{Sp } \rho' \{ \Delta j_s(\mathbf{x}', t') \Delta j_s(\mathbf{x}, t) \} \rangle \rightarrow 0. \quad (1.9)$$

Рассмотрим теперь случаи

$$l_c \ll \xi_0 \quad (1.10)$$

и

$$l_c \gg \xi_0; \quad (1.11)$$

как и раньше, ξ_0 есть корреляционная длина случайного поля. В условиях (1.10) случайные величины $C(\mathbf{x})$ и $C(\mathbf{x}')$, фигурирующие в (1.8), берутся практически в одной и той же точке. Соответственно усреднение по случайному полю в формуле (1.8) можно выполнять, пользуясь «одноточечным» распределением величины $C(\mathbf{x})$:

$$\begin{aligned} \langle \text{Sp } \rho' \{ \Delta j_s(\mathbf{x}', t'; C(\mathbf{x}')) \Delta j_s(\mathbf{x}, t; C(\mathbf{x})) \} \rangle |_{l_c \ll \xi_0} &\approx \\ &\approx \int dC p_1(C) \text{Sp } \rho' \{ \Delta j_s(\mathbf{x}', t'; C) \Delta j_s(\mathbf{x}, t; C) \}. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Здесь

$$p_1(C) = \langle \delta(C - C(\mathbf{x})) \rangle. \quad (1.13)$$

С другой стороны, в условиях (1.11) усреднение следует выполнять с «двухточечным» распределением $p_2(C, C'; |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)$:

$$\begin{aligned} \langle \text{Sp } \rho' \{ \Delta j_s(\mathbf{x}', t'; C(\mathbf{x}')) \Delta j_s(\mathbf{x}, t; C(\mathbf{x})) \} \rangle |_{l_c \gg \xi_0} &= \\ &= \int dC dC' p_2(C, C'; |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \text{Sp } \rho' \{ \Delta j_s(\mathbf{x}', t'; C') \Delta j_s(\mathbf{x}, t; C) \}. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Здесь

$$p_2(C, C'; |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) = \langle \delta(C - C(\mathbf{x})) \delta(C' - C(\mathbf{x}')) \rangle. \quad (1.15)$$

Воспользуемся теперь тождеством

$$\begin{aligned} p_2(C, C'; |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) &= p_1(C) p_1(C') + \\ &+ [p_2(C, C'; |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) - p_1(C) p_1(C')]. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Получим

$$\begin{aligned} \langle \text{Sp } \rho' \{ \Delta j_s(\mathbf{x}', t'; C(\mathbf{x}')) \Delta j_s(\mathbf{x}, t; C(\mathbf{x})) \} \rangle |_{l_c \gg \xi_0} &= \\ &= \text{Sp } \rho' \left\{ \int dC' p_1(C') \Delta j_s(\mathbf{x}', t'; C') \int dC p_1(C) \Delta j_s(\mathbf{x}, t; C) \right\} + \\ &+ \int dC dC' [p_2(C, C'; |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) - p_1(C) p_1(C')] \times \\ &\times \text{Sp } \rho' \{ \Delta j_s(\mathbf{x}', t'; C') \Delta j_s(\mathbf{x}, t; C) \}. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Заметим теперь, что в правую часть (1.1) входят пространственные интегралы от выражения (1.17) и что в пренебрежении волновыми векторами света $\mathbf{q} \approx \mathbf{q}' \approx 0$. Видим, что вклад от второго слагаемого в (1.17) в сечение рассеяния (1.1) в $(\xi_0/l_c)^3$ раз меньше, нежели от первого. Пренебрегая этой величиной, имеем

$$\langle \text{Sp } \rho' \{ \Delta j_s(\mathbf{x}', t'; C(\mathbf{x}')) \Delta j_s(\mathbf{x}, t; C(\mathbf{x})) \} \rangle |_{l_c \gg \xi_0} \approx \\ \approx \text{Sp } \rho' \int dC' p_1(C') \Delta j(\mathbf{x}', t'; C') \int dC p_1(C) \Delta j_s(\mathbf{x}, t; C). \quad (1.18)$$

Введем обозначение

$$K(\mathbf{x}, t; C | \mathbf{x}', t', C') = \text{Sp } \rho' \{ \Delta j_s(\mathbf{x}', t'; C') \Delta j_s(\mathbf{x}, t; C) \}. \quad (1.19)$$

Подставляя выражения (1.12) и (1.18) в дифференциальное сечение рассеяния и пренебрегая здесь и в дальнейшем волновыми векторами света, мы получаем

$$\left\langle \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} \right\rangle = \\ = \frac{1}{2\pi c^3 l} \lim_{\tau \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega'_s d\omega_s \omega'_s \eta_\tau(\omega'_s - \omega_s) \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt dt'}{(2\pi)^2} e^{i(\omega'_s t - \omega'_s t')} \times \\ \times \begin{cases} \int dC p_1(C) K(\mathbf{x}, t; C | \mathbf{x}', t'; C), & l_c \ll \xi_0; \\ \int dC \int dC' p_1(C) p_1(C') K(\mathbf{x}, t; C | \mathbf{x}', t'; C'), & l_c \gg \xi_0. \end{cases} \quad (1.20)$$

При $l_c \ll \xi_0$ это выражение приводится к виду

$$\left\langle \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} \right\rangle |_{l_c \ll \xi_0} = \int dC p_1(C) \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} \right)_C, \quad (1.21)$$

где $\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} \right)_C$ есть сечение рассеяния при фиксированном значении величины C .

§ 2*. Влияние гладкого случайного поля на комбинационное рассеяние света при $l_c \ll \xi_0$

Рассмотрим случай одинакового искривления зон. Тогда, согласно § V.2, роль величины C в соотношениях (1.21) играет напряженность внутреннего случайного поля ξ_i , причем, вычисляя сечение $\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} \right)_{\xi_i}$, вектор ξ_i надо считать постоянным.

Таким образом, вместо (1.21) мы имеем

$$\left\langle \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} \right\rangle = \int d\xi P(\xi) \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} \right)_{\xi}, \quad (2.1)$$

где $P(\xi)$ есть функция распределения напряженности гладкого случайного поля, описываемая формулами (V. 2.13) и (V. 2.14). Согласно (1.20)

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} \right)_{\xi} &= \frac{1}{2\pi c^2 l} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega'_s \omega'_s \omega_s \eta_{\tau}(\omega'_s - \omega_s) \times \\ &\times \int d\mathbf{x}' \int d\mathbf{x} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt dt'}{(2\pi)^2} e^{i(\omega_s t - \omega'_s t')} \times \\ &\times \text{Sp} \rho' \{ \Delta j_s(\mathbf{x}', t'; \xi) \Delta j_s(\mathbf{x}, t; \xi) \}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Далее, для вычисления временной зависимости оператора (1.7) надо произвести в (1.7) замену

$$H'(t) \rightarrow H_{\xi} = H + e\xi x. \quad (2.3)$$

Тогда

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) &= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [H_{\xi} + H_{\text{int}}(t')] \right\} \times \\ &\times \mathbf{j}(\mathbf{x}) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [H_{\xi} + H_{\text{int}}(t')] \right\}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

При этом в статистическом операторе (1.5) можно вообще не учитывать слагаемое со случайным полем, заменяя ρ' в (2.2) на

$$\rho = [\text{Sp} \exp[-\beta(H - FN)]]^{-1} \exp[-\beta(H - FN)].$$

Согласно (2.1) и (2.2) вычисление сечения комбинационного рассеяния в неупорядоченном материале распадается теперь на две задачи. Во-первых, нужно вычислить сечение комбинационного рассеяния $\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} \right)_{\xi}$ в заданном электрическом поле ξ . Во-вторых, надо усреднить эту величину с помощью функции $P(\xi)$.

Обратимся к первой части задачи. Рассмотрим два элементарных процесса комбинационного рассеяния, наблюдаемые в полупроводниках.

а) *Электронное внутрizonное рассеяние.* В этом процессе начальное состояние соответствует одной из областей непрерывного спектра — зоне проводимости или валентной, промежуточное состояние — другой зоне (валентной или проводимости), а конечное состояние совпадает с начальным (рис. 26, а).

б) *Резонансное комбинационное рассеяние оптическими фонами* (рис. 26, б). В этом случае начальное состояние электронной подсистемы расположено в валентной зоне, а промежуточное — в зоне проводимости. В конечном состоянии электроны опять находятся в валентной зоне и, сверх того, появляется один фотон (рис. 26, б).

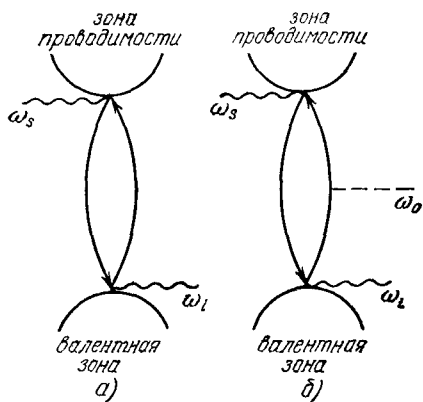


Рис. 26. Электронное внутрizonное рассеяние (а) и комбинационное рассеяние фонами (б).

Вычислим теперь, пользуясь формулами (2.2) — (2.4), сечения обоих этих процессов при наличии электрического поля (Р. Эндерлайн, К. Пойкер, Ф. Бехштедт, 1973, 1974). Выделим в правой части (2.4) слагаемое, линейное по $H_{\text{int}}(t')$. Имеем

$$\Delta j_s(\mathbf{x}, t; \mathcal{E}) = -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [j_s(\mathbf{x}, t; \mathcal{E}), H_{\text{int}}(t')]_- \quad (2.5)$$

Подставляя (2.5) в (2.2), получаем

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} \right)_{\mathcal{E}} &= \\ &= \left(\frac{e^2}{m_0 c^2} \right)^2 \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega'_s \eta_{\tau}(\omega'_s - \omega_s) \text{Sp} \rho A^*(\omega'_s, \omega_i) A(\omega_s, \omega_i), \quad (2.6) \end{aligned}$$

где

$$A(\omega_s, \omega_i) = \frac{im_0}{\hbar c^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\omega_s t} [J_s(t), J_i(t')]_- \quad (2.7)$$

и

$$J_s(t) = \int d\mathbf{x} j_s(\mathbf{x}, t). \quad (2.8)$$

В «одноэлектронном» (в смысле § II. 1) приближении гамильтониан системы электронов и фононов имеет вид *)

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e,ph}, \quad (2.9)$$

где

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}, l} E(\mathbf{k}, l) a_{\mathbf{k}, l}^+ a_{\mathbf{k}, l}, \quad (2.10)$$

$$H_{e,ph} = \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}, l} V(\mathbf{k}, \mathbf{q}; l) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, l}^+ a_{\mathbf{k}, l} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+), \quad (2.11)$$

$$H_{ph} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}}. \quad (2.12)$$

Здесь $b_{\mathbf{q}}^+$, $b_{\mathbf{q}}$ — операторы рождения и уничтожения оптического фонона с волновым вектором \mathbf{q} и энергией $\hbar \omega_{\mathbf{q}}$; $V(\mathbf{k}, \mathbf{q}; l)$ — внутризонный матричный элемент деформационного потенциала. Далее, оператор $\mathbf{J}(t)$ дается выражением

$$\mathbf{J}(t) = \frac{e}{m_0} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{l, l'} (l, \mathbf{k} | \hat{\mathbf{p}} | l', \mathbf{k}) a_{\mathbf{k}, l}^+(t) a_{\mathbf{k}, l'}(t), \quad (2.13)$$

где $\hat{\mathbf{p}}$ — оператор импульса. Временная зависимость операторов $a_{\mathbf{k}, l}^+$, $a_{\mathbf{k}, l}$ определяется здесь полным гамильтонианом (2.9).

Выделим теперь в (2.13) часть, линейную по $H_{e,ph}$. Это делается так же, как и в случае (2.5). Результат можно представить в виде

$$\mathbf{J}(t) \approx \mathbf{J}_0(t) + \mathbf{J}_1(t), \quad (2.14)$$

где

$$\mathbf{J}_0(t) = \frac{e}{m_0} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{l, l'} (l, \mathbf{k} | \hat{\mathbf{p}} | l', \mathbf{k}) a_{\mathbf{k}, l}^+(t) a_{\mathbf{k}, l'}(t), \quad (2.15)$$

$$\mathbf{J}_1(t) = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [\mathbf{J}_0(t'), H_{e,ph}(t')]_-. \quad (2.16)$$

Здесь, в отличие от (2.13), временная зависимость операторов определяется соотношениями типа

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}, l}(t) &= \\ &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} (H_e + H_{ph} + H_{\mathfrak{g}}) t \right] a_{\mathbf{k}, l}(0) \exp \left[- \frac{i}{\hbar} (H_e + H_{ph} + H_{\mathfrak{g}}) t \right]. \end{aligned} \quad (2.17)$$

*) В используемом нами гамильтониане (2.9) принято во внимание только взаимодействие электронов с полем \mathfrak{E} и с фононами. Соответственно полный учет корреляционных эффектов, обуславливающих конечное значение l_c , лежит за пределами развиваемой здесь теории. Мы можем, однако, ввести длину l_c феноменологически, предполагая при этом, что неравенство (1.10) выполняется. Подход, развиваемый в этом параграфе, имеет смысл, если соответствующие корреляционные эффекты существенны только при вычислении l_c , но не в других пунктах расчета.

Мы сохраняем прежние обозначения для операторов рождения и уничтожения, имея в виду, что операторы, фигурирующие в формуле (2.13), более нам не встретятся.

Как мы сейчас увидим, слагаемое $\mathbf{J}_0(t)$ описывает внутризонное рассеяние, а комбинация величин $\mathbf{J}_0(t)$ и $\mathbf{J}_1(t)$ — комбинационное рассеяние на оптических фононах.

а) *Внутризонное (электронное) рассеяние.* Заменяем в выражении (2.7) \mathbf{J} на $\bar{\mathbf{J}}_0$. Тогда

$$A(\omega_s, \omega_l) = A_e(\omega_s, \omega_l) = \\ = \frac{i}{\hbar m_0} \sum_{l'_1, l'_2} \sum_{l_1, l_2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\omega_s t} \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\omega_l t'} p_{l_1 l_2}^s(\mathbf{k}) p_{l'_1 l'_2}^{i'}(\mathbf{k}') \times \\ \times [a_{\mathbf{k}, l_1}^{\dagger}(t) a_{\mathbf{k}, l_2}(t), a_{\mathbf{k}', l'_1}^{\dagger}(t') a_{\mathbf{k}', l'_2}(t')], \quad (2.18)$$

$$p_{l_1 l_2}^{s, i}(\mathbf{k}) = (l_1, \mathbf{k} | \mathbf{e}_s \cdot \hat{\mathbf{p}} | l_2, \mathbf{k}). \quad (2.19)$$

Временную зависимость операторов $a_{\mathbf{k}, l_1}^{\dagger}(t)$ и $a_{\mathbf{k}, l_2}(t)$ легко определить в условиях, когда не играют роли зинеровские междузонные переходы электронов*). Тогда получается

$$a_{\mathbf{k}, l_1}^{\dagger}(t) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\theta E(\mathbf{k}_\theta, l_1) \right\} a_{\mathbf{k}_{-t}, l_1}^{\dagger}, \quad (2.20)$$

$$a_{\mathbf{k}, l_2}(t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\theta E(\mathbf{k}_\theta, l_2) \right\} a_{\mathbf{k}_{-t}, l_2},$$

где

$$\mathbf{k}_t = \mathbf{k} - \frac{e\mathcal{E}}{\hbar} t. \quad (2.21)$$

При этом коммутатор, фигурирующий в формуле (2.18), легко вычисляется.

Подставляя (2.18) в (2.6) и выполняя статистическое усреднение, находим

$$\left(\frac{d^2 \sigma_e}{d\Omega d\omega_s} \right)_g = \left(\frac{e^2}{m_0 c^2} \right)^2 \sum_{l, l'} \sum_{\mathbf{k}} n_F(\mathbf{k}, l) [1 - n_F(\mathbf{k}, l')] \times \\ \times \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega'_s \eta_\tau(\omega'_s - \omega_s) A_{l', l', \mathbf{k}}^*(\omega'_s, \omega_l) A_{l, l', \mathbf{k}}(\omega_s, \omega_l), \quad (2.22)$$

*) Обычно это оправдано при напряженности поля $\ll 10^6 \div 10^7$ В/см.

где $n_F(\mathbf{k}, l)$ — функция Ферми от $E(\mathbf{k}, l)$ и

$$A_{l', l, \mathbf{k}}(\omega_s, \omega_i) = \frac{i}{\hbar m_0} \sum_{l''} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} \int_{-\infty}^t dt' \left\{ p_{l', l''}^s(\mathbf{k}_t) p_{l'', l}^i(\mathbf{k}_{t'}) \times \right. \\ \times \exp \left[i \int_0^t d\theta (\omega_{l', l''}(\mathbf{k}_\theta) + \omega_s) + i \int_0^{t'} d\theta (\omega_{l'', l}(\mathbf{k}_\theta) - \omega_i) \right] - \\ \left. - p_{l', l''}^i(\mathbf{k}_{t'}) p_{l'', l}^s(\mathbf{k}_t) \exp \left[i \int_0^{t'} d\theta (\omega_{l', l''}(\mathbf{k}_\theta) - \omega_i) + \right. \right. \\ \left. \left. + i \int_0^t d\theta (\omega_{l'', l}(\mathbf{k}_\theta) + \omega_s) \right] \right\}, \quad (2.23)$$

$$\omega_{l', l}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} [E(\mathbf{k}, l') - E(\mathbf{k}, l)]. \quad (2.24)$$

Пусть теперь напряженность электрического поля параллельна одному из основных векторов обратной решетки \mathbf{K} . Тогда периодичность энергии $E(\mathbf{k}, l)$ как функции \mathbf{k} приводит и к периодичности по t :

$$\omega_{l, l'}(\mathbf{k}_t) = \omega_{l, l'}(\mathbf{k}_{t+T_g}), \quad p_{l, l'}^i, s(\mathbf{k}_t) = p_{l, l'}^i, s(\mathbf{k}_{t+T_g}), \quad (2.25)$$

где

$$T_g = \hbar K / e | \varepsilon |.$$

Преобразуя интеграл по времени в формуле (2.23) с помощью этих соотношений и выполняя усреднение по структуре Штарка, находим (см. Приложение XV)

$$\left(\frac{d^2 \sigma_e}{d\Omega d\omega_s} \right)_g = \left(\frac{e^2}{m_0 c^2} \right)^2 \sum_{l, l'} \sum_{\mathbf{k}} n_F(\mathbf{k}, l) [1 - n_F(\mathbf{k}, l')] \times \\ \times \frac{2\pi}{T} \left| \frac{1}{\hbar m_0} \sum_{l''} \int_{-T/2}^{T/2} \frac{dt}{2\pi} \int_{-T/2}^t dt' \left\{ p_{l', l''}^s(\mathbf{k}_t) p_{l'', l}^i(\mathbf{k}_{t'}) \times \right. \right. \\ \times \exp \left\{ i \int_0^t d\theta [\omega_{l', l''}(\mathbf{k}_\theta) + \omega_s] + i \int_0^{t'} d\theta [\omega_{l'', l}(\mathbf{k}_\theta) - \omega_i] \right\} - \\ \left. - p_{l', l''}^i(\mathbf{k}_{t'}) p_{l'', l}^s(\mathbf{k}_t) \exp \left\{ i \int_0^{t'} d\theta [\omega_{l', l''}(\mathbf{k}_\theta) - \omega_i] + \right. \right. \\ \left. \left. + i \int_0^t d\theta [\omega_{l'', l}(\mathbf{k}_\theta) + \omega_s] \right\} \right\}^2. \quad (2.26)$$

Рассмотрим выражение (2.26) для частного случая двухзонной изотропной параболической модели, полагая

$$\omega_{cv}(\mathbf{k}) = \omega_g + \frac{\hbar k^2}{2m_r}, \quad \omega_g = E_{g, \text{опт}}/\hbar, \quad (2.27)$$

$$p_{cv}^{i,s}(\mathbf{k}) \approx p_{cv}^{i,s}(0) \equiv p_{cv}^{i,s}. \quad (2.28)$$

Будем при этом рассматривать внутризонное рассеяние электронами зоны проводимости. Последнее означает, что в формуле (2.26) следует положить $l = l' = c$, $l'' = v$. Тогда в отсутствие внешнего электрического поля ($\xi = 0$) резонансным оказывается только второй из двух двойных интегралов, стоящих под знаком модуля в (2.26). Пренебрегая в дальнейшем нерезонансным первым слагаемым, мы получаем

$$\left(\frac{d^2 \sigma_e}{d\Omega d\omega_s} \right)_g = \left(\frac{e^2}{m_0 c^2} \right)^2 \frac{|p_{cv}^i|^2 |p_{cv}^s|^2}{\hbar^2 m_0^2} \sum_{\mathbf{k}} n_F(\mathbf{k}, c) [1 - n_F(\mathbf{k}, c)] \mathcal{J}, \quad (2.29)$$

где

$$\mathcal{J} = \frac{2\pi}{T} \left| \int_{-T_g/2}^{T_g/2} \frac{dt}{2\pi} \int_{-T/2}^t dt' \exp \left\{ i \int_0^t d\theta [-\omega_{cv}(\mathbf{k}_\theta) + \omega_s] + \right. \right. \\ \left. \left. + i \int_0^{t'} d\theta [\omega_{cv}(\mathbf{k}_\theta) - \omega_i] \right\} \right|^2. \quad (2.30)$$

Легко убедиться, что интеграл \mathcal{J} не зависит от параллельной полю компоненты k_{\parallel} вектора \mathbf{k} . В частности, можно положить $k_{\parallel} = 0$. Тогда

$$\omega_{cv}(\mathbf{k}_\theta) = \omega_{cv}(k_{\perp}) + \theta^2 \Theta^3, \quad (2.31)$$

$$\Theta^2 = \left[\frac{(e\xi)^2}{2m_r \hbar} \right]^{2/3}. \quad (2.32)$$

Положим в (2.30)

$$x = \frac{\omega_{cv}(k_{\perp}) - \omega_i}{\Theta}, \quad y = \frac{\omega_{cv}(k_{\perp}) - \omega_s}{\Theta}. \quad (2.33)$$

Получим

$$\mathcal{J} = \frac{2\pi}{T_g \Theta^4} \left| \int_{-\frac{\Theta T_g}{2}}^{\frac{\Theta T_g}{2}} \frac{ds}{2\pi} \int_{-\frac{\Theta T_g}{2}}^s ds' \exp[-i(ys + s^3/3) + i(xs' + s'^3/3)] \right|^2. \quad (2.30')$$

Фигурирующий здесь двойной интеграл можно выразить через функции Эйри первого и второго рода $Ai(z)$ и $Bi(z)$:

$$\mathcal{F} = \frac{2\pi^3}{T_0^3 \Theta^4} | Ai(x) Ai(y) - i[\theta(x-y) Ai(x) Bi(y) + \theta(y-x) Ai(y) Bi(x)]|^2, \quad (2.34)$$

где $\theta(x-y)$ — ступенчатая функция.

