

УДК 537.311.1:539.293:539.219.1

Б. ЭССЕР

### К ТЕОРИИ ЭЛЕКТРОНОВ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ

В настоящей работе рассматриваются две задачи теории сильно легированных полупроводников.

#### § 1. Исключение совпадений при усреднении по конфигурациям примеси и поправка к плотности состояний

Рассмотрим систему электронов с эффективной массой  $m$ , находящихся в случайном поле примесных центров. Гамильтониан такой системы имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N_e} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}_i} + \sum_{i=1}^{N_e} U(\vec{r}_i), \quad (1)$$

$$U(\vec{r}_i) = \sum_{j=1}^N V(\vec{r}_i - \vec{R}_j), \quad (2)$$

здесь  $N_e$  — число электронов в системе,  $V(\vec{r}_i - \vec{R}_j)$  — потенциальная энергия электрона в точке  $\vec{r}_i$  в поле примесного центра, расположенного в точке  $\vec{R}_j$ , и  $N$  — число примесных центров. Межэлектронное взаимодействие при этом учтено частично в виде экранированного потенциала примесного центра и, может быть, в перенормировке эффективной массы электрона. Перейдем к представлению вторичного квантования. Тогда гамильтониан нашей системы принимает вид

$$\hat{H} = \int d\vec{x} \hat{a}^+(\vec{x}, t) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{x}} + U(\vec{x}) \right] \hat{a}(\vec{x}, t), \quad (3)$$

здесь  $\hat{a}^+(\vec{x}, t)$  и  $\hat{a}(\vec{x}, t)$  — операторы рождения и уничтожения электрона в точке  $\vec{x}$  в момент  $t$ .

Введем запаздывающую функцию Грина  $G(\vec{x}, \vec{y}; t - t')$  [1]:

$$G(\vec{x}, \vec{y}; t - t') = i\theta(t - t') \langle [\hat{a}(\vec{x}, t), \hat{a}^+(\vec{y}, t')] \rangle, \quad (4)$$

где  $\theta(\tau)$  — ступенчатая функция  $\theta(\tau > 0) = 1$ ,  $\theta(\tau < 0) = 0$ ;

$$[\hat{a}(\bar{x}, t), \hat{a}^+(\bar{y}, t')] = \hat{a}(\bar{x}, t) \hat{a}^+(\bar{y}, t') + \hat{a}^+(\bar{y}, t') \hat{a}(\bar{x}, t) -$$

антикоммутатор, а символ  $\langle \rangle$  может означать статистическое или чисто квантовомеханическое усреднение.

Перейдем к новым переменным  $\bar{R} = \frac{1}{2}(\bar{x} + \bar{y})$ ,  $\bar{r} = \bar{x} - \bar{y}$ . Тогда решение уравнений для функции Грина можно получить квазиклассическим методом [1]. Для вычисления плотности состояний ограничимся нулевым приближением. При этом для функции Грина получим следующее выражение:

$$G(\bar{r}, \bar{R}; E) = \frac{i}{(2\pi)^4} \int d\bar{k} \int_0^\infty ds e^{-\Sigma s + is \left[ E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] - isU(\bar{R}) + i\bar{k}\bar{r}}, \quad (5)$$

здесь выполнено преобразование Фурье по времени.

Функция  $G(\bar{r}, \bar{R}; E)$  зависит от координат примесных центров как от параметров. Если произвести усреднение по примесным центрам независимо друг от друга, т. е. не учитывая корреляции в расположении примеси, то для усредненной функции Грина  $\tilde{G}(\bar{r}, E)$  получим

$$\tilde{G}(\bar{r}, E) = \frac{i}{(2\pi)^4} \int d\bar{k} \int_0^\infty ds e^{-\Sigma s + is \left[ E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right]} \overbrace{(e^{-isU(\bar{R})})} e^{i\bar{k}\bar{r}}, \quad (6)$$

где

$$\overbrace{(e^{-isU(\bar{R})})} = \frac{1}{\Omega^N} \int d\bar{R}_1 \dots \int d\bar{R}_N \prod_{j=1}^N e^{-isV(\bar{R} - \bar{R}_j)}, \quad (7)$$

$\Omega$  — объем кристалла. Расчет [1] дает:

$$\overbrace{(e^{-isU(\bar{R})})} = e^{\alpha(s)}, \quad \alpha(s) = n \int d\bar{R} [e^{-isV(\bar{R})} - 1], \quad (8)$$

здесь  $n = \frac{N}{\Omega}$  — концентрация примеси.