В случае невырожденного электронного газа $n_F(\mathbf{k}, c) \ll 1$ и характерное значение энергии $\hbar^2 k^2 / 2m_c$ — порядка T , т. е. $|\hbar \mathbf{k}| \sim \sqrt{2m_c T}$. Если $(m_c/m_r)T \ll \hbar\Theta$, то интеграл \mathcal{F} слабо зависит от k_\perp и его можно вынести за знак суммы по \mathbf{k} в (2.29) при $k_\perp = 0$. Оставшаяся сумма $\sum_{\mathbf{k}} n_F(\mathbf{k}, c) [1 - n_F(\mathbf{k}, c)] \approx \sum_{\mathbf{k}} n_F(\mathbf{k}, c)$ равна $n\Omega$, где n — концентрация свободных электронов, а Ω — объем образца. Таким образом, окончательно

$$\left(\frac{d^2 \sigma_e}{d\Omega d\omega_s} \right)_0 = K_e E \left(\frac{\omega_g - \omega_i}{\Theta}, \frac{\omega_g - \omega_s}{\Theta} \right), \quad (2.35)$$

где

$$K_e = n\Omega \left(\frac{e^2}{m_0 c^2} \right)^2 f_{cv}^i f_{cv}^s \frac{\pi^2 \omega_g^2 v}{4\Theta^4}, \quad (2.36)$$

$$E(x, y) = \begin{cases} Ai^2(x) [Ai^2(y) + Bi^2(y)], & x > y, \\ Ai^2(y) [Ai^2(x) + Bi^2(x)], & x < y, \end{cases} \quad (2.37)$$

и

$$f_{cv}^{i,s} = \frac{2 |p_{cv}^{i,s}|^2}{m_0 \hbar \omega_g}, \quad v = \frac{2\pi \hbar K}{e |\xi|}. \quad (2.38)$$

б) *Комбинационное рассеяние фононами.* Обратимся теперь к рассмотрению комбинационного рассеяния света с участием фононов. Соответствующий вклад в оператор A дается выражением

$$A_{\text{ph}}(\omega_s, \omega_i) = \frac{m_0}{i\hbar e^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{i\omega_s t} \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\omega_i t'} \times \\ \times \{ [J_0^s(t), J_1^i(t')]_- + [J_1^s(t), J_0^i(t')]_- \} \quad (2.39)$$

или, с учетом (2.16),

$$A_{\text{ph}}(\omega_s, \omega_i) = - \frac{m_0}{\hbar^2 e^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{i\omega_s t} \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\omega_i t'} \times \\ \times \left\{ \int_{-\infty}^{t'} dt'' [J_0^s(t), [J_0^i(t'), H_{e,\text{ph}}(t'')]]_- + \right. \\ \left. + \int_{-\infty}^t dt'' [[J_0^s(t), H_{e,\text{ph}}(t'')]_-, J_0^i(t')]_- \right\}. \quad (2.40)$$

Пользуясь теперь формулами (2.17) и замечая, что

$$b_q^+(t) = \exp(i\omega_q t) b_q^+, \quad b_q(t) = \exp(-i\omega_q t) b_q, \quad (2.41)$$

можем переписать оператор взаимодействия электронов с фонами в виде

$$H_{e, ph} = \sum_q \sum_{k, l} V(k_{-l}, q; l) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\theta [E(k_\theta + q, l) - E(k_\theta, l)] \right\} \times \\ \times a_{k+q, l}^+ a_{k, l} (\exp(-i\omega_q t) b_q + \exp(i\omega_q t) b_q^+). \quad (2.42)$$

Пользуясь соотношениями (2.15), (2.19) и (2.42), мы можем без труда вычислить двойные коммутаторы, фигурирующие в правой части (2.40). Для простой двухзонной модели, рассмотренной в п. а), мы получаем $(\omega_{c, v}(\mathbf{k}) = E_{c, v}(\mathbf{k})/\hbar)$

$$A_{ph}(\omega_s, \omega_i) = -\frac{1}{\hbar^2 m_0^2} \sum_q \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' \times \\ \times \left\{ p_{vc}^s(\mathbf{k}_t + \mathbf{q}) V(\mathbf{k}_t'', \mathbf{q}; c) \exp \left[-i \int_0^t d\theta (\omega_{cv}(\mathbf{k}_\theta + \mathbf{q}) - \omega_s) + \right. \right. \\ \left. \left. + i \int_0^{t''} d\theta (\omega_c(\mathbf{k}_\theta + \mathbf{q}) - \omega_c(\mathbf{k}_\theta)) \right] - p_{cv}^s(\mathbf{k}_t) V(\mathbf{k}_t'', \mathbf{q}; v) \times \right. \\ \left. \times \exp \left[-i \int_0^t d\theta (\omega_{cv}(\mathbf{k}_\theta) - \omega_s) + i \int_0^{t''} d\theta (\omega_{cv}(\mathbf{k}_\theta + \mathbf{q}) - \omega_v(\mathbf{k}_\theta)) \right] \right\} \times \\ \times p_{cv}^i(\mathbf{k}_{-t'}) \exp \left[i \int_0^{t'} d\theta (\omega_v(\mathbf{k}_\theta) - \omega_i) \right] \times \\ \times \{ b_q e^{-i\omega_q t''} + b_q^+ e^{i\omega_q t''} \} a_{k+q, v}^+ a_{k, v} + \dots \quad (2.43)$$

Здесь опущены (обозначенные многоточием) три слагаемых, построенных так же, как и явно выписанное выражение. Простоты ради (как и в п. а)) опущены и все нерезонансные вклады. Подставим теперь выражение (2.43) в правую часть (2.6) и выполним усреднение по ансамблям невзаимодействующих электронов и фононов. Рассмотрим стоксову компоненту рассеянного света. При этом

$$\left(\frac{d^2 \sigma_{ph}}{d\Omega d\omega_s} \right)_\xi = \left(\frac{e^2}{m_0 c^2} \right)^2 \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega'_s \eta_\tau (\omega'_s - \omega_l) A_{ph}^*(\omega'_s, \omega_l) A_{ph}(\omega_s, \omega_l), \quad (2.44)$$

где

$$A_{\text{ph}}(\omega_s, \omega_i) = -\frac{1}{\hbar^2 m_0^2} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} p_{cv}^s(\mathbf{k}_{-t}) \times \\ \times \exp \left\{ -i \int_0^t d\theta [\omega_{cv}(\mathbf{k}_\theta) - \omega_s] \right\} \int_{-\infty}^t dt' \exp \left\{ -i \int_0^{t'} d\theta [\omega_{cv}(\mathbf{k}_\theta) - \omega_i] \right\} \times \\ \times p_{cv}^i(\mathbf{k}_{-t'}) \int_{t'}^t dt'' e^{i\omega_0 t''} [V(\mathbf{k}_{-t''}, 0; c) - V(\mathbf{k}_{-t''}, 0; v)]. \quad (2.45)$$

Через ω_0 здесь обозначена частота оптического фонона при $\mathbf{q} = 0$.

Пользуясь равенством (2.28) и полагая

$$V_{c,v}(\mathbf{k}, \theta) \approx V_{c,v}(0, 0) \equiv \sqrt{\Omega_0/\Omega} C_{c,v}, \quad (2.46)$$

где Ω_0 — объем элементарной ячейки, а $C_{c,v}$ — константы, мы можем сразу же выполнить интегрирование по t и t' . Переходя затем от суммирования по \mathbf{k} к интегрированию по обычной формуле (с учетом спинового множителя 2)

$$\sum_{\mathbf{k}} (\dots) \rightarrow \frac{\Omega}{4\pi^3} \int_0^\infty k_\perp dk_\perp \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\infty}^\infty dk_\parallel (\dots)$$

и интегрируя по φ , получаем для дифференциального сечения рассеяния

$$\left(\frac{d^2\sigma_{\text{ph}}}{d\Omega d\omega_s} \right)_g = K_{\text{ph}} \left| Q\left(\frac{\omega_g - \omega_i}{\Theta}\right) - Q\left(\frac{\omega_g - \omega_i + \omega_0}{\Theta}\right) \right|^2 \delta(\omega_i - \omega_s - \omega_0). \quad (2.47)$$

Здесь

$$K_{\text{ph}} = \Omega \left(\frac{e^2}{m_0 c^2} \right)^2 \left(1 - \frac{\omega_0}{\omega_i} \right) f_{cv}^i f_{cv}^s \Omega_0 \left(\frac{2m_r \omega_0}{\hbar} \right)^3 \times \\ \times \left(\frac{\omega_g}{\omega_0} \right)^2 \left(\frac{C_c - C_v}{4\hbar\omega_0} \right)^2 \frac{\Theta}{\omega_0}, \quad (2.48)$$

$$Q(x) = i \int_0^\infty \frac{dr}{2\pi^2} \int_{-\infty}^\infty ds \exp \{ -i[(r+x)s + s^3/3] \} \times \\ \times \int_{-\infty}^s ds' \exp \{ i[(r+x)s' + s'^3/3] \}. \quad (2.49)$$

Интегралы по s, s' дают

$$2\pi^2 [Ai^2(x+r) - iAi(x+r)Bi(x+r)],$$

и окончательно

$$Q(x) - Q(x') = \\ = \{Ai'(\xi) Bi'(\xi) - \zeta Ai(\zeta) Bi(\zeta) + i[Ai'^2(\zeta) - \zeta Ai^2(\zeta)]\}_{\xi=x}^{\xi=x'}. \quad (2.50)$$

Как видно из предшествующих выкладок, электрическое поле по-разному влияет на рассмотренные нами процессы рассеяния. При внутризонном рассеянии электрическое поле ускоряет электрон и дырку в возбужденном промежуточном состоянии, изменяя энергию возбуждения. Рекомбинация электронно-дырочной пары связана поэтому с испусканием фотона с энергией $\hbar\omega_s$, которая отличается от энергии падающего фотона $\hbar\omega_i$. Иначе говоря, внутризонное рассеяние света, упругое в отсутствие электрического поля, оказывается неупругим при наличии его.

С другой стороны, при комбинационном рассеянии фононами электрическое поле не изменяет частоту рассеянного света, коль скоро мы считаем достаточно большой длину корреляции случайного поля (Ф. Бехштедт, Р. Эндерлайн, 1977). Роль электрического поля в этом случае состоит в изменении зависимости сечения рассеяния от частоты падающего света.

Перейдем теперь ко второй части — усреднению по случайному полю. Воспользуемся, как и ранее, гауссовым распределением (V. 2.14). При внутризонном рассеянии мы получаем, пользуясь формулами (2.1), (2.35) и (V. 2.14),

$$\left\langle \frac{d^2\sigma_e}{d\Omega d\omega_s} \right\rangle = \tilde{K}_e \tilde{E} \left(\frac{\omega_g - \omega_i}{\tilde{\Theta}}, \frac{\omega_g - \omega_s}{\tilde{\Theta}} \right), \quad (2.51)$$

где

$$\tilde{E}(x, y) = \int d\xi P(\xi) \frac{\sqrt{\tilde{\Theta}^4}}{\tilde{\nu} \tilde{\Theta}^4} E \left(x \frac{\tilde{\Theta}}{\tilde{\nu}}, y \frac{\tilde{\Theta}}{\tilde{\nu}} \right), \quad (2.52)$$

$$\tilde{\Theta} = 3 \left(\frac{2}{3} \right)^{1/3} \frac{1}{\hbar S} = \left(\frac{\Psi_2}{2m_r \hbar} \right)^{1/3}, \quad (2.53)$$

$$\tilde{\nu} = \frac{\Psi_2^{1/2} 2\pi}{\hbar K_0}, \quad \tilde{K}_e = \frac{\tilde{\nu} \tilde{\Theta}^4}{\tilde{\nu} \tilde{\Theta}^4} K_e. \quad (2.54)$$

При интегрировании по всем направлениям вектора ξ в формуле (2.52) было принято, что модуль вектора обратной решетки \mathbf{K} в выражении (2.38) для ν есть константа K_0 . Это означает, что первая зона Бриллюэна аппроксимируется сферой радиуса K_0 . Символ Ψ_2 имеет прежний смысл (см. (П. XII. 1)), а величины x и y даются формулами (2.33).

Зависимость функции $\tilde{E}(x, y)$ от y определяет вид спектра рассеянного света в случайном электрическом поле при данной энергии падающего излучения. Эта функция была найдена численным методом. Результаты показаны на рис. 27—29. Из

рис. 27 видно, что спектр рассеянного света в случайном поле не слишком сильно отличается от спектра в «среднем» поле с напряженностью $|\mathcal{E}| = \psi_2^{1/2}/e$. При частоте $\omega_s = \omega_i$ функция \tilde{E}

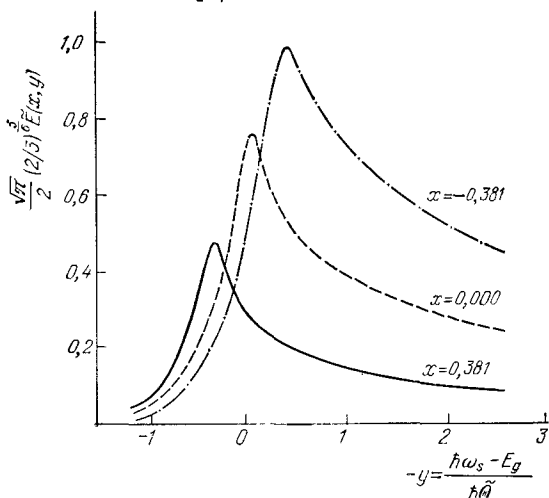


Рис. 27. Спектр рассеяния света при электронном внутризонном рассеянии в гауссовом случайном электрическом поле при разных энергиях $\hbar\omega_i$ падающего света. Параметр x дается выражением $x = (\omega_g - \omega_i)/\tilde{\omega}$.

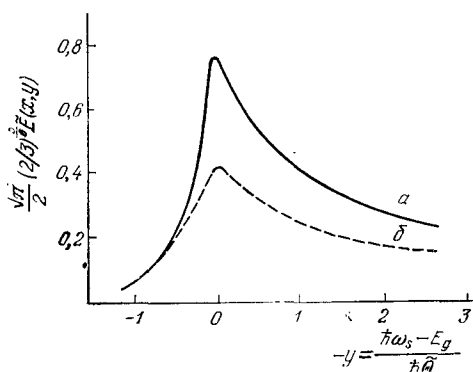


Рис. 28. Спектр рассеянного света при электронном внутризонном рассеянии а) в гауссовом случайном поле и б) в среднем поле $|\mathcal{E}| = e^{-1}\psi_2^{1/2}$. Энергия падающих квантов $\hbar\omega_i = \hbar\omega_g$ ($x = 0$).

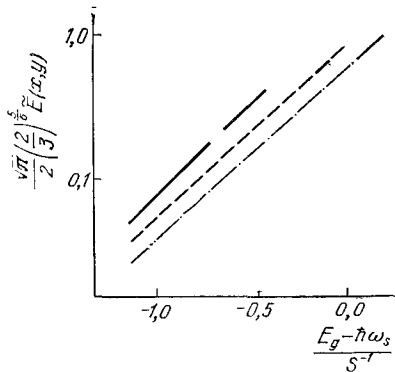


Рис. 29. Низкочастотная часть («хвост») спектра рассеянного света, изображенного на рис. 27 (логарифмический масштаб).

имеет максимум, убывая в сторону высоких энергий примерно как обратный квадратный корень, а в сторону низких энергий — практически экспоненциально с показателем, равным S (рис. 29).

Поэтому среднее значение напряженности случайного поля $\psi_2^{1/2}/e$ можно определить как из спектра поглощения, так и из спектра комбинационного рассеяния.

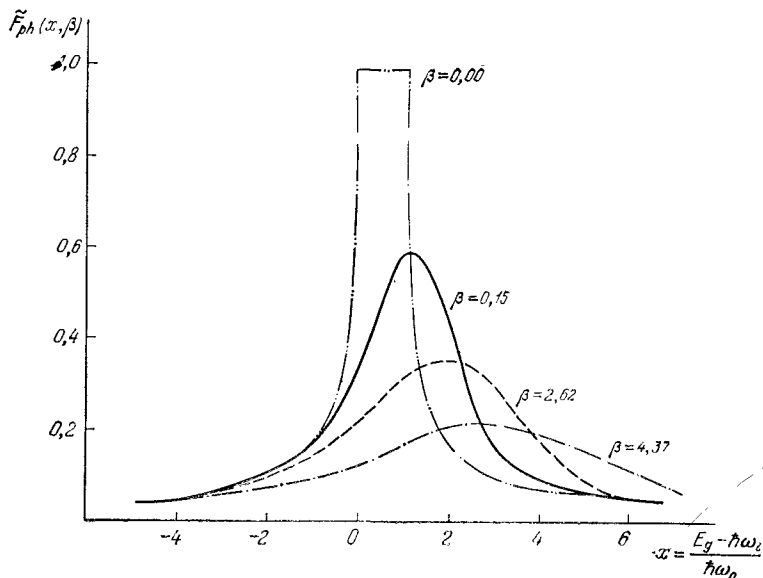


Рис. 30. Зависимость сечения комбинационного рассеяния света фонами от энергии падающего света.

Обращаясь теперь к резонансному комбинационному рассеянию фонами и пользуясь формулами (2.1), (2.47) и (V.2.14), мы получаем

$$\left\langle \frac{d^2\sigma_{\text{ph}}}{d\Omega d\omega_s} \right\rangle = \tilde{K}_{\text{ph}} \tilde{F}_{\text{ph}} \left(\frac{\omega_g - \omega_i}{\omega_0}, \frac{\tilde{\Theta}}{\omega_0} \right) \delta(\omega_i - \omega_s - \omega_0), \quad (2.55)$$

$$\tilde{F}_{\text{ph}}(x, \beta) = \int d\varepsilon \frac{\Theta}{\Theta} P(\varepsilon) \left| Q\left(\frac{\tilde{\Theta}x}{\Theta\beta}\right) - Q\left(\frac{\tilde{\Theta}(x-1)}{\Theta\beta}\right) \right|^2, \quad (2.56)$$

$$\tilde{K}_{\text{ph}} = \frac{\tilde{\Theta}}{\Theta} K_{\text{ph}}, \quad \beta = \frac{\tilde{\Theta}}{\omega_0}. \quad (2.57)$$

Функция $\tilde{F}_{\text{ph}}(x, \beta)$ определяет частотную зависимость резонансного комбинационного рассеяния фонами в случайном электрическом поле. Результаты численного расчета этой функции приведены на рис. 30. Видны два эффекта случайного поля. Во-первых, резонансное увеличение рассеяния сглаживается по мере роста среднего значения случайного поля. Оно практиче-

ски исчезает, когда характерная частота $\hat{\Theta}$ больше частоты фонона ω_0 . Во-вторых, с ростом случайного поля максимум кривой $F_{ph}(\omega)$ сдвигается в сторону более высоких энергий.

§ 3*. Влияние гладкого поля на комбинационное рассеяние в случае $l_c \gg \xi_0$

Рассмотрим теперь однофононное резонансное комбинационное рассеяние света в условиях (1.11). Случайное поле по-прежнему будем считать гладким. Это означает, что длина ξ_0 не слишком мала. В соответствии с равенствами (1.19), (1.20) в данном случае главную роль играют величины $\Delta j_s(\mathbf{x}, t; C)$, которые следует усреднить с функцией распределения $p_1(C)$. Выделение линейной по $H_{int}(t')$ и $H_{e,ph}$ части оператора $\Delta j(\mathbf{x}, t)$ при этом удобно производить не непосредственно, а вводя функцию Грина и пользуясь затем стандартным разложением S -матрицы. Как и в § 2, будем считать, что валентная зона целиком заполнена, а зона проводимости пуста и температура достаточно низкая. Тогда «электронная» часть усреднения в (1.19) сводится к усреднению по основному состоянию полупроводника. Интересуясь лишь рассеянным светом в ограниченной спектральной области (см. § 1), мы можем расценить «электронную» часть усреднения в правой части (1.19)*:

$$\langle \Delta j_s(\mathbf{x}', t'; C) \Delta j_s(\mathbf{x}, t; C) \rangle_e = \langle \Delta j_s(\mathbf{x}', t'; C) \rangle_e \langle \Delta j_s(\mathbf{x}, t; C) \rangle_e. \quad (3.1)$$

Символ $\langle \dots \rangle_e$ здесь обозначает усреднение по основному состоянию электронной подсистемы.

Вводя причинную функцию Грина, получаем

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi} \int d\mathbf{x} \int dt \langle \Delta j_s(\mathbf{x}, t; C) \rangle_e e^{i\omega_s t} = \\ & = \frac{e}{m_0} \sum_{\mathbf{k}, l', l} (\mathbf{k}l' | \mathbf{e}_s \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{k}l) \frac{-i}{2\pi} \int dt e^{i\omega_s t} \Delta G(\mathbf{k}, l; \mathbf{k}', l'; t - t') \Big|_{\substack{\mathbf{k}' = \mathbf{k} \\ t' = t + 0}}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Здесь $\Delta G(\mathbf{k}, l; \mathbf{k}', l'; t - t')$ есть линейное по $H_{int}(t)$ и $H_{e,ph}$ слагаемое в разложении функции

$$G(\mathbf{k}, l; \mathbf{k}', l'; t - t') = i \langle T \{ a_{\mathbf{k}l}(t) a_{\mathbf{k}'l'}^\dagger(t') \} \rangle_e. \quad (3.3)$$

*) Справедливость этого утверждения можно доказать, рассматривая фурье-образ недиагональных матричных элементов оператора Δj_s . Мы имеем

$$\langle \lambda' | \Delta j_s(\omega) | \lambda \rangle \sim \delta(\omega_s - \omega_l - \omega_q + \omega_{\lambda\lambda'}),$$

где ω_q — фононная частота. Таким образом, при $\lambda' \neq \lambda$ имеет место дополнительный частотный сдвиг, который в рассматриваемом случае оказывается порядка ширины запрещенной зоны.

Именно:

$$\begin{aligned} \Delta G(\mathbf{k}, l; \mathbf{k}', l'; l' - t) |_{t' = t + 0} = \\ = \frac{(-i)^3}{\hbar^2} \int dt_1 \int dt_2 \langle T \{ a_{\mathbf{k}l}(t) a_{\mathbf{k}'l'}^+(l') H_{\text{int}}(t_1) H_{\text{e, ph}}(t_2) \} \rangle_{\text{e}}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Временная зависимость операторов, фигурирующих в правой части (3.4), определяется гамильтонианом

$$H_U = H_e + \sum_{\mathbf{k}, l, \mathbf{k}', l'} (\mathbf{k}l | U | \mathbf{k}'l') a_{\mathbf{k}l}^+ a_{\mathbf{k}'l'}, \quad (3.5)$$

где H_e — электронный гамильтониан (2.10). Подставляя в (3.4) явные выражения для $H_{\text{int}}(t)$ и $H_{\text{e, ph}}(t)$ и расцепляя причинные функции Грина по теореме Вика, находим

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int d\mathbf{x} \int dt e^{i\omega_s t} \langle \Delta j_s(\mathbf{x}, t; C) \rangle_{\text{e}} \approx \\ \approx \frac{ie^2 p_{vc}^s p_{cv}^i}{2\pi m_0^2 c \hbar^2} \sum_{\mathbf{q}} \int dt_2 \int d\omega e^{-i\omega t_2} \times \\ \times [b_{\mathbf{q}}^+(t_2) + b_{-\mathbf{q}}(t_2)] \sum_{l=c, v} V_l h_l(\omega_l, \omega_s, \omega; \mathbf{q}). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Здесь оставлены только резонансные слагаемые, которые даются выражениями

$$\begin{aligned} h_v(\omega_i, \omega_s, \omega; \mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \int dt \int dt_1 \int dt_2 \exp(i\omega_s t - i\omega_i t_1 + i\omega t_2) \times \\ \times G^c(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1; t - t_1) G^v(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}; t_1 - t_2) G^v(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}, t_2 - t) \end{aligned} \quad (3.7)$$

и

$$\begin{aligned} h_c(\omega_i, \omega_s, \omega; \mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \int dt \int dt_1 \int dt_2 \exp(i\omega_s t - i\omega_i t_1 + i\omega t_2) \times \\ \times G^c(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}; t - t_2) G^c(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, t_2 - t_1) G^v(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}, t_1 - t). \end{aligned} \quad (3.8)$$

При расцеплении мы, как и в предыдущих главах, считали, что случайное поле не перемешивает состояния с разными зонными индексами, т. е. зонный индекс (поставленный сверху у причинных функций Грина) остается хорошо определенным квантовым числом. При выводе равенства (3.6) матричные элементы оператора импульса p_{vc}^s , p_{cv}^i и электрон-фононного взаимодействия V_c , V_v считались слабо зависящими от \mathbf{k} и \mathbf{q} и были вынесены из-под знаков соответствующих сумм. Переходя в причинных функциях Грина к координатно-энергетическому представлению,

получаем для суммы в правой части (3.6)

$$\sum_{l=c, v} V_l h_l(\omega_i, \omega_s, \omega; \mathbf{q}) = \delta(\omega_i - \omega_s - \omega) h(\omega_i, \omega; \mathbf{q}; C). \quad (3.9)$$

Функция h_l здесь содержит вклады от двух резонансных составляемых (3.7) и (3.8):

$$h(\omega_i, \omega; \mathbf{q}; C) = (2\pi)^2 \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}_1 \int d\nu G^c(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; \nu - \omega + \omega_i) \times \\ \times \{G^v(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1; \nu - \omega) V_v e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_1} + V_c e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}_2} G^c(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1; \nu + \omega_i)\} \times \\ \times G^v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}; \nu). \quad (3.10)$$

В аргументе $h(\omega_i, \omega; \mathbf{q}; C)$ явно указана случайная величина C , от которой зависит эта функция через «одетые» случайным полем причинные функции Грина.

Пусть теперь, как и в предыдущем параграфе, операторы $b_q(t)$, $b_q^+(t)$ даются выражениями (2.41). Тогда интеграл по t_2 в правой части (3.6) дает δ -функцию $\delta(\omega \pm \omega_{\mp q})$, т. е., согласно (3.9), $\omega_s = \omega_i \pm \omega_{\mp q}$, чего и следовало ожидать при однофононном комбинационном рассеянии.

Подставляя выражение (3.6) в правую часть (1.20), находим дифференциальное сечение рассеяния в виде *)

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} \Big|_{\text{стокс}} \sim \left(\frac{e^2}{m_0 c^2}\right)^2 \frac{|P_{vc}^s P_{cv}^i|^2}{m_0^2} \times \\ \times \sum_q \delta(\omega_i - \omega_s - \omega_q) (1 + N_q) |\tilde{h}(\omega_i, \omega_i - \omega_s; \mathbf{q})|^2. \quad (3.11)$$

Здесь

$$\tilde{h}(\omega_i, \omega; \mathbf{q}) = \int dC \rho_1(C) h(\omega_i, \omega; \mathbf{q}; C) \quad (3.12)$$

есть усредненная по случайной величине C функция (3.10), а N_q есть фононное число заполнения:

$$N_q = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_q/T) - 1}. \quad (3.13)$$

При выводе формулы (3.11) мы, как и раньше, принимали во внимание только стоксову компоненту рассеянного света, для которой $\omega_s = \omega_i - \omega_q$. Соответствующее выражение для антистоксовой компоненты получается с помощью одновременной замены $\omega_q \rightarrow -\omega_q$ под знаком δ -функции и $N_q + 1 \rightarrow N_q$ в (3.11).

Рассмотрим теперь более подробно материал, в котором имеют место флуктуации ширины запрещенной зоны, т. е. слу-

*) Для краткости здесь опущен несущественный численный множитель.

чайное поле зависит от зонного индекса (случай Б), § V. 2). Здесь для вычисления функций Грина, фигурирующих в формуле (3.10), достаточно ограничиться классическим приближением*). Как мы сейчас увидим, усреднение по величине C в (3.12) сводится тогда, как и следовало ожидать, к усреднению по случайной части ширины запрещенной зоны, а функция $\rho_1(C)$ есть функция распределения соответствующих флуктуаций.

Причинные функции Грина, входящие в правую часть (3.10), легко выразить через запаздывающие и опережающие. Действительно, из определения этих функций [14] следует, что в случае полностью заполненной валентной зоны и совершенно пустой зоны проводимости мы имеем

$$G^v(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = G_a^v(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) \quad (3.14)$$

и

$$G^c(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = G_r^c(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega). \quad (3.15)$$

Здесь $G_a^v(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega)$ и $G_r^c(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega)$ суть фурье-образы по времени от опережающей и запаздывающей одноэлектронных антикоммутаторных функций Грина валентной зоны и зоны проводимости соответственно. Функция $G_r^c(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega)$ для гладкого случайного поля вычислена в приложении XII, выражение для G_a^v получается из G_r^c стандартным путем. Таким образом, в классическом приближении по случайному полю мы имеем

$$\begin{aligned} G_r^c(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = \\ = \frac{i\hbar}{(2\pi)^4} \int_0^\infty ds \int d\mathbf{k} \exp \{is[\hbar\omega^+ - E_c(\mathbf{k}) - U_c(\mathbf{R})] + i\mathbf{k}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\} \end{aligned} \quad (3.16)$$

и

$$\begin{aligned} G_a^v(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = \\ = - \frac{i\hbar}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^0 ds \int d\mathbf{k} \exp \{is[\hbar\omega^- - E_v(\mathbf{k}) - U_v(\mathbf{R})] + i\mathbf{k}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\}, \end{aligned} \quad (3.17)$$

где $\omega^\pm = \omega \pm i\varepsilon$ и

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{x} + \mathbf{x}'). \quad (3.18)$$

Теперь легко получить и интегральные представления для причинных функций, фигурирующих в формуле (3.10). При этом

*) Обобщение на случай одинакового искривления зон (случай А, § V. 2), когда необходим учет квантовых поправок, дается в конце этого параграфа.

выражение для $h(\omega_i, \omega; \mathbf{q}; C)$ можно упростить, заметив, что квазиклассическое случайное поле $U(\mathbf{R})$ медленно меняется на характерной длине $|\mathbf{x} - \mathbf{x}_2| \sim |\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1| \sim |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}| \sim \lambda$, где λ — длина волны де Бройля для электрона. Таким образом, с принятой степенью точности аргументы случайного поля в выражении (3.10) можно считать совпадающими. Вычисляя интегралы по разностям координат, мы получаем

$$h(\omega_i, \omega; \mathbf{q}; C) = \frac{i\hbar^2}{(2\pi)^4} (V_c - V_v) \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{R} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} A(\omega_i, \omega; \mathbf{R}; C), \quad (3.19)$$

где

$$A(\omega_i, \omega; \mathbf{R}; C) = \Omega \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar\omega_i^+ - E_{cv}(\mathbf{k}) - \Delta(\mathbf{R})} \frac{1}{\hbar\omega_i^+ - \hbar\omega - E_{cv}(\mathbf{k}) - \Delta(\mathbf{R})}. \quad (3.20)$$

Здесь через $\Delta(\mathbf{R})$ обозначена случайная часть ширины запрещенной зоны:

$$\Delta(\mathbf{R}) = U_c(\mathbf{R}) - U_v(\mathbf{R}), \quad (3.21)$$

а

$$E_{cv}(\mathbf{k}) = E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}). \quad (3.22)$$

При $\Delta(\mathbf{R}) = 0$ функция (3.20) сводится к амплитуде однофотонного резонансного комбинационного рассеяния в кристаллическом материале. Видно, что в данном случае случайную величину C следует отождествить со случайной частью ширины запрещенной зоны (3.21):

$$C(\mathbf{R}) \equiv \Delta(\mathbf{R}), \quad (3.23)$$

а функция $p_1(C)$ сводится к функции распределения флуктуаций ширины запрещенной зоны $p_1(E)$:

$$p_1(E) = \langle \delta(E - \Delta(\mathbf{R})) \rangle. \quad (3.24)$$

Так как координатная зависимость функции $A(\omega_i, \omega; \mathbf{R}; C)$ обусловлена именно величиной $\Delta(\mathbf{R})$, мы можем положить

$$A(\omega_i, \omega; \mathbf{R}; \Delta(\mathbf{R})) \equiv A(\omega_i, \omega; \Delta(\mathbf{R})). \quad (3.25)$$

Заметим теперь, что усредненная с функцией $p_1(E)$ функция $A(\omega_i, \omega; E)$ уже не зависит от координат. Таким образом, формулы (3.12) и (3.19) дают

$$\tilde{h}(\omega_i, \omega_0; \mathbf{q}) = \frac{i\hbar^2}{(2\pi)^4} (V_c - V_v) \delta_{\mathbf{q}, 0} \tilde{A}(\omega_i, \omega_0), \quad (3.26)$$

где

$$\tilde{A}(\omega_i, \omega_0) = \int dE p_1(E) A(\omega_i, \omega_0; E). \quad (3.27)$$

Символ Кронекера $\delta_{q,0}$, появившийся в правой части (3.26) в результате усреднения и интегрирования по координатам в формуле (3.19), вырезает из входящей в сечение рассеяния (3.11) суммы по q член с $q = 0$. Иначе говоря, получается дискретная линия рассеянного света $\omega_s = \omega_i - \omega_0$, где ω_0 — частота оптического фонона с волновым вектором $q = 0$. В соответствии с этим мы положили $\omega = \omega_0$ во вторых аргументах функций \tilde{h} и \tilde{A} в формулах (3.26) и (3.27)*. Зависимость интенсивности этой дискретной линии от частоты падающего света, описываемая функцией $|\tilde{A}(\omega_i, \omega_0)|^2$ в (3.11) и (3.26), видоизменяется случайным полем. В частности, в выражении (3.27) для $|\tilde{A}(\omega_i, \omega_0)|^2$ содержится эффект ослабления резонанса за счет случайного поля, действующего на электроны. Для исследования этого эффекта удобно представить подынтегральное выражение в правой части (3.20) в виде разности двух простых дробей. Функция $A(\omega_i, \omega_0; E)$ при этом выражается через комплексные диэлектрические проницаемости ϵ , отвечающие междузонным переходам при заданной ширине запрещенной зоны $E_g + E$:

$$A(\omega_i, \omega_0; E) \sim \frac{1}{\omega_0} [\epsilon(\omega_i, E_g + E) - \epsilon(\omega_i - \omega_0, E_g + E)]. \quad (3.28)$$

Множитель пропорциональности в (3.28) содержит постоянные матричные элементы. Усреднение по флуктуациям ширины запрещенной зоны в (3.27) сводится теперь к усреднению комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon(\omega_i, E_g + E)$. Соответствующий результат (для случая гауссовой статистики случайного поля) был получен в § V.2. Подставляя его в правую часть (3.28) и вычисляя квадрат модуля, можно построить зависимость интенсивности дискретной линии от частоты ω_i . Поскольку в усредненной диэлектрической проницаемости особенности Ван Хова сглажены, дисперсионная кривая также оказывается сглаженной по сравнению с кристаллическим случаем. Пользуясь интегральным представлением усредненной диэлектрической проницаемости, выведенным в § V.2, легко получить и интегральное представление для функции $\tilde{A}(\omega_i, \omega_0)$:

$$\begin{aligned} \tilde{A}(\omega_i, \omega_0) &= \\ &= \Omega B e^i \frac{\pi}{4} \int_0^\infty \frac{ds}{s^{3/2}} \sin(s\hbar\omega_0/2) \exp[is\hbar(\omega_i - \omega_g - \omega_0/2) - s^2\Delta^2/2]. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Здесь $\hbar\omega_g = E_g$, Δ^2 — среднеквадратичная флуктуация ширины запрещенной зоны, а в константу B включены постоянные ма-

* Наряду с этой дискретной линией при данной постановке задачи получается еще спектр, интенсивность которого в $(\xi_0/l_c)^3$ раз меньше, чем у дискретной линии (Б. Эссер, 1978). Этот спектр отвечает слагаемому, отброшенному при выводе (1.18).

тричные элементы. Из рассмотрения квадрата модуля правой части (3.29) следует, что дисперсионная кривая в данном случае симметрична по отношению к частоте $\omega_i = \omega_g + \omega_0/2$, которая соответствует максимальной интенсивности. В случае сильных флуктуаций ширины запрещенной зоны,

$$\hbar\omega_0 < \Delta, \quad (3.30)$$

мы получаем из (3.29)

$$|\tilde{A}(\omega_g + 1/2\omega_0, \omega_0)|^2 \sim 1/\Delta. \quad (3.31)$$

Таким образом, высота максимума дисперсионной кривой убывает обратно пропорционально среднеквадратичной флуктуации Δ .

Обратимся теперь к случаю $U_c(\mathbf{R}) = U_v(\mathbf{R})$, когда $\Delta(\mathbf{R}) = 0$ и обязательным оказывается учет квантовых поправок, связанных со случайным полем. Как и при вычислении междузонной диэлектрической проницаемости в § V.2, главную роль при этом играет поправка, связанная с напряженностью случайного поля, $\xi_i = \nabla U/e$; случайную величину C здесь, как и в § 2, следует отождествить с вектором ξ_i . Под $p_1(C)$ теперь следует понимать функцию распределения напряженности гладкого случайного поля $P(\xi_i)$ (V.2.14). Амплитуду комбинационного рассеяния света в кристалле в присутствии постоянного электрического поля можно вычислить, учитывая в одночастичных функциях (3.16), (3.17) постоянное электрическое поле ξ_i . Результаты можно представить в виде разности двух комплексных диэлектрических проницаемостей ϵ^{KF} , описывающих эффект Келдыша—Франца (К. Пойкер, Ф. Бехштедт, Р. Эндерлайн, 1974; А. А. Абдусалимов, А. А. Клочихин, 1974):

$$\tilde{A}(\omega_i, \omega_0; \xi_i) \sim \frac{1}{\omega_0} [\epsilon^{KF}(\omega_i, \xi_i) - \epsilon^{KF}(\omega_i - \omega_0, \xi_i)]. \quad (3.32)$$

Зависимость интенсивности дискретной линии рассеянного света с частотой $\omega_s = \omega_i - \omega_0$ от частоты падающего света ω_i определяется теперь квадратом модуля усредненной функции (3.32):

$$\tilde{A}(\omega_i, \omega_0) = \int d\xi_i P(\xi_i) A(\omega_i, \omega_0; \xi_i). \quad (3.33)$$

Правая часть (3.33) выражается через усредненные по напряженности случайного поля функции $\epsilon^{KF}(\omega_i, \xi_i)$. Для случая гауссовой статистики случайного поля они вычислены в § V.2. Пользуясь этими функциями, можно построить дисперсионную кривую. Для функции $\tilde{A}(\omega_i, \omega_0)$ получается интегральное

представление (B' — константа того же типа, что и B):

$$\begin{aligned} \tilde{A}(\omega_i, \omega_0) = \Omega B' e^{i\pi/4} \int_0^\infty \frac{ds}{s^{3/2}} \sin(s\hbar\omega_0/2) \times \\ \times \left(1 + i \frac{s^3 \hbar^2 \psi_2}{36 m_r}\right)^{-3/2} \exp[i s \hbar (\omega_i - \omega_g - \omega_0/2)]. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Рассмотрим случай не слишком малых флуктуаций напряженности внутреннего поля, когда, подобно (3.30),

$$\hbar\omega_0 < (\hbar^2 \psi_2 / m_r)^{1/3}. \quad (3.35)$$

При этом из формулы (3.34) вытекает результат (Б. Эссер, 1978), в известной мере аналогичный (3.31): при возрастании среднеквадратичной напряженности случайного поля $(2\psi_2)^{1/2}/e$ высота дисперсионной кривой на частоте $\omega_i = \omega_g + \omega_0/2$ убывает по закону

$$|\tilde{A}(\omega_g + 1/2\omega_0, \omega_0)|^2 \sim \frac{1}{\psi_2^{1/3}}. \quad (3.36)$$

I.* Теоремы о корреляции

Для доказательства первой теоремы о корреляции удобно воспользоваться общей формулой для тензора электропроводности на круговой частоте ω . Будем рассматривать макроскопически однородную систему в отсутствие магнитного поля. В этих условиях одноэлектронная функция Грина в координатном представлении зависит только от разностей пространственных координат, и, следовательно, можно ввести ее фурье-образ, зависящий только от одного волнового вектора p (пользуясь системой единиц, в которой $\hbar = 1$, мы не будем различать волновые векторы и импульсы). В соответствии с постановкой задачи пренебрежем также пространственной дисперсией. Тогда интересное нас выражение имеет вид ([14], § 15)

$$\sigma_{ij}(\omega) = \frac{e^2}{m} (2\pi)^1 \text{Sp}_s \int dp p_i \lim_{t \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 e^{ip_0 t} \times \\ \times \frac{\partial}{\partial k_j} \left[G_c \left(p + \frac{k}{2} \right) \Gamma_e^{(0)} \left(p + \frac{k}{2}, p - \frac{k}{2} \right) G_c \left(p - \frac{k}{2} \right) \right]_{k=0}. \quad (\text{I. 1})$$

Здесь $G_c(p)$ — фурье-образ причинной функции Грина, символ Sp_s обозначает шпур только по спиновым переменным, m — масса носителя заряда (истинная или эффективная — в зависимости от постановки задачи). Символы p и k обозначают четырехмерные переменные $p = \{p_0, \mathbf{p}\}$, $k = \{\omega, \mathbf{k}\}$; $\Gamma_e^{(0)}$ — фурье-образ скалярной компоненты полной электромагнитной вершинной части. Он определяется *) равенством

$$-\frac{\delta G_c^{-1}(x', x'')}{e\delta A_0(x)} = \\ = \frac{1}{(2\pi)^8} \int dp' dp'' \Gamma_e^{(0)}(p', p'') \exp[-i(p', x' - x) + i(p'', x'' - x)], \quad (\text{I. 2})$$

где x, x', x'' — совокупности трех пространственных и одной временной переменных, — A_0 — скалярный потенциал.

Напомним, что, помимо обычного усреднения по основному состоянию системы, в определение функций Грина (а потому и вершинной части) у нас входит также и усреднение по случайному полю. В частности, в

*) Принятые определения, равно как и доказательства дальнейших утверждений относительно общих свойств функций Грина, можно найти, например, в книге [14].

одноэлектронной задаче мы имели бы (сравните с (I.6.9))

$$G_c(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = -\frac{1}{2\pi} \left\langle \sum_{\lambda} \frac{\psi_{\lambda}(\mathbf{x}) \psi_{\lambda}^*(\mathbf{x}')}{E - E_{\lambda} + i\varepsilon\eta(E)} \right\rangle, \quad (I.3)$$

где $\varepsilon \rightarrow +0$, а η — знаковая функция:

$$\eta(E) = \text{sign}(E - F) = \begin{cases} 1, & E > F, \\ -1, & E < F. \end{cases}$$

В дальнейшем будет удобно воспользоваться обычной записью

$$G_c(p) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \frac{1}{p_0 - E(p) - M_c(p, p_0)}, \quad (I.4)$$

где M_c — массовый оператор*), сопоставленный причинной функции Грина, а $E(p)$ — энергия электрона, соответствующая решению вспомогательной задачи с периодическим полем. В аналогичном виде можно представить и опережающую и запаздывающую функции Грина, причем при $T = 0$ имеют место соотношения

$$\begin{aligned} G_c(p) &= \theta(p_0 - F_0) G_r(p) + \theta(F_0 - p_0) G_a(p), \\ M_c(p) &= \theta(p_0 - F_0) M_r(p) + \theta(F_0 - p_0) M_a(p). \end{aligned} \quad (I.5)$$

Далее, при любой температуре и $p_0 \in \text{Re}$

$$\text{Re } G_r(p) = \text{Re } G_a(p), \quad \text{Im } G_r(p) = -\text{Im } G_a(p). \quad (I.6)$$

С помощью массового оператора удобно учитывать как взаимодействие электронов друг с другом, с фононами и т. д., так и их взаимодействие со случайным полем. В последнем случае, согласно (I.6.9), в области дискретного спектра $\text{Im } M_r = 0$, коль скоро мы пренебрегаем взаимодействием электронов с фононами.

Выполняя явно дифференцирование по k в формуле (I.1), мы получаем

$$\sigma_{ij}(\omega) = \sigma_{ij}^{(1)} + \sigma_{ij}^{(2)}, \quad (I.7)$$

где

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^{(1)} &= \frac{e^2}{2m} (2\pi)^4 \text{Sp} \int d\mathbf{p} p_i \lim_{t \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{\infty} d\rho_0 e^{i\rho_0 t} \times \\ &\times \Gamma_e^{(0)}\left(\mathbf{p}, p_0 + \frac{\omega}{2}; \mathbf{p}, p_0 - \frac{\omega}{2}\right) \left\{ G_c\left(\mathbf{p}, p_0 - \frac{\omega}{2}\right) \frac{\partial}{\partial p_j} G_c\left(\mathbf{p}, p_0 + \frac{\omega}{2}\right) - \right. \\ &\quad \left. - G_c\left(\mathbf{p}, p_0 + \frac{\omega}{2}\right) \frac{\partial}{\partial p_j} G_c\left(\mathbf{p}, p_0 - \frac{\omega}{2}\right) \right\}, \quad (I.8) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^{(2)} &= \frac{e^2}{m} (2\pi)^4 \text{Sp} \int d\mathbf{p} p_i \lim_{t \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{\infty} d\rho_0 e^{i\rho_0 t} \times \\ &\times G_c\left(\mathbf{p}, p_0 + \frac{\omega}{2}\right) G_c\left(\mathbf{p}, p_0 - \frac{\omega}{2}\right) \left[\frac{\partial}{\partial k_j} \Gamma_e^{(0)}\left(\mathbf{p} + \frac{k}{2}, \mathbf{p} - \frac{k}{2}\right) \right]_{k=0}. \quad (I.9) \end{aligned}$$

*) Это определение M_c отличается от принятого в [14] множителем $(2\pi)^3$.

При наличии поверхности Ферми, когда компоненты квазимпульса при энергии, близкой к фермиевской, представляют собой хорошие квантовые числа, первая теорема о корреляции справедлива тривиально. По этой причине мы будем рассматривать лишь характерный для неупорядоченных систем случай, когда затухание фермиевских квазичастиц всюду конечно и представление о четкой поверхности Ферми оказывается неоправданным*). При этом фигурирующие в дальнейшем функции $G_r(p)$ и $G_a(p)$ не имеют полюсов на вещественной оси p_0 ; далее, они суть непрерывные функции p .

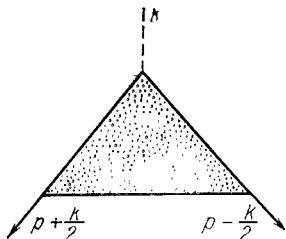


Рис. 31.

Рассмотрим сначала второе слагаемое (I.9). Здесь удобно воспользоваться графическим методом. Вершинная часть $\Gamma_e^{(0)}(p \pm k/2, p \mp k/2)$ определяется суммой диаграмм с тремя концами — одним фотонным и двумя электронными, причем первому соответствует 4-импульс k , а второму и третьему $p \pm k/2$ и $p \mp k/2$ (рис. 31) (сами концы в диаграмму не включаются). В отсутствие каких-либо взаимодействий (в том числе и взаимодействия электронов со случайным полем) мы имели бы

$$\Gamma_e^{(0)}(p', p'') = 1. \quad (\text{I. 10})$$

В общем случае можно написать

$$\Gamma_e^{(0)}(p', p'') = 1 + \Lambda(p', p''). \quad (\text{I. 11})$$

Любое взаимодействие, встречающееся в нерелятивистской квантовой механике, можно представить как взаимодействие, переносимое некоторым квантовым бозевским полем (последнее может носить и чисто вспомогательный характер). Таким образом, типичные графики, входящие в состав Λ , имеют вид, представленный на рис. 32. Пунктирным и сплошным линиям там отвечают «одетые» бозонные (D_c) и фермионные функции распространения; все вершины, однако, рассматриваются как затравочные, (I.10), в силу чего и надо учитывать диаграммы типа рис. 32, в (их, как мы увидим, удобно рассматривать попарно). Рассмотрим графики типа рис. 32, а, б порядка $2n$. С точностью до несущественного сейчас множителя им отвечают выражения

$$\begin{aligned} \Lambda_{2n} \sim & \int \prod_{i=1}^n D_c(q_i) dq_i G_c(p_+ + q_1) G_c(p_+ + q_1 + q_2) \dots \\ & \dots G_c\left(p_+ + \sum_{i=1}^{n-1} q_i\right) G_c\left(p_+ + \sum_{i=1}^n q_i\right) G_c\left(p_- - \sum_{i=1}^n q_i\right) \times \\ & \times G_c\left(p_- - \sum_{\substack{i=1 \\ (i \neq j_i)}}^n q_i\right) \dots G_c(p_- - q_{j_{n-1}} - q_{j_n}) G_c(p_- - q_{j_n}). \end{aligned} \quad (\text{I. 12})$$

Здесь для краткости введены обозначения:

$$p_{\pm} = p \pm k/2; \quad (\text{I. 13})$$

*) Разумеется, понятие «уровень Ферми», будучи чисто термодинамическим, остается в силе.

j_1, \dots, j_n — какие-нибудь числа из набора $1, \dots, n$. Дифференцируя (I.12) по k_i , получим сумму членов вида

$$\left[G_c(p_- - q_{j_{n-k}} - q_{j_{n-k+1}} - \dots - q_{j_n}) \frac{\partial}{\partial p_j} G_c(p_+ + q_1 + q_2 + \dots + q_{n+1}) - G_c(p_+ + q_1 + q_2 + \dots + q_{k+1}) \frac{\partial}{\partial p_j} G_c(p_- - q_{j_{n-k}} - q_{j_{n-k-1}} - \dots - q_{j_n}) \right] F, \quad (I.14)$$

где F — функция симметричная относительно замены переменных интегрирования

$$q_1 \rightleftharpoons q_n, \dots, q_{k+1} \rightleftharpoons q_{j_{n-k}}. \quad (I.15)$$

Очевидно, при $q_{0,i} \neq 0$ все эти слагаемые суть нечетные функции ω^*). Для доказательства было существенно то обстоятельство, что числа фермионных функций Грина, содержащих аргументы p_+ и p_- , были одинаковы. Именно по этой причине графики рис. 32, в надо рассматривать не по отдельности, а попарно.

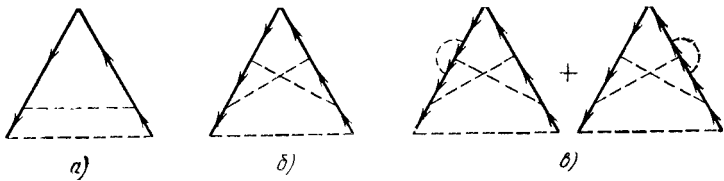


Рис. 32.

Замечая, далее, что произведение двух функций G_c в (I.9) есть четная функция ω , видим, что при $q_{0,i} \neq 0$

$$\sigma_{ij}^{(2)}(\omega) = -\sigma_{ij}^{(2)}(-\omega). \quad (I.16)$$

Отсюда следует, что эта величина — чисто мнимая. Для преобразования слагаемого (I.8) удобно воспользоваться тождеством Уорда, выражающим просто условие градиентной инвариантности теории. В наших обозначениях это тождество имеет вид (Е. С. Фралкин, 1960) **)

$$\omega \Gamma_e^{(0)}\left(p + \frac{k}{2}; p - \frac{k}{2}\right) - k_i \Gamma_e^{(i)}\left(p + \frac{k}{2}; p - \frac{k}{2}\right) = \frac{1}{(2\pi)^4} \left\{ G_c^{-1}\left(p - \frac{k}{2}\right) - G_c^{-1}\left(p + \frac{k}{2}\right) \right\}. \quad (I.17)$$

Здесь $\Gamma_e^{(i)}$ — векторная электромагнитная вершинная часть, а обратная функция Грина $G_c^{-1}(p)$ определяется равенством (I.4). Полагая $k = 0$, получаем

*) Исключение составляет случай $q_1 = \dots = q_n = 0, p_0 = F$. В силу неизбежной [23] сингулярности $D_c(q)$ при $q \rightarrow 0$ соответствующий вклад в (I.12) конечен, по вклад в $\text{Re } \sigma^{(2)}$ оказывается исчезающе малым.

**) Равенство (I.17) справедливо при любой температуре.

из (I. 17) и (I. 4)

$$\Gamma_e^{(0)} \left(\mathbf{p}, \rho_0 + \frac{\omega}{2}; \mathbf{p}, \rho_0 - \frac{\omega}{2} \right) = 1 + \frac{1}{\omega} \left[M_c \left(\mathbf{p}, \rho_0 - \frac{\omega}{2} \right) - M_c \left(\mathbf{p}, \rho_0 + \frac{\omega}{2} \right) \right]. \quad (\text{I. 18})$$

В частности, при $\omega \rightarrow 0$ мы имеем

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \Gamma_e^{(0)} \left(\mathbf{p}, \rho_0 + \frac{\omega}{2}; \mathbf{p}, \rho_0 - \frac{\omega}{2} \right) = 1 - \frac{\partial M_c(\mathbf{p}, \rho_0)}{\partial \rho_0}. \quad (\text{I. 19a})$$

С другой стороны, при $\omega \rightarrow \infty$

$$\Gamma_e^{(0)} \left(\mathbf{p}, \rho_0 + \frac{\omega}{2}; \mathbf{p}, \rho_0 - \frac{\omega}{2} \right) \rightarrow 1. \quad (\text{I. 19b})$$

Действительно, при $|\rho_0| \rightarrow \infty$ мы имеем, как известно,

$$\frac{M_c(\mathbf{p}, \rho_0)}{|\rho_0|} \rightarrow 0. \quad (\text{I. 20})$$

Соотношение (I. 19b) составляет содержание теоремы об асимптотическом расщеплении (В. Л. Бонч-Бруевич, 1965): вычисляя вещественную часть тензора электропроводности при достаточно большой частоте, можно заменить верхнюю часть единицы в формуле (I. 1) *). Нас здесь, однако, будет интересовать случай $\omega \rightarrow 0$.