Чтобы решить задачу об исключении совпадений, удобно перейти от интегрирования по объему кристалла к суммированию по узлам решетки. Тогда вместо (7) запишем

$$\overbrace{(e^{-isU(\bar{R})})} = \frac{1}{N_0^N} \sum_{\bar{R}_1} \dots \sum_{\bar{R}_N} \prod_{j=1}^N e^{-isV(\bar{R} - \bar{R}_j)}, \quad (9)$$

здесь  $N_0$  — число узлов решетки,  $\sum_{\bar{R}}$  — обозначает суммирование по всем узлам решетки.

Введем обозначение

$$A \equiv \overbrace{(e^{-isU(\bar{R})})} \quad (10)$$

Тогда из (9) находим

$$A = \left[ \frac{1}{N_0} \sum_{\bar{R}'} e^{-isV(\bar{R}-\bar{R}')} \right]^N. \quad (11)$$

Введем функцию распределения, исключающую совпадения:

$$P(\bar{R}_1, \dots, \bar{R}_N) = \frac{1}{C} \prod_{1 \leq i < j \leq N} [1 - \Delta(\bar{R}_i - \bar{R}_j)]. \quad (12)$$

Здесь  $C$  есть нормировочный коэффициент, который определяется из условия  $\sum_{\bar{R}_1} \dots \sum_{\bar{R}_N} P(\bar{R}_1 \dots \bar{R}_N) = 1$ , а  $\Delta(\bar{R})$  есть дискретная  $\delta$ -функция.

Функция Грина, усредненная с исключением совпадений, тогда определяется выражением

$$B = \sum_{\bar{R}_1} \dots \sum_{\bar{R}_N} P(\bar{R}_1, \dots, \bar{R}_N) \prod_{j=1}^N e^{-isV(\bar{R}-\bar{R}_j)}, \quad (13)$$

где  $P(\bar{R}_1, \dots, \bar{R}_N)$  дается формулой (12).

Однако непосредственное вычисление сумм в (13) затруднительно. Поэтому оказывается целесообразно переформулировать задачу. Обобщим формулу (12) следующим образом:

$$P(\bar{R}_1, \dots, \bar{R}_N, \xi_1, \dots, \xi_{N-1}) = \frac{1}{C} \prod_{1 \leq i < j \leq N} [1 - \xi_i \Delta(\bar{R}_i - \bar{R}_j)]. \quad (14)$$

Здесь  $C = C(\xi_1, \dots, \xi_{N-1})$ , а параметры  $\xi_i$  положим потом равными нулю или единице. При этом вместо (13) имеем

$$B = \sum_{\bar{R}_1} \dots \sum_{\bar{R}_N} P(\bar{R}_1, \dots, \bar{R}_N, \xi_1 = 1, \dots, \xi_{N-1} = 1) \prod_{j=1}^N e^{-isV(\bar{R}-\bar{R}_j)}.$$

Введем обозначение

$$F(\xi_1, \dots, \xi_{N-1}) = \sum_{\bar{R}_1} \dots \sum_{\bar{R}_N} P(\bar{R}_1, \dots, \bar{R}_N, \xi_1, \dots, \xi_{N-1}) \prod_{j=1}^N e^{-isV(\bar{R}-\bar{R}_j)}. \quad (15)$$