С помощью соотношений (I. 5) и (I. 6) равенство (I. 19a) можно переписать в виде

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \Gamma_e^{(0)} \left(\mathbf{p}, \rho_0 + \frac{\omega}{2}; \mathbf{p}, \rho_0 - \frac{\omega}{2} \right) = -2i\delta(\rho_0 - F_0) \text{Im } G_r(\mathbf{p}, F_0) + \dots, \quad (\text{I. 21})$$

где многоточием обозначена регулярная часть, не имеющая δ -образных сингулярностей.

Выражение (I. 18) или, при $\omega \rightarrow 0$, (I. 21) надо подставить в правую часть (I. 8). Выражение в фигурных скобках, фигурирующее в формуле (I. 8), можно переписать в виде

$$G_c^2(\mathbf{p}, \rho_0 - \omega/2) \frac{\partial}{\partial \rho_j} \left[\frac{G_c(\mathbf{p}, \rho_0 + \omega/2)}{G_c(\mathbf{p}, \rho_0 - \omega/2)} \right]. \quad (\text{I. 22})$$

При $\omega \rightarrow 0$ выражение (I. 22) оказывается отличным от нуля лишь в силу различия знаков мнимой части $G(\mathbf{p}, \rho_0)$ при $\rho_0 > F_0$ и $\rho_0 < F_0$ (именно это обстоятельство и обеспечивает четность $\sigma_{ij}^{(1)}$ как функции ω). Соответствующее предельное значение равно

$$G_a^2(\mathbf{p}, \rho_0) \frac{\partial}{\partial \rho_j} \exp[2i \arg G_r(\mathbf{p}, \rho_0)], \quad (\text{I. 22}')$$

причем должно выполняться условие

$$\rho_0 - \omega/2 \leq F_0 \leq \rho_0 + \omega/2. \quad (\text{I. 23})$$

*) Следует, однако, иметь в виду, что понятие «достаточно большая частота» каждый раз нуждается в специальном определении. Кроме того, следует убедиться, что, пользуясь соотношением (I. 19b), можно сохранять для функций G_c в (I. 1) их выражения, полученные с учетом взаимодействия.

(Мы ограничиваемся для определенности случаем $\omega > 0$.) Очевидно, конечный вклад в правую часть (I.8) обеспечивается при этом лишь за счет сингулярной части в (I.21). То же относится и к (I.14) при $q_{0,i} = 0$. Таким образом, в выражении для вещественной части $\sigma_{ij}(0)$ под знаком интеграла по \mathbf{p} непременно присутствует множитель $\text{Im } M_r(\mathbf{p}, F_0)$.

Непосредственно применяя формулы (I.8) и (I.21) к случаю дискретного спектра, мы получаем неопределенность, так как функция $\text{Im } G_r(\mathbf{p}, F_0)$ имеет δ -образные особенности. По этой причине здесь удобнее вычислять тензор электропроводности при конечной (хотя и малой) частоте, переходя затем к пределу $\omega \rightarrow 0$. Это сделано в § IV.11; результат, как и следовало ожидать, оказался равным нулю.

С другой стороны, в случае непрерывного спектра правая часть (I.8) оказывается, вообще говоря, отличной от нуля, коль скоро

$$\text{Im } G_r(\mathbf{p}, F_0) \neq 0 \quad (\text{I.24})$$

хотя бы при одном значении \mathbf{p} . Действительно, в силу непрерывности функция $\text{Im } G_r(\mathbf{p}, F_0)$ при этом отлична от нуля и в некоторой конечной области \mathbf{p} -пространства, что и приводит к конечному значению статической электропроводности. В силу (I.6.5'') при этом отлична от нуля и плотность состояний на уровне Ферми $\rho(F_0)$. Наоборот, если $\rho(F_0) = 0$, то в силу (I.6.15б) условие (I.24) не выполняется ни при каком значении \mathbf{p} , и статическая электропроводность тождественно обращается в нуль. Тем самым первая теорема о корреляции доказана.

Подчеркнем, что речь идет здесь именно о корреляции между величинами $\text{Re } \sigma_{ij}(0)$ и $\rho(F_0)$, но отнюдь не о непосредственном выражении одной из этих величин через другую: выражение, стоящее под знаком интеграла в формуле (I.8), гораздо сложнее, чем в (I.6.5'). Отметим также, что при использовании формул (I.1) для фактического расчета электропроводности следует проявлять осторожность: учет только первого исчезающего приближения для массового оператора может оказаться недостаточным ввиду сингулярного (в отсутствие взаимодействия) характера поправок к нему.

Для доказательства второй теоремы о корреляции можно было бы воспользоваться той же формулой (I.1) при температуре $T \neq 0$. Множитель $\exp\left(\frac{F - E_0}{T}\right)$ появился бы при этом — с учетом всех взаимодействий из спектральных представлений для функций Грина. Суть дела, однако, можно понять, просто вычисляя концентрацию электронов n в той области энергий, в которой плотность состояний $\rho(E)$ непрерывна. Для этой цели надо лишь соответственно ограничить область интегрирования по E в общем выражении для полной концентрации электронов ([14], § 5):

$$n = 2 (2\pi)^3 \int d\mathbf{p} \int_{-\infty}^{\infty} dE n_F(E) \text{Im } G_r(\mathbf{p}, E). \quad (\text{I.25})$$

Мы имеем

$$n = 2 (2\pi)^3 \int d\mathbf{p} \int_{E_0}^{\infty} dE n_F(E) \text{Im } G_r(\mathbf{p}, E), \quad (\text{I.25}')$$

где, как и в § I.5, E_0 — минимальная энергия, при которой функция $\rho(E)$ отлична от нуля и непрерывна.

При $E_0 - F \gg T$ равенство (I.25') дает

$$n \sim \exp\left(\frac{F - E_0}{T}\right), \quad (\text{I.26})$$

чем и доказывается вторая теорема о корреляции.

Наконец, третью теорему о корреляции можно получить просто из закона сохранения полной энергии системы «вещество + фотоны» с учетом равенства (I. 6.13). Действительно, поглощение светового кванта (или квантов) можно формально представить себе как процесс, состоящий из двух этапов. На первом этапе один электрон изымается из системы (или добавляется в нее) и она переходит в «промежуточное состояние», имея в нем на один электрон меньше (больше), чем в начальном. На втором этапе электрон возвращается (изымается) вновь, причем так, что конечная энергия системы N электронов отличается от начального своего значения.

Обозначим через $E_{i, N}$, $E_{m, N \pm 1}$ и $E_{f, N}$ собственные значения энергии всей многоэлектронной системы соответственно в начальном, промежуточном и конечном состояниях. Рассмотрим для простоты однофотонный переход, обозначая частоту света через ω_0 . Очевидно,

$$\hbar\omega_0 = E_{f, N} - E_{i, N} \equiv E_2 - E_1, \quad (\text{I. 27})$$

где

$$E_2 = E_{f, N} - E_{m, N \pm 1}, \quad E_1 = E_{i, N} - E_{m, N \pm 1}.$$

В силу (I. 6.13) это доказывает нашу теорему.

II*. Поле упругих деформаций

Рассмотрим кристалл с элементарной ячейкой, содержащей r атомов. Заменяя часть их хаотически расположенными атомами примеси, мы получим неупорядоченный раствор замещения. Положение узлов решетки в нем можно охарактеризовать, задавая номер атома в данной ячейке l и тройку координат центра элементарной ячейки g . Конфигурацию атомов растворенного вещества можно описать [31, 61], задав совокупность случайных величин $c(g, l)$; по определению $c(g, l) = 1$, если узел $\{g, l\}$ занят атомом примеси, и $c(g, l) = 0$, если узел $\{g, l\}$ занят атомом растворителя.

Хаотичность расположения примесей в решетке может быть обусловлена двумя причинами.

Во-первых, при конечных температурах всегда имеют место термодинамические флуктуации состава [31]. При этом роль «примеси» могут играть и нерегулярно расположенные атомы тех же веществ, которые при $T = 0$ образовывали бы твердый раствор.

Во-вторых, как обычно в примесных полупроводниках, хаотическое распределение атомов примеси в пространстве может быть навязано условиями легирования. Такое распределение метастабильно; однако время жизни его может быть очень велико (годы и более).

В силу различия атомных радиусов растворенного вещества и растворителя в решетке возникнут статические деформации: положения равновесия атомов изменятся по сравнению с идеальной решеткой. Обозначим сдвиг данного атома из положения равновесия (вектор смещения) через $u(g, l)$. Значения компонент u вычисляются с помощью уравнений механики. Соответствующий расчет можно найти в книгах [31, 61]; мы здесь лишь формулируем результаты. Ограничимся при этом областью сравнительно малых флуктуаций, в которой справедливо правило Вегарда [31]. Оказывается, что в этом случае решетка испытывает деформацию двух типов — однородную и неоднородную. Первая, не нарушая пространственной периодичности системы, приводит лишь к изменению постоянных решетки; вторая, локализованная вблизи примесных атомов, приводит к случайным отклонениям структуры от периодической. Таким образом, вектор смещения можно записать в виде *)

$$u(g, l) = u^{(0)} + u^{(1)}(g, l). \quad (\text{II. 1})$$

*) Принятые нами обозначения несколько отличаются от использованных в [31, 61].

Однородная деформация, описываемая вектором $u^{(0)}$, получилась бы при строго периодическом расположении примесных атомов; неоднородная же связана с флуктуациями в их распределении. Соответственно величину $c(\mathbf{g}, l)$ также можно представить в виде

$$c(\mathbf{g}, l) = c(l) + \Delta c(\mathbf{g}, l). \quad (\text{II. 2})$$

Здесь через $c(l) = \langle c(\mathbf{g}, l) \rangle$ обозначена средняя атомная доля примеси в узле l .

Удобно представить $u^{(1)}(\mathbf{g}, l)$ и $\Delta c(\mathbf{g}, l)$ в виде разложений Фурье, полагая

$$u^{(1)}(\mathbf{g}, l) = G^{-1} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{g}} u(\mathbf{k}, l), \quad (\text{II. 3})$$

$$\Delta c(\mathbf{g}, l) = G^{-1} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{g}} \Delta c(\mathbf{k}, l). \quad (\text{II. 4})$$

Здесь G — общее число элементарных ячеек в решетке, \mathbf{k} — волновой вектор, определенный в первой зоне Бриллюэна для решетки растворителя.

Функцию $u(\mathbf{k}, l)$ можно представить в виде разложения по собственным функциям динамической матрицы растворителя, описывающим нормальные колебания последней.

Рассмотрим сначала растворитель с решеткой Бравэ. Тогда $r = 1$, индекс l можно опустить, $c(l) = c$, и нормальные колебания принадлежат только к акустическому типу. При этом для $u(\mathbf{k}, l) = u(\mathbf{k})$ получается [61]

$$u_{\alpha}(\mathbf{k}) = \sum_{\sigma=1, 2, 3} \frac{e_{\alpha}(\sigma, \mathbf{k}) e_{\beta}(\sigma, \mathbf{k}) F_{\beta}(\mathbf{k})}{m\omega_{\sigma}^2(\mathbf{k})} \Delta c(\mathbf{k}). \quad (\text{II. 5})$$

Здесь α, β — векторные индексы (по повторяющимся индексам производится суммирование), σ — номер ветви нормальных колебаний, $\omega_{\sigma}(\mathbf{k})$ — соответствующая частота, $e(\sigma, \mathbf{k})$ — единичный вектор поляризации, m — масса атома растворителя. Через $F_{\beta}(\mathbf{k})$ обозначена фурье-компонента силы $F_{\beta}(\mathbf{g} - \mathbf{g}')$, действующей со стороны атома растворителя, находящегося в узле \mathbf{g} , на атом примеси, расположенный в узле \mathbf{g}' . По условию равновесия сумма всех сил, действующих на атом примеси, должна обращаться в нуль. Это означает, что при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ фурье-компонента $F_{\beta}(\mathbf{k})$ должна обращаться в нуль, т. е.

$$F_{\beta}(\mathbf{k}) \rightarrow a_{\beta\gamma} k_{\gamma}. \quad (\text{II. 6})$$

Компоненты тензора $a_{\beta\gamma}$ могут зависеть от направления, но не от величины вектора \mathbf{k} . В этих же условиях $\omega_{\sigma}(\mathbf{k}) = s_{\sigma}k$, где s_{σ} — соответствующая скорость звука (она также может зависеть от направления \mathbf{k}). Таким образом, длинноволновая часть выражения (II. 5) принимает вид

$$u_{\alpha}(\mathbf{k}) = \sum_{\sigma} \frac{e_{\alpha} e_{\beta}}{m s_{\sigma}^2} a_{\beta\gamma} \frac{k_{\gamma}}{k^2} \Delta c(\mathbf{k}). \quad (\text{II. 7})$$

Возвращаясь теперь к координатному представлению с помощью формул (II. 7) и (II. 3), следует заменить вектор с дискретными компонентами \mathbf{g} тройкой непрерывно меняющихся координат \mathbf{x} .

Энергия взаимодействия носителя заряда с плавной деформацией решетки дается выражением [1]

$$U(\mathbf{x}) = E_{\alpha\beta} \frac{\partial u_{\alpha}^{(1)}(\mathbf{x})}{\partial x_{\beta}}. \quad (\text{II. 8})$$

Здесь $E_{\alpha\beta}$ — компоненты тензора потенциала деформации. Пользуясь соотношениями (II. 8) (II. 7), (II. 6) и (II. 3), находим

$$U(x) = \frac{1}{G} \sum_k U(k) \Delta c(k) e^{ikx}, \quad (\text{II. 9})$$

где

$$U(k) = \eta_{\alpha\beta} \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2}, \quad (\text{II. 10})$$

$$\eta_{\alpha\beta} = iE_{\mu\beta} \frac{a_\nu a_\alpha}{m} \sum_{\sigma=1,2,3} \frac{e_\mu e_\nu}{s_\sigma^2}. \quad (\text{II. 11})$$

Естественно, функция $G(x)$ — случайная. Соответствующая бинарная корреляционная функция дается выражением

$$\Psi(x-x') = G^{-2} \sum_{k, k'} U(k) U^*(k') e^{ikx - ik'x'} \langle \Delta c(k) \Delta c^*(k') \rangle.$$

В силу (II. 4)

$$\langle \Delta c(k) \Delta c^*(k') \rangle = \sum_{g, g'} e^{-ikg + ik'g'} A_{gg'},$$

где

$$A_{gg'} = \langle \Delta c(g) \Delta c(g') \rangle.$$

По определению (II. 2)

$$A_{gg'} = \langle [c(g) - c][c(g') - c] \rangle = \langle c(g)c(g') \rangle - c^2.$$

При $g \neq g'$ мы имеем $\langle c(g)c(g') \rangle = c^2$ и $A_{gg'} = 0$. С другой стороны, если $g = g'$, то $A_{gg'} = \langle c^2(g) \rangle - c^2$. По определению функции $c(g)$ квадрат ее равен ей самой. Таким образом, окончательно

$$A_{gg'} = c(1-c) \delta_{gg'} \quad (\text{II. 12})$$

и

$$\langle \Delta c(k) \Delta c^*(k') \rangle = \sum_g c(1-c) e^{-i(k-k', g)} = c(1-c) G \delta_{k, k'}, \quad (\text{II. 13})$$

где $\delta_{k, k'}$ — символ Кронекера.

Соответственно

$$\Psi(x, x') = \frac{1}{G} \sum_k c(1-c) |U(k)|^2 e^{i(k, x-x')}. \quad (\text{II. 14})$$

Подставляя сюда в качестве $U(k)$ выражение (II. 10) и суммируя по всем значениям компонент вектора k , мы получили бы функцию δ -образного вида. Отсюда явствует, что в рассматриваемой задаче существенным оказывается поведение $U(k)$ при k , близком к вектору обратной решетки, и, следовательно, вектор смещения $u(g)$ изменяется в пространстве отнюдь не плавно. Выражение (II. 8) при этом уже не справедливо, а детальный вид корреляционной функции зависит от конкретной модели системы; ясно лишь, что она должна быстро убывать с увеличением отношения $|x-x'|$ к постоянной решетки d . Эти осложнения могли бы привести к большим вычислительным трудностям. Однако в ряде интересующих нас задач существенно лишь поведение электронных волновых функций в областях, линейные размеры которых

заметно превышают постоянную решетки. При этом явный вид корреляционной функции на малых расстояниях не играет роли, и мы вправе положить *)

$$\Psi(x, x') = \Psi_0 \Omega_0 c (1 - c) \delta(x - x'). \quad (\text{II. 15})$$

Здесь Ψ_0 — постоянная размерности квадрата энергии (и порядка квадрата потенциала деформации), Ω_0 — объем недеформированной элементарной ячейки.

Полагая

$$\Psi_0 \Omega_0 c (1 - c) = \Phi_0, \quad (\text{II. 16})$$

получаем формулу (II. 7.37в).

Очевидно, в случае (II.15) нельзя определять средний квадрат флуктуации потенциальной энергии ψ_1 , полагая там $x' = x$; при пользовании δ -функцией всегда подразумевается, что она стоит под знаком интеграла. Иначе говоря, величина ψ_1 в данном случае определяется соотношением

$$\psi_1 = \frac{1}{\Omega_0} \int \Psi(r) dr = \Psi_0 c (1 - c) = \frac{\Phi_0}{\Omega_0}. \quad (\text{II. 15}')$$

Обратимся теперь к кристаллам со сложными решетками ($r > 1$). Здесь также справедливы формулы вида (II. 5) и (II. 6) (с очевидным включением индексов l). Отличие от предыдущего случая состоит, однако, в том, что теперь суммирование по σ охватывает как акустические, так и оптические ветви нормальных колебаний. Соответственно для потенциальной энергии носителя заряда мы получим сумму двух слагаемых:

$$U(g) = U_{ac}(g) + U_{opt}(g),$$

отвечающих, соответственно, акустическим и оптическим вкладам в вектор смещения: $U_{ac}^{(1)}$ и $U_{opt}^{(1)}$. Для U_{ac} остаются в силе все предыдущие рассуждения до формулы (II. 10) включительно. С другой стороны, длинноволновую часть U_{opt} следует писать в виде

$$U_{opt}(x) = E_{\alpha} u_{\alpha}^{(1)}, \quad (\text{II. 17})$$

Здесь E — постоянный вектор, определяемый по структуре решетки. Легко убедиться, что при этом к «акустическому» слагаемому (II. 10) добавляется еще выражение

$$U_{opt}(k) = \eta_{\alpha} k_{\alpha}, \quad (\text{II. 17}')$$

где η — вектор, не зависящий от величины k при малых $|k|$. Таким образом, вместо (II. 14) мы получим

$$\Psi(x, x') = \sum_l \frac{c_l (1 - c_l)}{G} \sum_k \left| \eta_{\alpha\beta} \frac{k_{\alpha} k_{\beta}}{k^2} + \eta_{\alpha} k_{\alpha} \right|^2 e^{i(k, x - x')}. \quad (\text{II. 18})$$

Как и при $r = 1$, при $|x - x'| \rightarrow 0$ правая часть (II. 18) оказалась бы сингулярной: при суммировании по всем значениям компонент k мы получили

*) Строго говоря, выражение (II.15) справедливо лишь в приближении изотропного континуума, когда компоненты тензора $\eta_{\alpha\beta}$ равно как и сама функция $U(k)$, не зависят от k . В противном случае правая часть (II.15) вместо $\delta(x - x')$ содержала бы функцию более сложного вида (но также с острым пиком при $|x - x'| \rightarrow 0$). В ряде задач, однако это обстоятельство несущественно.

бы сумму δ -функции от $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$ и ее производных. Соответственно вместо (II. 15) можно было бы положить

$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sum_l c_l (1 - c_l) \left\{ b \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + b_{\alpha\beta} \frac{\partial^2 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} + b_{\alpha\beta\gamma} \frac{\partial^3 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{\partial x_\alpha \partial x_\beta \partial x_\gamma} \right\}, \quad (\text{II. 19})$$

где $b, b_{\alpha\beta}, b_{\alpha\beta\gamma}$ — постоянные коэффициенты.

Неясно, однако, оправдано ли такое усложнение по сравнению с (II. 15).

III*. Характеристический функционал гауссова случайного поля

Перепишем формулу (II. 7.8) в виде

$$A(zI) = \left\langle \exp \left\{ -iz \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} I(\mathbf{k}) \right\} \right\rangle, \quad (\text{III. 1})$$

где

$$u_{\mathbf{k}} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega^2 l^2} U(\mathbf{k}). \quad (\text{III. 2})$$

По определению среднего значения (математического ожидания) символ $\langle \dots \rangle$ имеет следующий смысл:

$$\langle \dots \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\mathbf{k}} du'_{\mathbf{k}} du''_{\mathbf{k}} \mathcal{P}[\dots u_{\mathbf{k}} \dots](\dots), \quad (\text{III. 3})$$

где точками обозначено усредняемое выражение, а вещественные величины $u'_{\mathbf{k}}, u''_{\mathbf{k}}$ определяются равенствами

$$u_{\mathbf{k}} = u'_{\mathbf{k}} + i u''_{\mathbf{k}}, \quad u'_{\mathbf{k}} = u'_{-\mathbf{k}}, \quad u''_{\mathbf{k}} = -u''_{-\mathbf{k}}. \quad (\text{III. 4})$$

Подставляя выражения (II. 7.12) и (III. 1) в правую часть (III. 3), получаем там произведение гауссовых интегралов, что и приводит к формуле (II. 7.20). Заметим, что выражение (III. 3) можно переписать и в формально более компактном виде, не предполагающем непременного разложения по полной ортогональной системе функций, образующих счетное множество. Именно:

$$\langle \dots \rangle = \int \delta U \mathcal{P}[U](\dots), \quad (\text{III. 5})$$

причем

$$\int \delta U \mathcal{P}[U] = 1. \quad (\text{III. 6})$$

Здесь символ $\int \delta U \dots$ обозначает континуальный интеграл.

IV*. Непосредственный расчет бинарной корреляционной функции пуассоновского случайного поля

На основании равенств (II. 7.15), (II. 7.23) и (II. 7.25) мы имеем

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') &= \langle U(\mathbf{x}') U(\mathbf{x}'') \rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{i'=1}^N \int \prod_{l=1}^N \frac{d\mathbf{R}_l}{\Omega} V(\mathbf{x}' - \mathbf{R}_l) V(\mathbf{x}'' - \mathbf{R}_{i'}) = \\ &= \sum_{\mathbf{a}} \int d\mathbf{R} V_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'' - \mathbf{R}) V_{\mathbf{a}}(\mathbf{R}). \end{aligned} \quad (\text{IV. 1})$$

Представляя $V_a(\mathbf{R})$ в виде разложения Фурье:

$$V_a(\mathbf{R}) = \int d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} V_a(\mathbf{k}), \quad (\text{IV.2})$$

получаем из (IV.1)

$$\Psi(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') = (2\pi)^3 \sum_a n_a \int d\mathbf{k} |V_a(\mathbf{k})|^2 e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'')}, \quad (\text{IV.3})$$

откуда и следует формула (II.7.35). В частности, в случае (II.7.31) находим

$$\Psi(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') = \frac{2\pi n_i^* e^4}{\varepsilon^2} r_0 \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right), \quad (\text{IV.4})$$

где $r = |\mathbf{x}' - \mathbf{x}''|$, а

$$n_i^* = \sum_a n_a Z_a^2 \quad (\text{IV.5})$$

есть эффективная концентрация примеси.

С другой стороны, в случае короткодействующих сил $V_a(\mathbf{k}) \approx V_a = \text{const}$. Тогда из формулы (IV.3) получается выражение (II.7.37в), причем

$$\Phi_0 = (2\pi)^6 \sum_a n_a V_a^2. \quad (\text{IV.6})$$

V*. Характеристический функционал лоренцева случайного поля

Согласно (II.7.8) и (II.7.45) характеристический функционал лоренцева случайного поля дается выражением

$$A(zI) = N \int \delta U \left[1 + \int d\mathbf{k} U^*(\mathbf{k}) R^{-1}(\mathbf{k}) U(\mathbf{k}) \right]^{-1} \exp \left\{ -iz \int d\mathbf{k} U(\mathbf{k}) I(\mathbf{k}) \right\}. \quad (\text{V.1})$$

Удобно ввести вспомогательное интегрирование по вещественной переменной t , полагая

$$\left[1 + \int d\mathbf{k} U^*(\mathbf{k}) R^{-1}(\mathbf{k}) U(\mathbf{k}) \right]^{-1} = \int_0^\infty dt e^{-t[1 + \int d\mathbf{k} U^*(\mathbf{k}) R^{-1}(\mathbf{k}) U(\mathbf{k})]}, \quad (\text{V.2})$$

где точками обозначено выражение, стоящее в квадратных скобках в левой части (V.2).

Подставляя (V.2) в (V.1), получаем

$$A(zI) = \int_0^\infty e^{-t\tilde{A}(zI, t)} dt, \quad (\text{V.3})$$

где

$$\tilde{A}(zI, t) = N \int \delta U \exp \left\{ -t \int d\mathbf{k} U^*(\mathbf{k}) R^{-1}(\mathbf{k}) U(\mathbf{k}) - iz \int d\mathbf{k} U(\mathbf{k}) I(\mathbf{k}) \right\}. \quad (\text{V.4})$$

Сравнивая (V.1) с (II.7.19), видим, что \tilde{A} формально совпадает с характеристическим функционалом некоторого гауссова поля, фурье-образ корреляционной функции которого дается выражением

$$\Psi^{-1}(\mathbf{k}) = 2tR^{-1}(\mathbf{k}). \quad (\text{V.5})$$

Этот функционал правильно нормирован Действительно, если (в соответствии с (II. 7.13)) $\tilde{A}(0, t) = 1$, то, согласно (V. 3), и $A(0) = 1$.

В силу (II. 7.20) и (V. 5) мы имеем

$$\tilde{A}(zI, t) = \exp \left\{ -\frac{z^2}{4t} \int |I(\mathbf{k})|^2 R(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \right\}, \quad (\text{V.6})$$

и, следовательно,

$$A(zI) = \int_0^\infty dt \exp \left\{ -t - \frac{(\rho/2)^2}{t} \right\}, \quad (\text{V.7})$$

где величина ρ дается формулой (II. 7.48). Интеграл, фигурирующий в правой части (V. 7), непосредственно связан с функцией Макдональда $K_1(\rho)$. Действительно, при $z > 0$ справедливо интегральное представление

$$K_1(2z) = \frac{1}{2z} \int_0^\infty dt \exp(-t - z^2/t). \quad (\text{V.8})$$

Комбинируя равенства (V. 7) и (V. 8), получаем (II. 7.47).

VI*. Вычисление интеграла, фигурирующего в формуле (II. 9.31)

Полагая $v_m < 0$, введем обозначение

$$|v_m| + a = \beta.$$

Тогда интеграл, фигурирующий в правой части (II. 9.31), становится равным $---J$, где

$$J = \int_0^\infty \sin \beta s K_1(\kappa s) ds. \quad (\text{VI.1})$$

Воспользуемся известным интегральным представлением для функции Макдональда

$$K_1(\kappa s) = \int_0^\infty \text{ch } t e^{-\kappa s \text{ch } t} dt. \quad (\text{VI.2})$$

Подставляя (VI. 2) в (VI. 1) и меняя порядок интегрирования по t и s , получаем

$$J = \beta \int_0^\infty \frac{\text{ch } t dt}{\kappa^2 \text{ch}^2 t + \beta^2} = \frac{\pi\beta}{2\kappa \sqrt{\beta^2 + \kappa^2}}. \quad (\text{VI.3})$$

VII*. Функции Грина в задаче с гамильтонианом (II. 16.1') при $T = 0$

Как указывалось в § II. 16, в ряде задач, связанных с изучением поведения сильно локализованных электронов, можно исходить из упрощенного гамильтониана (II. 16.1')

$$H = \sum_{\lambda} E_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \lambda'} V(\lambda, \lambda') a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda'}^{\dagger} a_{\lambda} a_{\lambda'}. \quad (\text{VII.1})$$

Здесь λ — тот же набор квантовых чисел, что и в §§ II.16 и I.6, $V(\lambda, \lambda') = V(\lambda', \lambda)$, а суммирование во втором слагаемом в правой части можно ограничить условием $\lambda' \neq \lambda$.

Как и в § II.16, разделим все уровни с квантовыми числами λ на два класса — заполненные при $T = 0 (\lambda = \beta)$ и вакантные при $T = 0 (\lambda = \alpha)$. Обозначив через Φ точную волновую функцию основного состояния системы (в пространстве чисел заполнения), мы имеем

$$a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta} \Phi = \Phi, \quad a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} \Phi = a_{\alpha} \Phi = 0. \quad (\text{VII.2})$$

Условия (VII.2) позволяют без труда найти точные выражения для одночастичной и двухчастичной запаздывающих функций Грина G и $K^{(\pm)}$:

$$G(\lambda, \lambda'; t) = \langle \langle a_{\lambda} | a_{\lambda'}^{\dagger} \rangle \rangle^{(+)} = i\theta(t) \langle [a_{\lambda}(0), a_{\lambda'}^{\dagger}(t)]_{\pm} \rangle \quad (\text{VII.3})$$

и

$$K^{(\pm)}(\lambda_1, \lambda_2; \lambda_3, \lambda_4; t) = \langle \langle a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_2} | a_{\lambda_3}^{\dagger} a_{\lambda_4} \rangle \rangle^{(\pm)} = \\ = i\theta(t) \langle [a_{\lambda_1}^{\dagger}(t) a_{\lambda_2}(t), a_{\lambda_3}^{\dagger}(0) a_{\lambda_4}(0)]_{\pm} \rangle. \quad (\text{VII.4})$$

Угловые скобки в правых частях равенств (VII.3) и (VII.4) обозначают усреднение по основному состоянию рассматриваемой системы, т. е. квантовомеханическое усреднение с волновой функцией Φ .

В задаче с гамильтонианом (VII.1) уравнение движения для функции G имеет вид

$$\left(t \frac{\partial}{\partial t} - E_{\lambda} \right) G - \sum_{\lambda''} V(\lambda, \lambda'') \langle \langle a_{\lambda''}^{\dagger} a_{\lambda''} a_{\lambda} | a_{\lambda'}^{\dagger} \rangle \rangle^{(+)} = -\delta_{\lambda\lambda'} \delta(t). \quad (\text{VII.5})$$

Пользуясь правилами коммутаций для операторов a_{λ} , a_{λ}^{\dagger} и равенствами (VII.2), легко убедиться, что здесь имеет место точное расщепление:

$$\langle \langle a_{\lambda''}^{\dagger} a_{\lambda''} a_{\lambda} | a_{\lambda'}^{\dagger} \rangle \rangle^{(+)} = \delta_{\lambda''\beta} G(\lambda, \lambda'; t). \quad (\text{VII.6})$$

Символ $\delta_{\lambda''\beta}$ означает, что состояние λ'' непременно должно принадлежать классу β , т. е. суммирование по λ'' в левой части (VII.5) производится только по состояниям этого класса. Подставим (VII.6) в уравнение (VII.5) и выполним преобразование Фурье по времени t , полагая

$$G(\lambda, \lambda'; t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt} G(\lambda, \lambda'; E).$$

Получим ($\lambda = \alpha$ или $\lambda = \beta$)

$$G(\lambda, \lambda'; E) = -\frac{1}{2\pi} \frac{\delta_{\lambda\lambda'}}{E - E_{\lambda}^*}, \quad (\text{VII.7})$$

где энергии E_{λ}^* даются выражениями (II.16.6).

Для функций $K^{(\pm)}$ получаются следующие уравнения движения:

$$\begin{aligned} & \left(i \frac{\partial}{\partial t} - E_{\lambda_2} + E_{\lambda_1} \right) K^{(\pm)} - \\ & - \sum_{\lambda'} [V(\lambda_2, \lambda') - V(\lambda_1, \lambda')] \langle \langle a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda'}^+ a_{\lambda'} a_{\lambda_2} | a_{\lambda_3}^+ a_{\lambda_4} \rangle \rangle^{(\pm)} = \\ & = -\delta(t) \langle [a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_2}, a_{\lambda_3}^+ a_{\lambda_4}]_{\pm} \rangle = -\delta(t) A_{\pm}. \end{aligned} \quad (\text{VII.8})$$

Величины A_{\pm} определяются этим равенством. Пользуясь правилами коммутации и формулами (VII.2), легко получить следующие соотношения:

$$\begin{aligned} & \langle \langle a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda'}^+ a_{\lambda'} a_{\lambda_2} | a_{\lambda_3}^+ a_{\lambda_4} \rangle \rangle^{(\pm)} = \delta_{\lambda' \beta} K^{(\pm)}(\lambda_1, \lambda_2; \lambda_3, \lambda_4; t) - \\ & - \frac{1}{2} \{ (\delta_{\lambda_1 \lambda'} \pm \delta_{\lambda_2 \lambda'}) K^{(+)}(\lambda_1, \lambda_2; \lambda_3, \lambda_4; t) + (\delta_{\lambda_1 \lambda'} \mp \delta_{\lambda_2 \lambda'}) K^{(-)}(\lambda_1, \lambda_2; \lambda_3, \lambda_4; t) \}. \end{aligned} \quad (\text{VII.9})$$

Комбинируя это с уравнением (VII.8) и выполняя в последнем преобразование Фурье, получим систему уравнений для функций $K^{(+)}$ и $K^{(-)}$:

$$\begin{aligned} & (E - E_{\lambda_2}^* + E_{\lambda_1}^*) K^{(+)} + V(\lambda_1, \lambda_2) K^{(-)} = -\frac{1}{2\pi} A_+, \\ & (E - E_{\lambda_2}^* + E_{\lambda_1}^*) K^{(-)} + V(\lambda_1, \lambda_2) K^{(+)} = -\frac{1}{2\pi} A_-. \end{aligned} \quad (\text{VII.10})$$

Здесь, как и в (VII.7), $E_{\lambda_1}^*$, $E_{\lambda_2}^*$ суть точные однопчастичные энергии (II.16.6).

По определению (VII.4) функция $K^{(\pm)}(\lambda_1, \lambda_2; \lambda_3, \lambda_4; t)$ отлична от нуля лишь при $\lambda_1 = \beta$, $\lambda_2 = \alpha$. Принимая это во внимание и вычисляя средние значения антикоммутиатора A_+ и коммутиатора A_- , находим окончательно

$$K^{(-)}(\beta, \alpha; \lambda_3, \lambda_4; E) = -\frac{1}{2\pi} \frac{\delta_{\lambda_3 \alpha} \delta_{\lambda_4 \beta}}{E - E_{\alpha}^* + E_{\beta}^* + V(\beta, \alpha)}. \quad (\text{VII.11})$$

Полюсы этой функции соответствуют энергии возбуждения системы при «перевосе» одного электрона, т.е. энергии возбуждения пары «электрон в состоянии α и дырка в состоянии β ». Видно, что эта энергия дается выражением (II.16.8), чего, разумеется, и следовало ожидать.

VIII*. Диагонализация формы $\delta^2 Q_{\text{п}}$

Вблизи круговой орбиты

$$\zeta(\tau) = R \{ \cos(2\pi\tau/t) - 1, \sin(2\pi\tau/t), 0 \} \quad (\text{VIII.1})$$

запишем близкие к ней траектории $\mathbf{r}(\tau)$ в виде

$$\mathbf{r}(\tau) = \zeta(\tau) + \delta\mathbf{r}(\tau),$$

$$\delta\mathbf{r} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\mathbf{a}_n \cos \frac{2\pi n \tau}{t} + \mathbf{b}_n \sin \frac{2\pi n \tau}{t} \right), \quad (\text{VIII.2})$$

причем $\mathbf{a}_0 = -\sum_{n=1}^{\infty} \mathbf{a}_n$. С учетом сказанного в основном тексте (§ III.4) об

инвариантности Q_k и Q_n относительно поворотов траектории как целого, можно считать, что

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \{R \sqrt{2} \cos(\psi + \pi/4) - R, 0, 0\} = \{a_{1x}, 0, 0\}, \\ \mathbf{b}_1 &= \{R \sqrt{2} \sin(\psi + \pi/4) \sin \varphi, R \sqrt{2} \sin(\psi + \pi/4) \cos \varphi, 0\} = \\ &= \{b_{1x}, b_{1y}, 0\}. \end{aligned} \quad (\text{VIII.3})$$

Очевидно, величины

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_0(\tau, \tau') &= \xi(\tau') - \xi(\tau) = \\ &= 2R \sin \frac{\pi(\tau - \tau')}{t} \left\{ \sin \frac{\pi(\tau + \tau')}{t}, \cos \frac{\pi(\tau + \tau')}{t}, 0 \right\}, \end{aligned} \quad (\text{VIII.4})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(\tau, \tau') &= \mathbf{p}_0(\tau, \tau') + \delta \mathbf{p}(\tau, \tau') = \\ &= \mathbf{p}_0(\tau, \tau') + \sum_{n=1}^{\infty} \sin \frac{\pi n(\tau - \tau')}{t} \left[-2\mathbf{a}_n \sin \frac{\pi n(\tau + \tau')}{t} + 2\mathbf{b}_n \cos \frac{\pi n(\tau + \tau')}{t} \right] \end{aligned} \quad (\text{VIII.5})$$

обладают свойствами периодичности:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_0(\tau, \tau') &= \mathbf{p}_0(\tau \pm t, \tau') = \mathbf{p}_0(\tau, \tau' \pm t), \\ \delta \mathbf{p}(\tau, \tau') &= \delta \mathbf{p}(\tau \pm t, \tau') = \delta \mathbf{p}(\tau, \tau' \pm t). \end{aligned} \quad (\text{VIII.6})$$

Для функций $\Phi(\tau, \tau')$, обладающих этим свойством, справедливо преобразование

$$\int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' \Phi(\tau, \tau') = \frac{t^2}{2\pi^2} \int_0^\pi d\chi \int_0^{2\pi} d\gamma \Phi\left(\frac{t}{2\pi}(\chi + \gamma), \frac{t}{2\pi}(\gamma - \chi)\right), \quad (\text{VIII.7})$$

где

$$\chi = \pi(\tau - \tau')/t, \quad \gamma = \pi(\tau + \tau')/t. \quad (\text{VIII.8})$$

Воспользуемся этим при анализе величины ΔQ_n (см. (III.7.22)). Точнее, будем рассматривать несколько более общее выражение, отвечающее корреляционной функции

$$\Psi(r) = \psi_1 f(\alpha r). \quad (\text{VIII.9})$$

Используя ее, мы имеем вместо (III.7.22)

$$\begin{aligned} \Delta Q_n &= -\frac{\alpha \psi_1 t^2}{8\pi^2} \int_0^\pi d\chi \int_0^{2\pi} d\gamma \left\{ 2f'(\alpha p_0(\chi)) \frac{\delta p p_0}{p_0} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{(\delta p)^2}{p_0} f'(\alpha p_0) - \frac{(\delta p p_0)^2}{p_0^3} f'(\alpha p_0) + \alpha \frac{(\delta p p_0)^2}{p_0^2} f''(\alpha p_0) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{VIII.10})$$

Производные здесь берутся по всему аргументу:

$$f'(\alpha p_0) = \left. \frac{df(z)}{dz} \right|_{z=\alpha p_0}, \quad (\text{VIII.11})$$

при этом величины f' и f'' не зависят от угла γ , поскольку

$$|\mathbf{p}_0(\tau, \tau')| = p_0(\tau - \tau') = 2R |\sin \chi|. \quad (\text{VIII.12})$$

Поэтому в (VIII.10) можно проинтегрировать по γ . Введем обозначение

$$\langle \Phi(\gamma, \chi) \rangle_{\gamma} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\gamma \Phi(\gamma, \chi). \quad (\text{VIII.13})$$

Легко получить выражение для $\left\langle \frac{(\delta p p_0)}{\rho_0} \right\rangle_{\gamma}$:

$$\left\langle \frac{(\delta p p_0)}{\rho_0} \right\rangle_{\gamma} = (a_{1x} + b_{1y}) \sin \chi. \quad (\text{VIII.14})$$

Далее,

$$\langle (\delta p)^2 \rangle_{\gamma} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} (a_n^2 + b_n^2) \sin^2 n\chi. \quad (\text{VIII.15})$$

Наконец,

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{(\delta p p_0)^2}{\rho_0^2} \right\rangle_{\gamma} &= \frac{1}{2} (a_{1x} + b_{1y})^2 \sin^2 \chi + \frac{1}{2} [(b_{2y} + a_{2x})^2 + (a_{2y} - b_{2x})^2] \sin^2 2\chi + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} [(b_{ny} - a_{nx})^2 \sin^2 n\chi + 2(b_{ny} - a_{nx})(b_{n+2,y} + a_{n+2,x}) \times \\ &\quad \times \sin n\chi \sin(n+2)\chi + (b_{n+2,y} + a_{n+2,x})^2 \sin^2(n+2)\chi] + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} [(a_{ny} - b_{nx})^2 \sin^2 n\chi + 2(a_{ny} + b_{nx})(a_{n+2,y} - b_{n+2,x}) \times \\ &\quad \times \sin n\chi \sin(n+2)\chi + (a_{n+2,y} - b_{n+2,x})^2 \sin^2(n+2)\chi]. \quad (\text{VIII.16}) \end{aligned}$$

Очевидно, для диагонализации $\delta^2 Q$ более удобны фигурирующие в (VIII.16) комбинации переменных

$$a_{nx} - b_{ny}, \quad a_{n+2,x} + b_{n+2,y}, \quad a_{ny} + b_{nx}, \quad a_{n+2,y} - b_{n+2,x}.$$

Выразим через них и $\langle (\delta p)^2 \rangle_{\gamma}$. Для этого учтем, что

$$\begin{aligned} a_{nx}^2 + a_{ny}^2 + b_{nx}^2 + b_{ny}^2 &= \frac{1}{2} [(a_{nx} - b_{ny})^2 + (a_{nx} + b_{ny})^2 + \\ &+ (a_{ny} + b_{nx})^2 + (a_{ny} - b_{nx})^2]. \quad (\text{VIII.17}) \end{aligned}$$

Отсюда найдем

$$\begin{aligned} \langle (\delta p)^2 \rangle_{\gamma} &= 2 \sum_{n=2}^{\infty} (a_{nz}^2 + b_{nz}^2) \sin^2 n\chi + \\ &+ [(a_{1x} + b_{1y})^2 + (a_{1y} - b_{1x})^2] \sin^2 \chi + [(a_{2x} + b_{2y})^2 + (a_{2y} - b_{2x})^2] \sin^2 2\chi + \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} [(a_{nx} - b_{ny})^2 \sin^2 n\chi + (a_{n+2,x} + b_{n+2,y})^2 \sin^2(n+2)\chi] + \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} [(a_{ny} + b_{nx})^2 \sin^2 n\chi + (a_{n+2,y} - b_{n+2,x})^2 \sin^2(n+2)\chi]. \quad (\text{VIII.18}) \end{aligned}$$

Теперь вернемся к выражению (VIII. 10). Часть его, связанная со второй вариацией $\delta^2 Q_n$, имеет вид

$$\delta^2 Q_n = \frac{\psi_I t^2}{4\pi} \int_0^\pi d\chi \frac{1}{\rho_0} [-f'(\alpha\rho_0)] \left\{ \langle (\delta p)^2 \rangle_\psi + \left[1 - \frac{\alpha\rho_0 f''(\alpha\rho_0)}{f'(\alpha\rho_0)} \right] \left\langle \frac{(\delta p\rho_0)^2}{\rho_0^2} \right\rangle_\psi \right\}. \quad (\text{VIII.19})$$

Поскольку ρ_0 зависит лишь от $|\sin \chi|$, интеграл по χ здесь можно брать в пределах от нуля до $\pi/2$, введя еще множитель 2. Определим величины

$$b_n(\kappa) = 2 \int_0^{\pi/2} d\chi \frac{-f'(\kappa \sin \chi)}{\sin \chi} \sin^2 n\chi, \quad (\text{VIII.20})$$

$$\tilde{b}_n(\kappa) = 2 \int_0^{\pi/2} d\chi f''(\kappa \sin \chi) \sin^2 n\chi. \quad (\text{VIII.21})$$

Очевидно, при $f(z) = e^{-z}$ эти определения переходят в приведенные в основном тексте (формулы (III. 7.30) и (III. 7.31)). Возвращаясь от переменных α_{Ix} , b_{Ix} и b_{Iy} к переменным R , ψ и ϕ , а затем переходя к переменным (III. 7.25) — (III. 7.28), получим (в случае экспоненциальной функции f) выражение (III. 7.29).

IX*. Вычисление величин $\Pi_\perp(\kappa)$ и $\Pi_\parallel(\kappa)$

Представим величину $\Pi_\perp(\kappa)$ в следующем виде:

$$\Pi_\perp(\kappa) = \prod_{n=2}^{\infty} \left[1 - \frac{b_n(\kappa)}{n^2 b_1(\kappa)} \right]^{-1} = \exp[-K(\kappa)], \quad (\text{IX.1})$$

где

$$K(\kappa) = \sum_{n=2}^{\infty} \ln \left[1 - \frac{b_n(\kappa)}{n^2 b_1(\kappa)} \right]. \quad (\text{IX.2})$$

Для экспоненциальной корреляционной функции при $|\kappa| \gg 1$ мы имеем

$$b_n(\kappa) = \frac{1}{2} \ln \left(1 + \frac{4\pi^2}{\kappa^2} \right) + \frac{2n^2}{\kappa^2 (4n^2 + \kappa^2)}, \quad (\text{IX.3})$$

$$b_n(\kappa) \approx \frac{2n^2}{\kappa^2} \left(1 - \frac{2n^2 - 1}{\kappa^2} \right) \quad \text{при } n \ll |\kappa|,$$

$$b_n(\kappa) \sim \ln \frac{n}{\kappa} \quad \text{при } n > |\kappa|.$$

Удобно также использовать приближенное выражение для $b_n(\kappa)$, которое получается, если фиксировать аргумент $u = 2n/\kappa$ и выполнить разложение по $1/\kappa^2$:

$$b(u) \equiv b\left(\frac{2n}{\kappa}\right) \approx \frac{1}{2} \ln(1 + u^2) + \frac{u^2}{2\kappa^2(1 + u^2)}. \quad (\text{IX.4})$$

Используя выражение (IX.3), видим, что функция $\chi(z)$ непрерывного комплексного аргумента z ,

$$\chi(z) = 1 - \frac{1}{z^2 b_1(\kappa)} \left[\frac{1}{2} \ln \left(1 + \frac{4z^2}{\kappa^2} \right) + \frac{2z^2}{\kappa^2 (4z^2 + \kappa^2)} \right], \quad (\text{IX.5})$$

обращается в нуль при $z = 1$. В области $\text{Re } z \geq 2$ имеем $0 < |\chi| < 1$, и, следовательно, в этой области функция

$$f(z) = \ln \chi(z) \quad (\text{IX.6})$$

регулярна.

Очевидно также, что ряд (IX.2) сходится, так что допустимо использовать следующую модификацию формулы суммирования Эйлера — Маклорена:

$$\sum_{n=2}^{\infty} f(n) = \frac{1}{2} f(2) + \int_2^{\infty} f(z) dz - 2 \int_0^{\infty} \frac{f(2+iy) - f(2-iy)}{2i} \frac{dy}{e^{2\pi y} - 1}. \quad (\text{IX.7})$$

Сумму (IX.2) для $K(\kappa)$ с функцией f , заданной равенствами (IX.5), (IX.6), вычислим, отбрасывая слагаемые, убывающие при $|\kappa| \rightarrow \infty$ или постоянные. При этом для первого и последнего членов в правой части (IX.7) можно использовать разложение $f(z)$ при $|z| \ll |\kappa|$:

$$f(z) \approx \ln \frac{2(z^2 - 1)}{\kappa^2}. \quad (\text{IX.8})$$

Так, с указанной точностью

$$1/2 f(2) \approx -\ln \kappa, \quad (\text{IX.9})$$

а последнее слагаемое можно вообще отбросить. Далее, во втором слагаемом в правой части (IX.7) можно, пользуясь формулой (IX.4), перейти к интегрированию по переменной $u = 2z/\kappa$:

$$J = \int_2^{\infty} f(z) dz = \frac{\kappa}{2} \int_{4/\kappa}^{\infty} du \ln \left[1 - \frac{\ln(1+u^2)}{u^2} - \frac{1}{\kappa^2} \frac{\ln(1+u^2)}{u^2} - \frac{1}{\kappa^2(1+u^2)} \right]. \quad (\text{IX.10})$$

Два последних слагаемых в квадратных скобках в (IX.10) влияют лишь на постоянное слагаемое в J при $|\kappa| \rightarrow \infty$. Отбрасывая их, получаем

$$J \approx \frac{\kappa}{2} \int_0^{\infty} du \ln \left[1 - \frac{\ln(1+u^2)}{u^2} \right] - \frac{\kappa}{2} \int_0^{4/\kappa} du \ln \frac{u}{2}. \quad (\text{IX.11})$$

Подынтегральное выражение в первом слагаемом в (IX.11) изменяется от $\ln(u^2/2)$ при малых u до $-(2\ln u)/u^2$ при $u \gg 1$. Для грубой оценки его достаточно положить

$$\begin{aligned} -2v &= \int_0^{\infty} du \ln [1 - u^{-2} \ln(1+u^2)] \approx \int_0^1 du \ln(u^2/2) - 2 \int_1^{\infty} du u^{-2} \ln u = \\ &= -(4 + \ln 2). \end{aligned} \quad (\text{IX.12})$$

Очевидно, v есть положительная постоянная, близкая к двум.

Итак, с принятой степенью точности получаем

$$J = -v\kappa + 4 \ln \kappa \quad (\text{IX.13})$$

С учетом (IX. 9) имеем

$$K(x) = -vx + 3 \ln x + \text{const.} \quad (\text{IX.14})$$

т. е.

$$\Pi_{\perp}(x) \approx \frac{a_{\perp}}{x^3} e^{vx}. \quad (\text{IX.15})$$

Из вывода ясно, что этот результат справедлив в области, где $\exp(vx)$ растет быстрее x^4 , т. е., например, при $\text{Im } x = 0$, $x > 4/v$. Появление этого растущего с $|x|$ множителя есть следствие эффективного сильного вырождения длинных оптимальных петель.

Обратимся теперь к величине $\Pi_{\parallel}(x)$. Удобно представить ее в виде, аналогичном (IX. 1):

$$\Pi_{\parallel}(x) = \prod_{n=2}^{\infty} [(1 - \xi(n-1))(1 - \xi(n+1)) - \zeta^2(n)]^{-1}, \quad (\text{IX.16})$$

где

$$\xi(n) = \frac{b_n(x) - \bar{b}_n(x)}{2n^2 b_1(x)}, \quad \zeta(n) = \frac{b_n(x) + \bar{b}_n(x) - b_1(x) - \bar{b}_1(x)}{2(n^2 - 1) b_1(x)}, \quad (\text{IX.17})$$

$$\bar{b}_n(x) = -x \frac{d}{dx} b_n(x). \quad (\text{IX.18})$$

Подобно (IX. 2) и (IX. 7), положим

$$\Pi_{\parallel}(x) = \exp[-L(x)], \quad (\text{IX.19})$$

$$L(x) = \sum_{n=2}^{\infty} \varphi(n) = \frac{1}{2} \varphi(2) + \int_2^{\infty} \varphi(z) dz + i \int_0^{\infty} \frac{\varphi(2+iy) - \varphi(2-iy)}{e^{2\pi y} - 1} dy, \quad (\text{IX.20})$$

$$\varphi(n) = \ln [(1 - \xi(n-1))(1 - \xi(n+1)) - \zeta^2(n)] \equiv \ln \omega(n, x). \quad (\text{IX.21})$$

На основании (IX. 3) и (IX. 18) при больших $|x|$ имеем

$$\bar{b}_n(x) \approx \frac{u^2}{1+u^2} + \frac{1}{x^2} \frac{u^2}{1+u^2} \left(1 + \frac{1}{1+u^2}\right), \quad (\text{IX.22})$$

где по-прежнему $u = 2n/x$. Выпишем различные разложения по x^{-1} для интересующих нас величин. При малых $n (\ll |x|)$ имеем

$$b_n(x) = \frac{2n^2}{x^2} \left(1 - \frac{2n^2 - 1}{x^2}\right), \quad \bar{b}_n(x) = \frac{4n^2}{x^2} \left(1 - \frac{4n^2 - 2}{x^2}\right),$$

$$b_n(x) - \bar{b}_n(x) = -\frac{2n^2}{x^2} \left[1 - \frac{3(2n^2 - 1)}{x^2}\right],$$

$$b_n(x) + \bar{b}_n(x) = \frac{2n^2}{x^2} \left[3 - \frac{5(2n^2 - 1)}{x^2}\right], \quad (\text{IX.23})$$

$$b_1(x) + \bar{b}_1(x) = \frac{2}{x^2} \left(3 - \frac{5}{x^2}\right);$$

$$\xi(n) = \frac{3}{2} - \frac{3n^2 - 2}{x^2}, \quad \zeta(n) = \frac{3}{2} - \frac{5n^2 + 2}{x^2}; \quad (\text{IX.24})$$

$$\omega(n, x) = 6n^2/x^2. \quad (\text{IX.25})$$

Далее, фиксируя, как и в случае (IX. 4), параметр $u = 2n/\kappa$ и пренебрегая величинами порядка κ^{-2} , имеем

$$\xi(u) = \frac{1}{2} u^{-2} \ln(1 + u^2) - (1 + u^2)^{-2}, \quad (\text{IX.26})$$

$$\zeta(u) = \frac{1}{2} u^{-2} \ln(1 + u^2) + (1 + u^2)^{-2}. \quad (\text{IX.27})$$

Нетрудно убедиться, что при малых u выражение (IX. 25) получается из другого, вытекающего из (IX. 26), (IX. 27):

$$\omega(u) = [1 - u^{-2} \ln(1 + u^2)] (1 + 2(1 + u^2)^{-1}), \quad (\text{IX.28})$$

$$\omega(u) \approx (3/2)u^2, \quad u \ll 1. \quad (\text{IX.29})$$

Фактически только два последних выражения и нужны для вычисления $\Pi_{\parallel}(\kappa)$ с прежней точностью (до постоянного множителя). Снова можно отбросить третье слагаемое в правой части (IX. 20) и положить

$$\frac{1}{2} \varphi(2) = \frac{1}{2} \ln \omega(2, \kappa) = \frac{1}{2} \ln \frac{2^4}{\kappa^2} = -\ln \kappa + \text{const} \quad (\text{IX.30})$$

Далее, интеграл по z в выражении (IX. 20) можно переписать в виде

$$J_1 = \int_2^{\infty} dz \ln \omega(z, \kappa) = -\nu\kappa + 4 \ln \kappa + \frac{\pi\kappa}{2} (\sqrt{3} - 1) + O(1). \quad (\text{IX.31})$$

Согласно (IX. 30) и (IX. 31) находим окончательно

$$\Pi_{\parallel}(\kappa) = \frac{a_{\parallel}}{\kappa^3} \exp \left\{ \kappa \left[\nu - \frac{\pi}{2} (\sqrt{3} - 1) \right] \right\} = \frac{a_{\parallel}}{\kappa^3} e^{\kappa(\nu - 1.15)}, \quad (\text{IX.32})$$

где константа ν дается формулой (IX. 12).

Х*. Поведение решения кинетического уравнения в области малых частот

Исследуем поведение решения кинетического уравнения (IV.4.13) в области низких частот. Вводя обозначения

$$\frac{T\delta f_{\lambda}(\omega)}{n_F(E_{\lambda}) [1 - n_F(E_{\lambda})]} \equiv y_{\lambda}(\omega), \quad \gamma_{\lambda} \equiv \sum_{\lambda'} \Gamma_{\lambda\lambda'}$$

это уравнение можно переписать в виде

$$(\gamma_{\lambda} + i\omega n_F(E_{\lambda}) [1 - n_F(E_{\lambda})]) y_{\lambda} + \sum_{\lambda'} \Gamma_{\lambda\lambda'} y_{\lambda'} = - \sum_{\lambda'} \Gamma_{\lambda\lambda'} (\mathcal{Y}_{\lambda}^{\circ} - \mathcal{Y}_{\lambda'}^{\circ}). \quad (\text{X.1})$$

Рассмотрим систему, изображенную на рис. 14, б, и будем обозначать состояния, локализованные в подсистеме A , символами μ ($\mu = 1, 2, \dots, N$), а состояния, локализованные вне ее, — символами ν . Тогда уравнение (X. 1) можно переписать в виде системы N неоднородных линейных алгебраических уравнений:

$$(\gamma_{\mu} + i\omega n_F(E_{\mu}) [1 - n_F(E_{\mu})]) y_{\mu}(\omega) - \sum_{\mu'} \Gamma_{\mu\mu'} y_{\mu'}(\omega) = -T i_{\mu} - \sum_{\mu'} \Gamma_{\mu\mu'} (\mathcal{Y}_{\mu}^{\circ} - \mathcal{Y}_{\mu'}^{\circ}). \quad (\text{X.2})$$

Здесь $i_\mu = \sum_\nu i_{\mu\nu}$, где $i_{\mu\nu}$ — парциальные потоки между центрами (см. (IV.4.14)). Таким образом, i_μ есть «граничный» поток, втекающий в μ -й центр подсистемы A из внешних центров; потоки i_μ отличны от нуля лишь для центров, близких к границам (лежащих на расстояниях порядка R_c от них). Формальное решение уравнений (X.2) можно записать в виде

$$y_\mu(\omega) = D_\mu(\omega)/D(\omega). \quad (X.3)$$

Здесь

$$D(\omega) = |\{\gamma_\mu + i\omega n_F(E_\mu)[1 - n_F(E_\mu)]\} \delta_{\mu\mu'} - \Gamma_{\mu\mu'}| \quad (X.4)$$

есть детерминант системы (порядка N), а $D_\mu(\omega)$ — детерминант, полученный из $D(\omega)$ заменой μ -го столбца неоднородными членами. Таким образом,

$$D_\mu(\omega) = - \sum_{\mu''} \Gamma_{\mu'\mu''} (\mathcal{Y}_{\mu'} - \mathcal{Y}_{\mu''}) A_{\mu'\mu}(\omega) - T \sum_{\mu'} i_{\mu'} A_{\mu'\mu}(\omega), \quad (X.5)$$

где $A_{\mu'\mu}(\omega)$ — соответствующие алгебраические дополнения. Из формулы (X.4) и определения γ_λ видно, что $D(\omega) \rightarrow 0$ при $\omega \rightarrow 0$, поскольку сумма всех столбцов детерминанта дает столбец, μ -й элемент которого равен $i\omega n_F(E_\mu)[1 - n_F(E_\mu)]$. Раскрывая определитель по этому столбцу, получаем

$$D(\omega) = i\omega \sum_{\mu} n_F(E_\mu)[1 - n_F(E_\mu)] A_{\mu 1}(\omega). \quad (X.6)$$

С другой стороны, величины $A_{\mu\mu'}(\omega)$ остаются конечными в пределе $\omega \rightarrow 0$. Более того, в силу линейной зависимости строк определителя (X.4) при $\omega = 0$ все дополнения $A_{\mu\mu'}(\omega)$ при $\omega = 0$ одинаковы:

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} A_{\mu\mu'}(\omega) = A. \quad (X.7)$$

Эти свойства определителей позволяют исследовать поведение решения (X.3) при $\omega \rightarrow 0$. Используя (X.5), перепишем (X.3) в виде

$$y_\mu(\omega) = \frac{\sum_{\mu''} \Gamma_{\mu'\mu''} (\mathcal{Y}_{\mu'} - \mathcal{Y}_{\mu''}) A_{\mu'\mu}(\omega)}{i\omega \sum_{\mu'} n_F(E_{\mu'}) [1 - n_F(E_{\mu'})] A_{\mu'1}(\omega)} - \frac{T \sum_{\mu'} i_{\mu'} A_{\mu'\mu}(\omega)}{i\omega \sum_{\mu'} n_F(E_{\mu'}) [1 - n_F(E_{\mu'})] A_{\mu'1}(\omega)} = y_\mu^{(r)}(\omega) + y_\mu^{(s)}(\omega). \quad (X.8)$$

Первый член в (X.8) остается конечным при $\omega \rightarrow 0$. Действительно, сумму, стоящую в числителе, можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned} \sum_{\mu''} \Gamma_{\mu'\mu''} (\mathcal{Y}_{\mu'} - \mathcal{Y}_{\mu''}) A_{\mu'\mu} &= \sum_{\mu''} \mathcal{Y}_{\mu'} (\gamma_{\mu'} \delta_{\mu''\mu'} - \Gamma_{\mu''\mu'}) A_{\mu''\mu} = \\ &= \sum_{\mu''} \mathcal{Y}_{\mu'} \{(\gamma_{\mu'} + i\omega n_F(E_{\mu'}) [1 - n_F(E_{\mu'})]) \delta_{\mu''\mu'} - \Gamma_{\mu''\mu'}\} A_{\mu''\mu} - \\ &\quad - i\omega \sum_{\mu'} \mathcal{Y}_{\mu'} n_F(E_{\mu'}) [1 - n_F(E_{\mu'})] A_{\mu'\mu} = \\ &= \mathcal{Y}_{\mu} D(\omega) - i\omega \sum_{\mu'} \mathcal{Y}_{\mu'} n_F(E_{\mu'}) [1 - n_F(E_{\mu'})] A_{\mu'\mu}. \quad (X.9) \end{aligned}$$

Отсюда, с учетом (X.6), видно, что числитель пропорционален ω при малых ω .

С другой стороны, последний член в (X. 8) в силу свойства (X. 7) при малых ω ведет себя как

$$y_{\mu}^{(s)} \sim - \frac{T \sum_{\mu'} i_{\mu'}}{i\omega \sum_{\mu'} n_F(E_{\mu'}) [1 - n_F(E_{\mu'})]}. \quad (\text{X.10})$$

В числителе $\sum_{\mu'} i_{\mu'}$ есть сумма граничных потоков. Для подсистемы А (рис. 14, б) мы имеем

$$\sum_{\mu'} i_{\mu'} = i(x_1) - i(x_2),$$

где $i(x_1)$ есть суммарный поток, вытекающий через плоскость $x = x_1$, а $i(x_2)$ — поток, вытекающий через плоскость $x = x_2$. Если средний поток меняется вдоль оси Ox по закону e^{ikx} , то при $kL = k(x_2 - x_1) \ll 1$

$$y_{\mu}^{(s)} \sim \frac{Ti(x_1 + L/2)kL}{\omega \sum_{\mu'} n_F(E_{\mu'}) [1 - n_F(E_{\mu'})]}. \quad (\text{X.11})$$

Регулярная часть решения $y_{\mu}^{(r)}$ не дает вклада в плотность статического тока. Действительно, с учетом (X. 9) имеем

$$\sum_{\mu} y_{\mu}^{(r)} n_F(E_{\mu}) [1 - n_F(E_{\mu})] = \sum_{\mu} \mathcal{Y}_{\mu} n_F(E_{\mu}) [1 - n_F(E_{\mu})] - \frac{\sum_{\mu\mu'} \mathcal{Y}_{\mu} n_F(E_{\mu'}) [1 - n_F(E_{\mu'})] A_{\mu'\mu} n_F(E_{\mu}) [1 - n_F(E_{\mu})]}{\sum_{\mu'} n_F(E_{\mu'}) [1 - n_F(E_{\mu'})] A_{\mu'1}}. \quad (\text{X.12})$$

Замечая, что в пределе $\omega \rightarrow 0$ сумма

$$\sum_{\mu} A_{\mu'\mu} n_F(E_{\mu}) [1 - n_F(E_{\mu})] = \frac{D(\omega)}{i\omega}$$

и не зависит от μ' , мы видим, что выражение (X. 12) обращается в нуль. Таким образом, конечное значение плотности статического прыжкового тока обусловлено сингулярной частью решения (X. 11). Подставляя (X. 8), (X. 11) в формулу (IV. 5.8), мы получаем в пределе при $\omega \rightarrow 0$ для средней по объему плотности тока

$$i = -e \frac{\omega}{k\Omega} \frac{kLi(x_1 + L/2)}{\omega} = -\frac{e}{S} i(x_1), \quad (\text{X.13})$$

что, с учетом определения потока $i(x_1)$ через границу $x = x_1$, в точности совпадает с выражением (IV. 5.14).

XI. Некоторые результаты стандартной теории протекания [51—53]

Пусть имеется решетка регулярно расположенных узлов, причем соседние узлы соединены связями. Будем для определенности считать, что наличие связи между узлами означает возможность протекания по ней жидкости; иногда говорят, что узлы, соединенные связями, «смачивают друг друга». Существует два способа введения беспорядка в рассматриваемой системе:

а) будем случайным образом, с вероятностью $1 - p$, блокировать (разрывать) связи в системе (*задача связей*);

б) будем случайным образом, с вероятностью $1 - p$, блокировать узлы (*задача узлов*).

Макроскопически большая («бесконечная») система называется протекаемой, если сквозь нее возможно течение жидкости по неразорванным связям (в задаче связей) или по связям, проходящим только через открытые (неблокированные) узлы (в задаче узлов). Очевидно, что исходная система при $p = 1$ протекаема. *Задача протекания* состоит в определении минимального значения $p = p_c$, вплоть до которого бесконечная система остается протекаемой.

Будем называть неразорванные связи, сходящиеся в общем узле, зацепляющимися, а совокупность зацепляющихся друг за друга связей — *кластером* связей. Аналогично, кластером узлов называется совокупность смежных друг друга открытых узлов. Ясно, что появление протекания в бесконечной системе при возрастании p связано с образованием бесконечного кластера связей или узлов, а порог протекания представляет собой порог образования бесконечного кластера. В области $p < p_c$ в системе существуют лишь конечные кластеры, размеры которых возрастают при $p \rightarrow p_c$.

Задача узлов в известном смысле оказывается более общей. Именно, задачу связей можно всегда свести к задаче узлов на решетке иной геометрии,

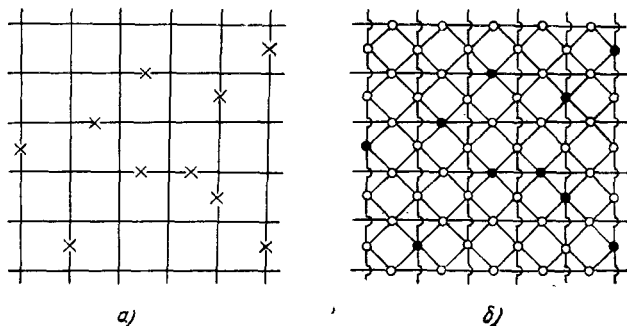


Рис. 33.

помещая узлы в центрах связей и сопоставляя блокированные узлы блокированным связям (обратная процедура возможна не всегда). Рис. 33, а иллюстрирует задачу связей для простой квадратной решетки; а рис. 33, б — эквивалентную ей задачу узлов на решетке, в которой связаны не только ближайшие, но и часть вторых соседей. Видно, что геометрия решетки в эквивалентной задаче узлов оказывается, вообще говоря, более сложной, нежели в исходной задаче связей. По этой причине сводить задачу связей к задаче узлов не всегда удобно.

Между порогами протекания в задаче связей и узлов, $p_c^{(b)}$ и $p_c^{(s)}$, для одной и той же решетки существует соотношение $p_c^{(s)} \geq p_c^{(b)}$. Это неравенство есть отражение того факта, что блокировка узла означает одновременно блокировку всех связей, сходящихся в этом узле.

За исключением небольшого числа простейших двумерных решеток, порог протекания не удается найти аналитически. Существует, однако, большое число расчетов на ЭВМ для различных двумерных и трехмерных решеток; некоторые результаты этих расчетов приведены в табл. IV, взятой из обзора [52].

Таблица IV

Решетки	z	$\rho_c^{(b)}$	$\rho_c^{(s)}$	$v_c = z\rho_c^{(b)}$	f	$v_c = f\rho_c^{(s)}$
Двумерные						
Шестиугольная	3	0,6527 *	0,700	1,96	0,61	0,427
Квадратная	4	0,500 *	0,590	2,00	0,79	0,466
Треугольная	6	0,3473 *	0,500	2,08	0,91	0,455
Трехмерные						
Типа алмаза	4	0,388	0,425	1,55	0,34	0,145
П. К.	6	0,247	0,307	1,48	0,52	0,160
О. Ц. К.	8	0,178	0,243	1,42	0,68	0,165
Г. Ц. К.	12	0,119	0,195	1,43	0,74	0,144

*) Звездочкой отмечены точные результаты.

Из табл IV видно, что значения $\rho_c^{(b)}$ и $\rho_c^{(s)}$ заметно различаются для решеток разных типов. В то же время существуют определенные комбинации параметров (так называемые приближенные инварианты теории протекания), мало меняющиеся при переходе от одной решетки данной размерности к другой. К числу таких инвариантов относятся:

1) Среднее число связей, приходящееся на один узел, $v_c = z\rho_c^{(b)}$, где z — координационное число. Из табл. IV видно, что для двумерных решеток $v_c \approx 2,0$, а для трехмерных $v_c \approx 1,5$; отклонения от указанных значений не превосходят 0,1. Соответственно можно записать приближенное «эмпирическое» соотношение

$$v_c = \frac{d}{d-1},$$

где d — размерность пространства.

2) Критическая доля разрешенного объема v_c , определяемая следующим образом. Пусть f есть доля объема, занимаемая сферами, описанными вокруг каждого узла решетки и радиус которых равен половине расстояния до ближайшего узла. Величина, v_c есть доля объема, занятая сферами, описанными около открытых узлов, $v_c = f\rho_c^{(s)}$. Из табл. IV видно, что в двумерном случае $v_c = 0,45 \pm 0,02$, а в трехмерном случае $v_c = 0,15 \pm 0,01$.

Приближенная инвариантность величин v_c и v_c имеет место лишь для решеток одной размерности и при условии, что каждый узел связан лишь с z ближайшими соседями. При введении связей с более далекими соседями значения v_c и v_c , вообще говоря, меняются. Например, при введении связей с соседями второй координационной сферы значение v_c возрастает для простой квадратной решетки от 0,466 до 0,548, а для простой кубической решетки — от 0,160 до 0,192 [52]. В общем случае значения v_c и v_c оказываются зависящими от отношения радиуса n -й координационной сферы, внутри которой все узлы могут быть связаны с данным, к постоянной решетки*). Экстраполяция к случаю больших n дает значения \bar{v}_c , близкое к 4,5 в двумерном случае и к 2,7 в трехмерном случае (Н. Ф. Далтон, К. Домб, М. Ф. Сайкс, 1964).

*) При этом, разумеется, радиус n -й координационной сферы должен оставаться намного меньшим линейных размеров системы.

Было отмечено также существование эмпирического соотношения

$$\bar{v}_c^d \approx 20,$$

справедливого для $d = 2$ и $d = 3$. Заметим, что экстраполированные к $n \rightarrow \infty$ значения среднего числа связей на узел в пороговой точке близки к соответствующим величинам, полученным в задаче с хаотически расположенными в пространстве центрами (см. § IV. 9).

XII*. Квазиклассический расчет функции Грина для электрона в гладком гауссовом случайном поле

Настоящее приложение содержит квазиклассический расчет одночастичной запаздывающей функции Грина электрона $G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t')$ в гладком гауссовом случайном поле. Обозначим через $U_l(\mathbf{x})$ гладкую случайную потенциальную энергию, отвечающую носителю заряда в l -й энергетической зоне полупроводника. Основные параметры, характеризующие статистические свойства случайного поля, суть ψ_{1l} — средний квадрат, U_l — и средний квадрат напряженности соответствующего электрического поля $2\psi_{2l}$:

$$\psi_{1l} = \langle U_l^2 \rangle, \quad \psi_{2l} = \frac{1}{2} \langle (\nabla U_l)^2 \rangle. \quad (\text{XII. 1})$$

Здесь угловые скобки обозначают операцию усреднения (см. § II. 7).

Тогда основное условие гладкости гауссова случайного поля имеет вид (II. 8.2):

$$\left(\frac{\hbar^2}{4m_l} \cdot \psi_{2l} \right)^{1/3} \ll \psi_{1l}^{1/2}. \quad (\text{XII. 2})$$

Считая это условие выполненным для интересующей нас зоны с законом дисперсии $E_l(\mathbf{p})$, запишем уравнение движения для $G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t')$:

$$i\hbar \frac{\partial G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t')}{\partial t} - [E_l(\mathbf{p}) + U(\mathbf{x})] G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t') = -\hbar \delta(t - t') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (\text{XII. 3})$$

Переходя к фурье-образу $G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega)$ по формуле

$$G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t') = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega), \quad (\text{XII. 4})$$

получим из уравнения (XII. 3)

$$[\hbar\omega - E_l(-i\hbar \nabla_{\mathbf{x}}) - U(\mathbf{x})] G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = -\frac{\hbar}{2\pi} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (\text{XII. 5})$$

Составляя уравнение движения относительно переменной \mathbf{x}' , получаем аналогично

$$[\hbar\omega - E_l(-i\hbar \nabla_{\mathbf{x}'}) - U(\mathbf{x}')] G_r(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = -\frac{\hbar}{2\pi} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (\text{XII. 6})$$

В уравнениях (XII. 5) и (XII. 6) удобно перейти к новым переменным:

$$\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{x}', \quad \mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{x} + \mathbf{x}'). \quad (\text{XII. 7})$$

Рассмотрим случай простых квадратичных законов дисперсии:

$$E_c(\mathbf{p}) = p^2/2m_c, \quad (\text{XII. 8})$$

$$E_v(\mathbf{p}) = -E_g - p^2/2m_v. \quad (\text{XII. 9})$$

Составляя полусумму и разность уравнений (XII. 5) и (XII. 6), имеем в новых переменных (XII. 7)

$$\{\hbar\omega - [E_l(0) + T_{\mathbf{R}}^{(l)} + T_{\mathbf{r}}^{(l)} + V(\mathbf{R}, \mathbf{r})]\} G_r(\mathbf{R}, \mathbf{r}; \omega) = -(\hbar/2\pi) \delta(\mathbf{r}) \quad (\text{XII. 10})$$

и

$$\left\{ \pm \frac{\hbar^2}{m_l} (\nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{R}}) - U(\mathbf{R} + \mathbf{r}/2) + U(\mathbf{R} - \mathbf{r}/2) \right\} G_r(\mathbf{R}, \mathbf{r}; \omega) = 0. \quad (\text{XII. 11})$$

Здесь

$$T_{\mathbf{R}}^{(l)} = \mp \frac{\hbar^2}{8m_l} \nabla_{\mathbf{R}}^2, \quad T_{\mathbf{r}}^{(l)} = \mp \frac{\hbar^2}{2m_l} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \quad (\text{XII. 12})$$

и

$$V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \frac{1}{2} [U(\mathbf{R} + \mathbf{r}/2) + U(\mathbf{R} - \mathbf{r}/2)],$$

где верхний (нижний) знак отвечает случаю $l = c$ ($l = v$). Уравнение (XII. 10) решается с дополнительным условием (XII. 11). В дальнейшем мы будем решать уравнение (XII. 10) для случая $l = c$, опуская индекс c для краткости. Решение для $l = v$ получается заменой $m_c \rightarrow -m_v$ и при учете того, что $E_v(0) = -E_g$.

Уравнение (XII. 10) решается методом, аналогичным «методу пятого параметра» в квантовой электродинамике [62, 63]. Замечая, что функция $G_r(\mathbf{R}, \mathbf{r}; \omega)$ аналитична в верхней полуплоскости комплексной переменной ω , представим ее в виде

$$G_r(\mathbf{R}, \mathbf{r}; \omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \int_0^{\infty} ds e^{ish\omega - es} L\delta(\mathbf{r}), \quad (\text{XII. 13})$$

где оператор L есть

$$L = \exp \{-is(T_{\mathbf{R}} + T_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{R}, \mathbf{r}))\}. \quad (\text{XII. 14})$$

В силу плавности изменения гладкого поля в пространстве при реализации оператора L можно использовать квазиклассическое приближение. При этом мы будем оставлять квантовые поправки по случайному полю до порядка \hbar^2 включительно.

Реализация оператора L выполняется следующим образом. Выделим из оператора L сперва оператор $\exp(-isT_{\mathbf{R}})$, определив новый оператор S_1 соотношением

$$L = S_1 \exp(-isT_{\mathbf{R}}). \quad (\text{XII. 15})$$

Дифференцируя равенство (XII. 15) по s , получим дифференциальное уравнение для S_1 :

$$i \frac{\partial S_1}{\partial s} = S_1 \left\{ T_{\mathbf{r}} + e^{-isT_{\mathbf{R}}} V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) e^{isT_{\mathbf{R}}} \right\}. \quad (\text{XII. 16})$$

Пользуясь известной формулой операторной алгебры

$$e^A B e^{-A} = B + [AB]_- + \frac{1}{2!} [A [AB]_-]_- + \frac{1}{3!} [A [A [AB]_-]_-]_- + \dots,$$

найдем, оставив члены до порядка \hbar^2 включительно:

$$i \frac{\partial S_1}{\partial s} = S_1 \left\{ T_r + V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + is \frac{\hbar^2}{8m} \nabla_{\mathbf{R}}^2 V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + is \frac{\hbar^2}{4m} (\nabla_{\mathbf{R}} V(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \nabla_{\mathbf{R}}) \right\}. \quad (\text{XII. 17})$$

Уравнение (XII. 17) содержит дифференциальный оператор по \mathbf{R} только первой степени. Выделим теперь этот оператор, положив

$$S_1 = S_2 \exp \left\{ \frac{s^2 \hbar^2}{8m} (\nabla_{\mathbf{R}} V, \nabla_{\mathbf{R}}) \right\}. \quad (\text{XII. 18})$$

Дифференцируя (XII. 18) по s , получаем уравнение для оператора S_2 . Оставив в нем члены до порядка \hbar^2 , имеем

$$i \frac{\partial S_2}{\partial s} = S_2 \left\{ T_r + V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + is \frac{\hbar^2}{8m} \nabla_{\mathbf{R}}^2 V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + \frac{s^2 \hbar^2}{8m} (\nabla_{\mathbf{R}} V(\mathbf{R}, \mathbf{r}))^2 \right\}. \quad (\text{XII. 19})$$

Заметим теперь, что существенные расстояния $|\mathbf{r}| \sim \hbar/p$, т. е. порядка длины волны электрона. Последняя мала по сравнению с длиной, на которой существенно изменяется $U(\mathbf{x})$ (характерная длина, на которой $U(\mathbf{x})$ изменяется существенно, есть корреляционная длина L , определяющая убывание функции $\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ с ростом $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$, так что $1 \ll kL$). Поэтому функцию $U(\mathbf{R} + \mathbf{r}/2)$ можно разложить в ряд по степеням \mathbf{r} . Замечая еще, что $r \sim \hbar/\sqrt{2m\Phi}^{1/2}$, видим, что степени r в таком разложении эквивалентны степеням \hbar . Таким образом, с принятой степенью точности имеем

$$V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \approx U(\mathbf{R}) + \frac{1}{8} \frac{\partial^2 U}{\partial R_\alpha \partial R_\beta} r_\alpha r_\beta, \quad (\text{XII. 20})$$

а в квантовых поправках в (XII. 19) величину $U(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ можно заменить на $U(\mathbf{R})$. Тогда получим

$$i \frac{\partial S_2}{\partial s} = S_2 \left\{ T_r + U(\mathbf{R}) + \frac{1}{8} \frac{\partial^2 U}{\partial R_\alpha \partial R_\beta} r_\alpha r_\beta + \frac{is \hbar^2}{8m} \nabla_{\mathbf{R}}^2 U + \frac{s^2 \hbar^2}{8m} (\nabla_{\mathbf{R}} U)^2 \right\}. \quad (\text{XII. 21})$$

Выделим теперь оператор T_r , положив

$$S_2 = S_3 \exp(-isT_r). \quad (\text{XII. 22})$$

Тогда уравнение для S_3 примет вид

$$i \frac{\partial S_3}{\partial s} = S_3 \left\{ U(\mathbf{R}) + i \frac{s \hbar^2}{8m} \nabla_{\mathbf{R}}^2 U + \frac{s^2 \hbar^2}{8m} (\nabla_{\mathbf{R}} U)^2 + \frac{1}{8} e^{-isT_r} \frac{\partial^2 U}{\partial R_\alpha \partial R_\beta} r_\alpha r_\beta e^{isT_r} \right\}.$$

С принятой степенью точности имеем

$$i \frac{\partial S_3}{\partial s} = S_3 \left\{ U(\mathbf{R}) + \frac{1}{8} \frac{\partial^2 U}{\partial R_\alpha \partial R_\beta} r_\alpha r_\beta + \frac{i s \hbar^2}{4m} \nabla_{\mathbf{R}}^2 U + \frac{s^2 \hbar^2}{8m} (\nabla_{\mathbf{R}} U)^2 + \right. \\ \left. + \frac{i s \hbar^2}{4m} \frac{\partial U}{\partial R_\alpha \partial R_\beta} r_\alpha \frac{\partial}{\partial r_\beta} - \frac{s^2 \hbar^4}{8m^2} \frac{\partial^2 U}{\partial R_\alpha \partial R_\beta} \frac{\partial^2}{\partial r_\alpha \partial r_\beta} \right\}. \quad (\text{XII. 23})$$

Следует отметить, что в дальнейшем операторы $\frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial r_\beta}$ и $\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial^2}{\partial r_\alpha \partial r_\beta}$ действуют на функцию $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, давая члены порядка $\hbar k/m$ и $\hbar^2 k^2/m$, которые не малы по \hbar или \hbar^2 . Поэтому наличие последних двух членов в (XII. 23) не является превышением точности — они также порядка \hbar^2 , как и остальные. Кроме того, опять в рамках принятого приближения, все члены в правой части (XII. 23) коммутируют. Тогда уравнение (XII. 23) легко интегрируется:

$$S_3 = \exp \left\{ -i \int_0^s ds' K(s') \right\}, \quad (\text{XII. 24})$$

где величина $K(s)$ есть выражение в фигурных скобках в уравнении (XII. 23).

Подставим (XII. 15), (XII. 18), (XII. 22) и (XII. 24) в (XII. 13) и используем интегральное представление для функции $\delta(\mathbf{r})$. Получим для функции Грина l -й зоны

$$G_r^{(l)}(\mathbf{R}, \mathbf{r}; \omega) = \\ = \frac{i\hbar}{(2\pi)^4} \int_0^\infty ds \int dk \exp \{ -es + is [\hbar\omega - E_l(\mathbf{k}) - U(\mathbf{R})] + i\mathbf{k}\mathbf{r} + \varphi_l(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{k}, s) \}, \quad (\text{XII. 25})$$

где $E_l(\mathbf{k})$ есть закон дисперсии в l -й зоне (см (XII. 8), (XII. 9)), а функции φ_l ($l = c, v$) даются выражениями

$$\varphi_c(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{k}, s) = -\frac{i s^3 \hbar^2}{24m_c} (\nabla_{\mathbf{R}} U)^2 + \frac{s^2 \hbar^2}{8m_c} \nabla_{\mathbf{R}}^2 U - \\ - i \frac{\partial^2 U}{\partial R_\alpha \partial R_\beta} \left[\frac{s}{8} r_\alpha r_\beta + \frac{s^3 \hbar^4}{24m_c^2} k_\alpha k_\beta - \frac{s^2 \hbar^2}{8m_c} r_\alpha k_\beta \right] \quad (\text{XII. 26})$$

и

$$\varphi_v(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{k}, s) = i \frac{s^3 \hbar^2}{24m_v} (\nabla_{\mathbf{R}} U)^2 - \frac{s^2 \hbar^2}{8m_v} \nabla_{\mathbf{R}}^2 U - \\ - i \frac{\partial^2 U}{\partial R_\alpha \partial R_\beta} \left[\frac{s}{8} r_\alpha r_\beta + \frac{s^3 \hbar^4}{24m_v^2} k_\alpha k_\beta + \frac{s^2 \hbar^2}{8m_v} r_\alpha k_\beta \right]. \quad (\text{XII. 27})$$

Одночастичные функции Грина при наличии постоянного электрического поля легко получить из (XII. 25), (XII. 26) и (XII. 27) заменой $U(\mathbf{R})$ на

$U(\mathbf{R}) + e\mathcal{E}\mathbf{R}$. В результате имеем

$$G_r^{(l)}(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \omega; \mathcal{E}) = \frac{i\hbar}{(2\pi)^4} \int_0^\infty ds \int dk \exp \{ -\varepsilon s + i s [\hbar\omega - E_l(\mathbf{k}) - U(\mathbf{R}) - e\mathcal{E}\mathbf{R}] + i k \mathbf{r} + \varphi_{l, \mathcal{E}}(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{k}, s) \}, \quad (\text{XII. 28})$$

где

$$\varphi_{c, \mathcal{E}}(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{k}, s) = -i \frac{s^3 \hbar^2}{24m_c} (e\mathcal{E})^2 - i \frac{s^3 \hbar^2}{12m_c} (e\mathcal{E} \cdot \nabla_{\mathbf{R}} U) + \varphi_c(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{k}, s) \quad (\text{XII. 29})$$

и

$$\varphi_{v, \mathcal{E}}(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{k}, s) = i \frac{s^3 \hbar^2}{24m_v} (e\mathcal{E})^2 + i \frac{s^3 \hbar^2}{12m_v} (e\mathcal{E} \cdot \nabla_{\mathbf{R}} U) + \varphi_v(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{k}, s). \quad (\text{XII. 30})$$

Приведем для удобства основные формулы, описывающие правила усреднения физических величин по ансамблю гауссовых гладких полей. Оно производится с плотностью распределения, задаваемой функционалом (II. 7.12').

Усредним указанным образом выражение типа (см. (XII. 28))

$$A = \langle \exp F_{\mathbf{R}} U(\mathbf{R}) \rangle, \quad (\text{XII. 31})$$

где $F_{\mathbf{R}}$ — линейный дифференциальный оператор. Получим

$$A = \exp \left\{ \frac{1}{2} F_{\mathbf{R}} F_{\mathbf{R}'} \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{R}') \right\} \Big|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}'}, \quad (\text{XII. 32})$$

где $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{R}')$ — бинарная корреляционная функция случайного поля:

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = \langle U(\mathbf{R}) U(\mathbf{R}') \rangle. \quad (\text{XII. 33})$$

Обобщим указанный рецепт на случай отличных друг от друга случайных потенциалов U_c и U_v , отвечающих носителям заряда в разных зонах, c и v . В этом случае усреднение производится с функционалом

$$\mathcal{P}[U_c, U_v] = N \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' [U_c(\mathbf{r}) B_{cc}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U_c(\mathbf{r}') + U_v(\mathbf{r}) B_{vv}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U_v(\mathbf{r}') + 2U_c(\mathbf{r}) B_{cv}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U_v(\mathbf{r}')] \right\}. \quad (\text{XII. 34})$$

Аналогично (XII. 32), усреднение по распределению (XII. 34) дает (F_c и F_v — линейные дифференциальные операторы)

$$A_{cv} = \langle \exp \{ F_c U_c(\mathbf{R}) + F_v U_v(\mathbf{R}) \} \rangle = \exp \left\{ \frac{1}{2} F_c(\mathbf{R}) F_c(\mathbf{R}') \Psi_{cc}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') + \frac{1}{2} F_v(\mathbf{R}) F_v(\mathbf{R}') \Psi_{vv}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') + F_c(\mathbf{R}) F_v(\mathbf{R}') \Psi_{cv}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') \right\} \Big|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}'}. \quad (\text{XII. 35})$$

Здесь фигурирует очевидное обобщение функции (XII. 33):

$$\Psi_{ll'}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = \langle U_l(\mathbf{R}) U_{l'}(\mathbf{R}') \rangle. \quad (\text{XII. 36})$$

Наконец, в качестве примера использования полученных в настоящем приложении выражений приведем результат для плотности состояний в l -й зоне.

Исходя из выражения (XII. 25), в низшем по \hbar^2 приближении получаем

$$\rho_l(E) = \frac{2}{(2\pi)^4} \operatorname{Re} \int_0^\infty ds \int d\mathbf{k} \exp \left\{ -\varepsilon s + i s [E - E_l(\mathbf{k})] - \frac{1}{2} \psi_{1l} s^2 \right\}. \quad (\text{XII. 37})$$

На хвосте плотности состояний глубоко под дном зоны проводимости невозможной задачи мы получаем отсюда

$$\rho_c(E) = \frac{\psi_{1c} m_c^{3/2}}{2\pi^2 |E|^{3/2} \hbar^3} \exp \left(-\frac{E^2}{2\psi_{1c}} \right). \quad (\text{XII. 38})$$

XIII*. Вычисление интеграла по ω' в формуле для $\varepsilon_2(\omega)$ (V. 2.1)

Вычислим интеграл

$$J(s + s') \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' [n_F(\omega' - \omega) - n_F(\omega')] e^{i(s+s')\hbar\omega'}. \quad (\text{XIII. 1})$$

Подставляя сюда

$$n_F(\omega) = [e^{\beta(\hbar\omega - F)} + 1]^{-1}, \quad (\text{XIII. 2})$$

мы получаем

$$J(s + s') = \frac{2i}{\hbar} e^{i(s+s')(F + \frac{\hbar\omega}{2})} \sin \left[(s+s') \frac{\hbar\omega}{2} \right] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{e^{\beta\xi} + 1} e^{i(s+s')\xi}. \quad (\text{XIII. 3})$$

Интеграл по ξ легко вычисляется:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{e^{\beta\xi} + 1} e^{i(s+s')\xi} = \pi \left[\delta(s + s') - \frac{i}{\beta \operatorname{sh} [(s + s')\pi/\beta]} \right]. \quad (\text{XIII. 4})$$

Подставляя (XIII. 4) в (XIII. 3), находим

$$J(s + s') = \frac{2\pi}{\hbar} e^{i(s+s')(F + \hbar\omega/2)} \frac{\sin [(s + s')\hbar\omega/2]}{\beta \operatorname{sh} [(s + s')\pi/\beta]}. \quad (\text{XIII. 5})$$

Заметим теперь, что существенные значения s и s' порядка E^{-1} , где E — некоторая характерная энергия, на которой убывает коэффициент поглощения в запрещенной зоне. Мы рассматриваем случай низких температур:

$$T/\bar{E} \ll 1.$$

Поэтому $\operatorname{sh} [(s + s')\pi/\beta]$ можно заменить на $(s + s')\pi/\beta$.

Таким образом, мы получаем из (XIII. 5)

$$J(s + s') = \frac{2}{\hbar} e^{i(s+s')(F + \hbar\omega/2)} \frac{\sin [(s + s')\hbar\omega/2]}{s + s'}. \quad (\text{XIII. 6})$$

Это выражение можно получить и непосредственно из (XIII. 1), если заменить функции Ферми ступенчатыми функциями.

Используем теперь повсеместно принимаемое нами предположение о достаточно большой ширине запрещенной зоны:

$$E_g \gg \bar{E}.$$

Так как $\hbar\omega$ порядка E_g , мы получаем, используя известное представление δ -функции,

$$J(s + s') \approx \frac{2\pi}{\hbar} \delta(s + s'). \quad (\text{XIII. 7})$$

XIV*. Квазиклассический расчет функции Грина для электрона в примесном случайном поле

Вычислим здесь одночастичную функцию Грина для случайного поля (II. 7.23), обусловленного примесными центрами. При этом будем применять модифицированное квазиклассическое приближение, основанное на неравенстве (V. 4.5). Исходим, как и в случае гладкого поля, из общих формул (XII. 13) — (XII. 15). Для реализации оператора

$$L = S_1 e^{-isT_{\mathbf{R}}} \quad (\text{XIV. 1})$$

поступим теперь следующим образом. Заметим, что в выражении

$$e^{-isT_{\mathbf{R}}} V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) e^{isT_{\mathbf{R}}}$$

в дифференциальном уравнении (XII. 16) для S_1 в члене n -го порядка квазиклассического разложения по степеням \hbar^2 , помимо прочих, имеется следующее слагаемое:

$$\frac{(-isT_{\mathbf{R}})^n}{n!} V(\mathbf{R}, \mathbf{r}). \quad (\text{XIV. 2})$$

В силу кулоновской особенности мы получаем теперь вблизи каждого примесного центра сингулярности вида $\Delta_{\mathbf{R}}^n(1/R)$. Легко убедиться в том, что в n -м порядке выражение (XIV. 2) представляет собой наиболее расходящийся член. Идея модифицированного квазиклассического подхода заключается в суммировании по n всех наиболее расходящихся членов типа (XIV. 2). Это суммирование дает перенормированную потенциальную энергию $F(\mathbf{R}, \mathbf{r}, s)$ в виде

$$F(\mathbf{R}, \mathbf{r}, s) = e^{-isT_{\mathbf{R}}} V(\mathbf{R}, \mathbf{r}). \quad (\text{XIV. 3})$$

Пользуясь представлением для $U(\mathbf{R} \mp \mathbf{r}/2)$ в виде интеграла Фурье и дифференцируя под знаком интеграла, получаем

$$F(\mathbf{R}, \mathbf{r}, s) = \int d\mathbf{q} U(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R} - is\hbar^2 q^2/8m) \cos(1/2\mathbf{q}\mathbf{r}), \quad (\text{XIV. 4})$$

где $U(\mathbf{q})$ есть фурье-образ случайной потенциальной энергии, а m — эффективная масса в соответствующей зоне. Перенормированная потенциальная энергия (XIV. 4) содержит новую характерную длину $\bar{l} = \sqrt{s\hbar^2/m}$, помимо длины экранирования, входящей в $U(\mathbf{q})$. В дальнейшем мы применяем квазиклассическое приближение к функции (XIV. 4)*. На расстояниях порядка \bar{l} от данного центра квазиклассическое приближение будет неприменимо (параметр разложения обращается в единицу). Отношение вклада от таких областей к вкладу от основных областей, размером порядка радиуса экранирования r_0 , будет мало при условии

$$\bar{l}^2 \ll r_0^2 \quad (\text{XIV. 5})$$

* При этом следует проявлять осторожность, поскольку «множитель сходимости» $\exp(-is\hbar^2 q^2/8m)$ в (XIV. 4) не экспоненциально убывающий, а осциллирующий.

Как видно из формул (V. 4.17) и (V. 4.18), характерные значения s , существенные при вычислении коэффициента поглощения, определяются условием $s^{-1} \sim (na_B^3)^{2/5} E_B$. Подставляя это в выражение для l , видим, что условие (XIV. 5) эквивалентно равенству (V. 4.5). Таким образом, мы получаем уравнение для S_1 в виде

$$i \frac{\partial S_1}{\partial s} = S_1 \left\{ T_r + F(\mathbf{R}, \mathbf{r}, s) + i \frac{s \hbar^2}{4m} (\nabla_{\mathbf{R}} F(\mathbf{R}, \mathbf{r}, s), \nabla_{\mathbf{R}}) \right\}. \quad (\text{XIV. 6})$$

Введем теперь оператор S_2 аналогично (XII. 18):

$$S_1 = S_2 \exp \left(\frac{s^2}{2} \xi \nabla_{\mathbf{R}} \right), \quad (\text{XIV. 7})$$

где

$$\xi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, s) = \frac{\hbar^2}{4m} \nabla_{\mathbf{R}} F(\mathbf{R}, \mathbf{r}, s). \quad (\text{XIV. 8})$$

С принятой степенью точности имеем

$$\exp \left(\frac{s^2}{2} \xi \nabla_{\mathbf{R}} \right) F(\mathbf{R}, \mathbf{r}, s) \exp \left(- \frac{s^2}{2} \xi \nabla_{\mathbf{R}} \right) = F \left(\mathbf{R} + \frac{s^2}{2} \xi, \mathbf{r}, s \right).$$

Таким образом, для оператора S_2 получаем уравнение

$$i \frac{\partial S_2}{\partial s} = S_2 \left\{ T_r + F \left(\mathbf{R} + \frac{s^2}{2} \xi, \mathbf{r}, s \right) \right\}. \quad (\text{XIV. 9})$$

В дальнейшем член $\frac{s^2}{2} \xi$ окажется несущественным, но пока это неясно. Поэтому здесь величина $F \left(\mathbf{R} + \frac{s^2}{2} \xi, \mathbf{r}, s \right)$ не разложена по $\frac{s^2}{2} \xi$, как это делалось в Приложении XII при выводе уравнения (XII. 19).

Поступая теперь аналогично с оператором T_r , положим

$$S_2 = S_3 \exp(-isT_r) \quad (\text{XIV. 10})$$

и

$$S_3 = S_4 \exp \left(\frac{s^2}{2} \eta \nabla_{\mathbf{r}} \right), \quad (\text{XIV. 11})$$

где

$$\eta = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}} G \left(\mathbf{R} + \frac{s^2}{2} \xi, \mathbf{r}, s \right) \quad (\text{XIV. 12})$$

и

$$G \left(\mathbf{R} + \frac{s^2}{2} \xi, \mathbf{r}, s \right) = \exp \left(i \frac{s \hbar^2 \nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} \right) F \left(\mathbf{R} + \frac{s^2}{2} \xi, \mathbf{r}, s \right). \quad (\text{XIV. 13})$$

Уравнение для S_4 таково:

$$i \frac{\partial S_4}{\partial s} = S_4 G \left(\mathbf{R} + \frac{s^2}{2} \xi, \mathbf{r} + \frac{s^2}{2} \eta, s \right). \quad (\text{XIV. 14})$$

Интегрируя это уравнение и используя формулы (XIV. 1), (XIV. 7), (XIV. 10) и (XIV. 11) для вычисления $L\delta(\mathbf{r})$, имеем

$$L\delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \exp \left\{ -i \int_0^s ds' G \left(\mathbf{R} + \frac{s'^2}{2} \xi, \mathbf{r} + \frac{s'^2}{2} \eta, s' \right) + \right. \\ \left. + i \frac{s^2}{2} (\eta \mathbf{k}) - is \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + i(k\mathbf{r}) \right\}. \quad (\text{XIV. 15})$$

Подставляя (XIV. 15) в общее выражение (XII. 13), мы получаем одночастичную функцию Грина в случайном поле примесных центров. При расчете междузонной диэлектрической проницаемости по формуле (V. 1.14) мы воспользуемся упрощающим неравенством (V. 4.6). Тогда в функции Грина валентной зоны ($m_v = m_v$) можно перейти к пределу $m_v \rightarrow \infty$. Получим

$$G_r^{(v)}(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta(\mathbf{r}) \int_0^\infty ds \exp \left\{ is (\hbar\omega + E_g) - i \int_0^s ds' \int d\mathbf{q} \exp \left(i\mathbf{q}\mathbf{R} + is' \frac{\hbar^2 q^2}{4m_v} \right) U(\mathbf{q}) \Big|_{m_v \rightarrow \infty} \right\}. \quad (\text{XIV. 16})$$

В силу наличия δ -функции в правой части (XIV. 16) мы можем при вычислении междузонной диэлектрической проницаемости положить $\mathbf{r} = 0$ в функции Грина для зоны проводимости. Тогда имеем

$$G_r^{(c)}(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \omega) |_{\mathbf{r}=0} = \frac{i\hbar}{(2\pi)^4} \int_0^\infty ds \int d\mathbf{k} \exp \left\{ is \left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} \right) - i \int_0^s ds' \int d\mathbf{q} \exp \left[i \left(\mathbf{q}\mathbf{R} + \frac{s'^2}{2} \xi \right) - is' \frac{\hbar^2 q^2}{4m_c} \right] U(\mathbf{q}) \right\}. \quad (\text{XIV. 17})$$

Подставляя в $\frac{s^2}{2} \xi$ характерные значения s , видим, что этот член может быть опущен. В таком виде функция $G_r^{(c)}$ используется в дальнейших расчетах. Излагаемую здесь схему расчета легко перенести и на случай наличия постоянного внешнего поля — надо лишь добавить к $V(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ слагаемое $e\mathcal{E}\mathbf{R}$. В частности, уравнение (XIV. 9) приобретает теперь вид

$$i \frac{\partial S_2}{\partial s} = S_2 \left\{ T_r + F \left(\mathbf{R} + \frac{s^2}{2} (\xi + \xi_g), \mathbf{r}, s \right) + e \left(\mathcal{E}, \mathbf{R} + \frac{s^2}{2} (\xi + \xi_g) \right) \right\}, \quad (\text{XIV. 18})$$

где

$$\xi_g = \frac{\hbar^2}{4m} e\mathcal{E}. \quad (\text{XIV. 19})$$

Аналогично, для S_4 получим

$$i \frac{\partial S_4}{\partial s} = S_4 \left\{ G \left(\mathbf{R} + \frac{s^2}{2} (\xi + \xi_g), \mathbf{r} + \frac{s^2}{2} \eta, s \right) + e \left(\mathcal{E}, \mathbf{R} + \frac{s^2}{2} \xi_g + \frac{s^2 \hbar^2}{8m} \nabla_R G \left(\mathbf{R}, \mathbf{r} + \frac{s^2}{2} \eta, s \right) \right) \right\}. \quad (\text{XIV. 20})$$

Используя опять неравенство $m_v \gg m_c$, имеем

$$G_r^{(v)}(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \omega; \mathcal{E}) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta(\mathbf{r}) \int_0^\infty ds \exp \left\{ is (\hbar\omega + e\mathcal{E}\mathbf{R} + E_g) - i \int_0^s ds' \int d\mathbf{q} \exp \left(i\mathbf{q}\mathbf{R} + i \frac{s' \hbar^2 q^2}{4m_v} \right) U(\mathbf{q}) \Big|_{m_v \rightarrow \infty} \right\} \quad (\text{XIV. 21})$$

и

$$G_r^{(c)}(\mathbf{R}, \mathbf{r}; \omega; \xi) |_{r=0} = \frac{i\hbar}{(2\pi)^4} \int_0^\infty ds \int d\mathbf{k} \exp \left\{ is \left(\hbar\omega - e\xi\mathbf{R} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} \right) - \right. \\ \left. - i \frac{s^3 \hbar^2 (e\xi)^2}{24m_c} - i \int_0^s ds' \int d\mathbf{q} (1 + s'^2 \mathbf{q} \xi_{\mathbf{z}}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R} - is' \frac{\hbar^2 q^2}{4m_c}) U(\mathbf{q}) \right\}. \quad (\text{XIV. 22})$$

XV*. Преобразование выражения (VI. 2.23)

Преобразуем выражение (VI. 2.23) для $A_{l'l, \mathbf{k}}(\omega_s, \omega_l)$, используя периодичность функций $\omega_{l'l}(\mathbf{k}_l)$ и $\rho_{l'l}^{is}(\mathbf{k}_l)$. Введем обозначение

$$C_{l'l, \mathbf{k}}^{S, i}(\omega, t) = \rho_{l'l}^{S, i}(\mathbf{k}_l) \exp[it\varepsilon_{l'l}(\mathbf{k}, \omega; t)], \quad (\text{XV. 1})$$

где

$$\varepsilon_{l'l}(\mathbf{k}, \omega; t) = \int_0^t d\theta [\omega_{l'l}(\mathbf{k}_\theta) + \omega]. \quad (\text{XV. 2})$$

Тогда, согласно (VI. 2.23), величину $A_{l'l, \mathbf{k}}(\omega_s, \omega_l)$ можно представить в виде

$$A_{l'l, \mathbf{k}}(\omega_s, \omega_l) = \sum_{l''} [\tilde{A}_{l'l, \mathbf{k}, l''}(\omega_s, \omega_l) + \tilde{\tilde{A}}_{l'l, \mathbf{k}, l''}(\omega_s, \omega_l)], \quad (\text{XV. 3})$$

$$\tilde{A}_{l'l, \mathbf{k}, l''} = \frac{i}{\hbar m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} \int_{-\infty}^t dt' C_{l'l'', \mathbf{k}}^S(\omega_s, t) C_{l'l, \mathbf{k}}^i(-\omega_l, t'), \quad (\text{XV. 4})$$

$$\tilde{\tilde{A}}_{l'l, \mathbf{k}, l''} = -\frac{i}{\hbar m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} \int_{-\infty}^t dt' C_{l'l'', \mathbf{k}}^i(-\omega_l, t) C_{l'l, \mathbf{k}}^S(\omega_s, t). \quad (\text{XV. 5})$$

Принимая во внимание (XV. 2), мы получаем (в этом приложении для краткости введено обозначение $T_{\xi} = T$)

$$\varepsilon_{l'l}(\mathbf{k}, \omega; t + nT) = n\varepsilon_{l'l}(\mathbf{k}, \omega; T) + \varepsilon_{l'l}(\mathbf{k}, \omega; t), \quad (\text{XV. 6})$$

$$C_{l'l, \mathbf{k}}^{S, i}(t + nT) = \exp[in\varepsilon_{l'l}(\mathbf{k}, \omega; T)] C_{l'l, \mathbf{k}}^{S, i}(t), \quad (\text{XV. 7})$$

где n — любое целое число. Используя соотношение (XV. 7), находим:

$$\tilde{A}_{l'l, \mathbf{k}, l''} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp[in\varepsilon_{l'l}(\mathbf{k}, \omega_s; T)] \sum_{n'=-\infty}^{n-1} \exp[in'\varepsilon_{l'l}(\mathbf{k}, -\omega_l; T)] \times \\ \times \int_{-T/2}^{T/2} dt C_{l'l'', \mathbf{k}}^S(\omega_s, t) \int_{-T/2}^{T/2} dt' C_{l'l, \mathbf{k}}^i(-\omega_l, t') + \\ + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\{in[\varepsilon_{l'l}(\mathbf{k}, \omega_s; T) + \varepsilon_{l'l}(\mathbf{k}, -\omega_l; T)]\} \times \\ \times \int_{-T/2}^{T/2} dt C_{l'l'', \mathbf{k}}^S(\omega_s, t) \int_{-T/2}^{T/2} dt' C_{l'l, \mathbf{k}}^i(-\omega_l, t'). \quad (\text{XV. 8})$$

Суммирование по n и n' в выражении (XV. 8) можно выполнить с помощью следующих вспомогательных формул:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{inx} = 2 \lim_{N \rightarrow \infty} \operatorname{Re} \left\{ \frac{1 - e^{iNx}}{1 - e^{ix}} - \frac{1}{2} \right\}, \quad (\text{XV. 9})$$

$$\begin{aligned} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{inx} \sum_{n'=-\infty}^{n-1} e^{in'y} &= \\ &= \left(1 - 2 \lim_{N \rightarrow \infty} \operatorname{Re} \frac{1 - e^{iN(x+y)}}{1 - e^{i(x+y)}} \right) \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1 - e^{iN(x+y)}}{1 - e^{i(x+y)}}. \end{aligned} \quad (\text{XV. 10})$$

Здесь x, y — вещественные величины. Предельные (при $N \rightarrow \infty$) значения величин, фигурирующих в правых частях (XV. 9) и (XV. 10), таковы:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \operatorname{Re} \left(\frac{1 - e^{iNx}}{1 - e^{ix}} \right) = \frac{1}{2} \left\{ 1 + 2\pi \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x - 2\pi m) \right\}, \quad (\text{XV. 11})$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \operatorname{Im} \left(\frac{1 - e^{iNx}}{1 - e^{ix}} \right) = \frac{1}{2} \mathcal{P} \operatorname{ctg} \frac{x}{2}. \quad (\text{XV. 12})$$

Здесь суммирование по m охватывает все целые числа (и нуль); символ \mathcal{P} обозначает главное значение.

Пользуясь соотношениями (XV. 9)–(XV. 12), получим вместо (XV. 8)

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{ll', k, l''}(\omega_s, \omega_i) &= 2\pi \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta[\varepsilon_{ll''}(\mathbf{k}, \omega_s; T) + \varepsilon_{l'l'}(\mathbf{k}, -\omega_i; T) - 2\pi m] \times \\ &\times \left\{ \int_{-T/2}^{T/2} dt C_{ll'', k}^s(\omega_s, t) \int_{-T/2}^{T/2} dt' C_{l'l', k}^i(-\omega_i, t') - \right. \\ &- \frac{1}{2} \left[1 - 2\pi \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta[\varepsilon_{l'l'}(\mathbf{k}, -\omega_i; T) - 2\pi m] + i\mathcal{P} \operatorname{ctg} \frac{1}{2} \varepsilon_{l'l'}(\mathbf{k}, -\omega_i; T) \right] \times \\ &\times \left. \int_{-T/2}^{T/2} dt C_{ll'', k}^s(\omega_s, t) \int_{-T/2}^{T/2} dt' C_{l'l', k}^i(-\omega_i, t') \right\}. \end{aligned} \quad (\text{XV. 13})$$

При этом функцию $\varepsilon_{ll''}(\mathbf{k}, \omega; T)$ удобно представить в виде

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ll''}(\mathbf{k}, \omega; T) &= T [\tilde{\omega}_{ll''}(\mathbf{k}_{\perp}) + \omega], \\ \tilde{\omega}_{ll''}(\mathbf{k}_{\perp}) &= \frac{1}{T} \int_0^T d\theta \omega_{ll''}(\mathbf{k}_{\theta}). \end{aligned} \quad (\text{XV. 14})$$

Таким же образом преобразуется и выражение для $\tilde{A}_{ll', k}$ и, следовательно, вся сумма в правой части (XV. 3). Получающееся выражение для

$A_{l'l, k}$ следует подставить в формулу (VI.2.22) для сечения рассеяния $(d^2\sigma_e/d\Omega d\omega_s)_g$. Интеграл по ω'_s легко вычисляется, так как в подынтегральном выражении содержится множитель $\delta(\omega'_s - \omega_i + \bar{\omega}_{ll'}(\mathbf{k}_\perp) - m\nu)$; здесь введено обозначение $\nu = 2\pi/T$. При этом под знаком суммы по m, m' возникает выражение

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\sin [(m - m') \nu \tau / 2]}{(m - m') \nu \tau / 2} = \delta_{mm'}, \quad (\text{XV. 15})$$

и, следовательно, в формуле для сечения рассеяния остается лишь однократная сумма по m . Каждое слагаемое в ней содержит множитель $\delta(\omega'_s - \omega_i + \bar{\omega}_{ll'}(\mathbf{k}_\perp) - m\nu)$.

Заметим теперь, что экспериментально измеряется не сечение рассеяния на данной частоте ω_s , а его значение, усредненное по некоторому интервалу частот $\Delta\omega_s$. При этом мы вправе считать $\Delta\omega_s \gg \nu$. (Так, при $\mathcal{E} = 10^6$ В/см получаем $\nu \sim 10^{13}$ с $^{-1}$.) Пренебрегая величинами порядка $\nu/\Delta\omega_s$, мы получаем следующее соотношение:

$$\frac{1}{\Delta\omega_s} \int_{\omega_s}^{\omega_s + \Delta\omega_s} d\omega'_s \sum_{m=-\infty}^{\infty} \nu \delta(\omega'_s - \omega_i + \bar{\omega}_{ll'}(\mathbf{k}_\perp) - m\nu) = 1. \quad (\text{XV. 16})$$

Падающее излучение также не бывает строго монохроматическим — в действительности мы всегда имеем дело с группой волн конечной ширины $\Delta\omega_i$. Соответственно правую часть (VI.2.22) надо проинтегрировать по интервалу $\Delta\omega_i$. Полагая опять $\Delta\omega_i \gg \nu$ и пренебрегая членами порядка $\nu/\Delta\omega_i$, находим

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta\omega_i} \int_{\omega_i}^{\omega_i + \Delta\omega_i} d\omega'_i \left[1 - \sum_{m=0}^{\infty} \nu \delta(\bar{\omega}_{l'l'}(\mathbf{k}_\perp) - \omega'_i - m\nu) + \right. \\ \left. + i\mathcal{P} \operatorname{ctg} \frac{\pi}{\nu} (\bar{\omega}_{l'l'}(\mathbf{k}_\perp) - \omega'_i) \right] = 0. \quad (\text{XV. 17}) \end{aligned}$$

Пользуясь этим соотношением, получаем выражение (VI.2.26) для $\left(\frac{d^2\sigma_e}{d\Omega d\omega_s}\right)_g$.

1. Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. — 2-е изд., доп. и перераб. — М.: Наука, 1978.
2. Гуревич В. Л. — ФТП, 1968, т. 2, с. 1557.
3. Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. — М.: Наука, 1977.
4. Хилл Т. Статистическая механика: Пер. с англ./ Под ред. С. В. Тябликова. — М.: ИЛ, 1960, гл. 6.
5. Мотт Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах: Пер. с англ./Под ред. Б. Т. Коломийца. — М.: Мир, 1974.
6. Коломиец Б. Т. — В сб.: Труды VI Межд. конф. по аморфным и жидким полупроводникам/Под ред. Б. Т. Коломийца. — Л.: Наука, 1976, с. 23
7. Алексеев В. А., Андреев А. А., Прохоренко В. Я. — УФН, 1972, т. 106, с. 393.
8. Fritzsche H., Hudgens S. J. — В сб.: Труды VI Межд. конф. по аморфным и жидким полупроводникам/Под ред. Б. Т. Коломийца. — Л.: Наука, 1976, с. 6.
9. Stuke J. — В сб.: Труды VI Межд. конф. по аморфным и жидким полупроводникам/Под ред. Б. Т. Коломийца. — Л.: Наука, 1976, с. 193.
10. Spear W. E., Le Comber P. G. — In: Amorphous and Liquid Semiconductors/Ed. by W. E. Spear. — Dundee, 1977, p. 309.
11. Stuke J. — In: Amorphous and Liquid Semiconductors/Ed. by W. E. Spear. — Dundee, 1977, p. 406.
12. Kolomietz B. T., Ljubin V. M., Averbjanov V. L. — Mat. Res. Bull., 1970, v. 5, p. 655.
13. Бонч-Бруевич В. Л. — В сб.: Физика твердого тела/Под ред. С. В. Тябликова. — М.: Изд-во ВИНТИ, 1965, с. 129.
14. Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В. Метод функций Грина в статистической механике. — М.: Физматгиз, 1961.
15. Мигдал А. Б. Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер. — М.: Наука, 1965.
16. Лоренц Г. А. Статистические теории в термодинамике: Пер. с франц./Под ред. и с дополнениями Ю. А. Круткова. — Л. — М., ОНТИ, 1935.
17. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. — 3-е изд., доп. — М.: Наука, 1970, ч. I. — Теоретическая физика, т. V.
18. Пекар С. И. Исследования по электронной теории ионных кристаллов. — М.: Гостехиздат, 1952.
19. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. — 3-е изд. — М.: Наука, 1974. — Теоретическая физика, т. III.
20. Лифшиц И. М. — УФН, 1964, т. 83, с. 617.
21. Лифшиц И. М., Пастур Л. А., Гредескул С. А. — Физика низких температур, 1976, т. 2, с. 1093.
22. Лаврентьев М. А., Шабат Б. В. Методы теории функций комплексного переменного. — М.: Физматгиз, 1958.
23. Боголюбов Н. Н. — В сб.: Статистическая физика и квантовая теория поля/Под ред. Н. Н. Боголюбова. — М.: Наука, 1973, с. 7; Боголюбов Н. Н. Избранные труды в трех томах. — Киев: Наукова думка, 1971, т. 3, с. 174.

24. *Марадудин А. А.* Дефекты и колебательный спектр кристаллов: Пер. с англ. И. П. Ипатовой. — М.: Мир, 1968.
25. *Френкель Я. И.* Кинетическая теория жидкостей. — М. — Л.: Изд-во АН СССР, 1945.
26. *Левин А. А.* Введение в квантовую химию твердого тела. — М.: Химия, 1974.
27. *Боголюбов Н. Н.* О некоторых статистических методах в математической физике. — Киев: Изд-во АН УССР, 1945.
28. *Чандрасекар С.* Стохастические проблемы в физике и астрономии: Пер. с англ./Под ред. Н. Н. Боголюбова. — М.: ИЛ, 1947.
29. *Кривоглаз М. А.* — УФН, 1973, т. 111, с. 617.
30. *Хейне В., Козн М., Уэйр Д.* Теория псевдопотенциала: Пер. с англ./Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. — М.: Мир, 1973.
31. *Кривоглаз М. А.* Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. — М.: Наука, 1967.
32. *Рыжик И. М., Градштейн И. С.* Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. — М.: Изд. 5-е стереотип. Физматгиз, 1971.
33. *Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М.* Рассеяния, реакции и распады в квантовой механике. — 2-е изд., испр. и доп. — М.: Наука, 1971, Приложение 4.
34. *Ньютон Р.* Теория рассеяния волн и частиц: Пер. с англ./Под ред. А. М. Бродского и В. В. Толмачева. — М.: Мир, 1969.
35. *Бонч-Бруевич В. Л.* — В сб.: Статистическая физика и квантовая теория поля/Под ред. Н. Н. Боголюбова. — М.: Наука, 1973, с. 387.
36. *Фейнман Р., Хибс А.* Квантовая механика и интегралы по траекториям: Пер. с англ./Под ред. В. С. Барашенкова. — М.: Мир, 1968.
37. *Bonch-Bruевич V. L., Mironov A. G., Zviagin I. P.* — La Rivista del Nuovo Cim., 1973, v. 3, p. 321.
38. *Гельфанд И. М., Яглом А. М.* — УМН, 1956, т. 11, № 1, с. 77.
39. *Гредескул С. А., Пастур Л. А.* — Физика низких температур, 1975, т. 1, № 3, с. 277.
40. *Мотт Н. Ф.* Электроны в неупорядоченных средах: Пер. с англ./Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича — М.: Мир, 1969.
41. *Дайсон Ф.* Статистическая теория энергетических уровней сложных систем: Пер. с англ./Под ред. Я. А. Смородинского. — М.: ИЛ, 1963.
42. *Zvyagin I. P.* — Phys. Stat. Sol. (b), 1980, v. 101, p. 9.
43. *Боголюбов Н. Н.* Проблемы динамической теории в статистической физике. — М. — Л.: ОГИЗ. Гостехиздат, 1946; Избранные труды в трех томах. — Киев: Наукова думка, 1971, т. 2, с. 99.
44. *Зубарев Д. Н.* — УФН, 1960, т. 71, с. 71.
45. *Ахизер А. И., Пелетминский С. В.* Методы статистической физики. — М.: Наука, 1977.
46. *Перлин Ю. Е.* — УФН, 1963, т. 80, с. 553.
47. *Böitger H., Brykstin V. V.* — Phys. Stat. Sol. (b), 1976, v. 78, p.p. 9, 415.
48. Поляроны: Пер. с англ./Под ред. Ю. А. Фирсова. — М.: Наука, 1975.
49. *Зырянов П. С., Клинггер М. И.* Квантовая теория явлений электронного переноса в кристаллических полупроводниках. — М.: Наука, 1976.
50. *Кривоглаз М. А.* — В сб.: Физика твердого тела/Под ред. С. В. Тябликова. — М.: Изд-во ВИНТИ, 1965, с. 5.
51. *Шкловский Б. И., Эфрос А. Л.* Электронные свойства легированных полупроводников. — М.: Наука, 1979.
52. *Shante V. K. S., Kirkpatrick S.* — Adv. Phys., 1971, v. 20, p. 325.
53. *Киркпатрик С.* — В сб.: Теория и свойства неупорядоченных материалов: Пер. с англ./Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. — М.: Мир, 1977, с. 249.
54. *Коренблит И. Я., Шендер Е. Ф.* — УФН, 1978, т. 126, с. 293.

55. Патанинский А. З., Покровский В. Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. — М.: Наука, 1975.
56. Вильсон К., Когут Дж. Ренормализационная группа и ϵ -разложение: Пер. с англ./Под ред. В. К. Федянина. — М.: Мир, 1975.
57. Джонсон Е. — В сб.: Оптические свойства полупроводников. (Полупроводниковые соединения $A^{III}B^V$)/Под ред. Р. Уиллардсона и А. Бира: Пер. с англ./Под ред. Е. Ф. Гросса. — М.: Мир, 1970, с. 481.
58. Тябликов С. В., Бонч-Бруевич В. Л. Теория возмущений для двухвременных температурных функций Грина. — М., 1962, *Adv. in Phys.*, 1962, v. 11, p. 317.
59. Эдвардс С. Ф. — В сб.: Вопросы квантовой теории необратимых процессов: Пер. с англ./Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. — М.: ИЛ, 1961, с. 240.
60. Рассеяние света в твердых телах./Под ред. М. Кардоны. Пер. с англ./Под ред. Б. П. Захарчени. — М.: Мир, 1979.
61. Хачатурян А. Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. — М.: Наука, 1974.
62. Фок В. А. Работы по квантовой теории поля. — Л., 1957.
63. Швингер Ю. — В сб.: Новейшее развитие квантовой электродинамики. — М.: ИЛ, 1954, с. 254.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	6
Глава I. Введение	9
§ 1. Определение неупорядоченной системы. Примеры	9
§ 2. Случайная сетка атомов	15
§ 3. Сводка некоторых экспериментальных данных	17
§ 4. Общие особенности неупорядоченных систем	24
§ 5. Плотность состояний (предварительные соображения)	28
§ 6*. Плотность состояний (строгое рассмотрение)	34
§ 7*. Самоусредняющиеся величины	41
Глава II. Энергетический спектр неупорядоченного полупроводника	44
§ 1. Спектр электронов (качественные соображения)	44
§ 2*. «Подводные камни»	53
§ 3. Андерсоновская локализация	57
§ 4. Спектр фононов (качественные соображения)	61
§ 5. Химические связи в неупорядоченных полупроводниках и модели плотности состояний	65
§ 6*. Неупорядоченный полупроводник без случайного поля	70
§ 7. Статистические характеристики случайного поля	73
§ 8. Собственное случайное поле в неупорядоченных полупроводниках	87
§ 9*. Теорема существования дискретных флуктуационных уровней в запрещенной зоне неупорядоченного полупроводника	98
§ 10*. Оценка концентрации флуктуационных уровней	109
§ 11. Радиус локализации. Степенная локализация	113
§ 12. Плавное искривление зон	116
§ 13*. Квазиоднородные системы	120
§ 14. Корреляционные эффекты	123
§ 15. Экситон в неупорядоченном полупроводнике	124
§ 16*. Кулоновская щель	129
§ 17*. Экранирование локализованными носителями заряда при наличии мягкой щели	136
§ 18*. Низкотемпературная термодинамика носителей заряда при наличии мягкой щели	140
§ 19. Термодинамика локализованных носителей заряда при наличии двухэлектронных уровней	145
Глава III. Плотность состояний и двухуровневая функция корреляции	152
§ 1. Введение	152
§ 2. Метод оптимальной флуктуации	154
§ 3. Функция корреляции уровней	160
§ 4*. Функция корреляции уровней электрона в гауссовом случайном поле	163
§ 5*. Представление функции Грина в виде континуального интеграла	169

§ 6*	Качественное исследование усредненной одночастичной функции Грина	173
§ 7*	Вычисление континуального интеграла для $G_r(t)$. Плотность состояний	180
Глава IV. Явления переноса		190
§ 1.	Основные механизмы переноса	190
§ 2.	Гамильтониан в λ -представлении	195
§ 3.	Кинетическое уравнение	200
§ 4.	Отклик системы на внешнее электрическое поле и градиент температуры	206
§ 5*	Плотность тока в λ -представлении	213
§ 6*	Метод функций Грина в теории прыжковой проводимости	220
§ 7*	Многэфононные перескоки	223
§ 8.	Общее обсуждение методов решения кинетического уравнения для локализованных электронов	228
§ 9*	Критерий связей	234
§ 10.	Температурная зависимость прыжковой проводимости	240
§ 11.	Бесфононная проводимость	245
§ 12.	Температурная зависимость прыжковой термоэдс	249
§ 13*	Кинетическое уравнение при учете электрон-электронного взаимодействия	256
§ 14*	Учет динамической корреляции между электронами при расчете проводимости и термоэдс	267
§ 15.	Проводимость неоднородных полупроводников с крупномасштабными флуктуациями потенциала	272
§ 16*	Критическое поведение в задачах протекания	278
Глава V. Междузонные оптические переходы в неупорядоченных полупроводниках		282
§ 1.	Общие соотношения. Роль случайного поля	282
§ 2.	Поглощение света в гладком гауссовом случайном поле	289
§ 3.	Электропоглощение в гладком поле	297
§ 4.	Поглощение в примесном случайном поле	305
§ 5*	Экситонное поглощение света в слабом случайном поле	310
§ 6*	Влияние экситонных эффектов на хвост коэффициента поглощения	314
Глава VI. Резонансное комбинационное рассеяние света в неупорядоченных полупроводниках		319
§ 1.	Введение. Общее выражение для сечения рассеяния и конфигурационное усреднение	319
§ 2*	Влияние гладкого случайного поля на комбинационное рассеяние света при $l_c \ll \xi_0$	323
§ 3*	Влияние гладкого поля на комбинационное рассеяние в случае $l_c \gg \xi_0$	336
Приложения		344
I*	Теоремы о корреляции	344
II*	Поле упругих деформаций	350
III*	Характеристический функционал гауссова случайного поля	354
IV*	Непосредственный расчет бинарной корреляционной функции пуассоновского случайного поля	354
V*	Характеристический функционал лоренцева случайного поля	355
VI*	Вычисление интеграла, фигурирующего в формуле (II.9.31)	356
VII*	Функции Грина в задаче с гамильтонианом (II.16.1') при $T = 0$	356

VIII*	Диагонализация формы $\delta^2 Q_n$	358
IX*	Вычисление величин $\Pi_{\perp}(\kappa)$ и $\Pi_{\parallel}(\kappa)$	361
X*	Поведение решения кинетического уравнения в области малых частот	364
XI.	Некоторые результаты стандартной теории протекания	366
XII*	Квазиклассический расчет функции Грина для электрона в гладком гауссовом случайном поле	369
XIII*	Вычисление интеграла по ω' в формуле для $\varepsilon_2(\omega)$ (V. 2.1)	374
XIV*	Квазиклассический расчет функции Грина для электрона в призмесном случайном поле	375
XV*	Преобразование выражения (VI. 2.23)	378
Литература		381

Виктор Леопольдович Бонч-Бруевич

Игорь Петрович Звягин

Роберт Кайпер

Александр Григорьевич Миронов

Рольф Эндерлайн

Бернд Эссер

ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕОРИЯ

НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