Тогда  $B = F(\xi_1 = 1, \dots, \xi_{N-1} = 1)$  и  $A = F(\xi_1 = 0, \dots, \xi_{N-1} = 0)$ , а выражение  $F(\xi_1 = 0, \dots, \xi_k = 0, \xi_{k+1} = 1, \dots, \xi_{N-1} = 1)$  определяет усреднение, при котором совпадение радиусов векторов  $\bar{R}_{k+1}, \dots, \bar{R}_N$  между собой исключено. Очевидно, что

$$B = \prod_{k=1}^{N-1} a_k A, \quad a_k = \frac{F(\xi_1 = 0, \dots, \xi_{k-1} = 0, \xi_k = 1, \dots, \xi_{N-1} = 1)}{F(\xi_1 = 0, \dots, \xi_k = 0, \xi_{k+1} = 1, \dots, \xi_{N-1} = 1)}. \quad (16)$$

Введем обозначение

$$b_k = \frac{\sum_{\bar{R}_1} \dots \sum_{\bar{R}_N} \prod_{k \leq i < j \leq N} [1 - \Delta(\bar{R}_i - \bar{R}_j)] e^{-is \sum_{i=1}^N V(\bar{R} - \bar{R}_i)}}{\sum_{\bar{R}_1} \dots \sum_{\bar{R}_N} \prod_{k+1 \leq i < j \leq N} [1 - \Delta(\bar{R}_i - \bar{R}_j)] e^{-is \sum_{i=1}^N V(\bar{R} - \bar{R}_i)}}. \quad (17)$$

Тогда из (16), (15) и (14) следует:  $a_k = \frac{b_k}{b_k(V \equiv 0)}$ , где  $b_k(V \equiv 0)$  есть значение  $b_k$ , в котором все потенциалы  $V(\bar{R} - \bar{R}_i) \equiv 0$ . Сократим числитель и знаменатель (17) на общий множитель  $\sum_{\bar{R}_1} \dots \sum_{\bar{R}_{k-1}} e^{-is \sum_{i=1}^{k-1} V(\bar{R} - \bar{R}_i)}$ .

Раскрывая в числителе (17) произведение  $\prod_{j=k+1}^N [1 - \Delta(\bar{R}_k - \bar{R}_j)]$ , имеем после сдвига индексов  $i$  и  $j$  на  $-k$ :

$$b_k = 1 - \frac{N-k}{\sum_{\bar{R}'} e^{-isV(\bar{R}-\bar{R}')}} \sum_{\bar{R}_1} e^{-2isV(\bar{R}-\bar{R}_1)} \frac{s_k(\bar{R}, \bar{R}_1)}{\sum_{\bar{R}'_1} e^{-isV(\bar{R}-\bar{R}'_1)} s_k(\bar{R}, \bar{R}'_1)}, \quad (18)$$

где

$$s_k(\bar{R}, \bar{R}_1) = \sum_{\bar{R}_2} \dots \sum_{\bar{R}_{N-k}} \prod_{1 \leq i < j \leq N-k} [1 - \Delta(\bar{R}_i - \bar{R}_j)] e^{-is \sum_{i=2}^{N-k} V(\bar{R} - \bar{R}_i)}. \quad (19)$$

Очевидно,  $s_k(\bar{R}, \bar{R}_1)$  есть сумма по всем конфигурациям от экспоненты, где исключено не только совпадение между векторами  $\bar{R}_2, \dots, \bar{R}_{N-k}$ , но и их совпадение с одним добавочным вектором  $\bar{R}_1$ , положение которого в пространстве фиксировано. Если в (19) положить все потенциалы  $V(\bar{R} - \bar{R}_i) = 0$ , то  $s_k(\bar{R}, \bar{R}_1)$  не будет зависеть от положения  $\bar{R}_1$ , так как безразлично, какой именно узел решетки при суммировании выбрасывается.

Поэтому запишем

$$\frac{s_k(\bar{R}, \bar{R}'_1)}{s_k(\bar{R}, \bar{R}_1)} \Big|_{V=0} = 1. \quad (20)$$

Пусть потенциалы отличны от нуля. Для оценки область действия примесного потенциала можно аппроксимировать сферой с радиусом порядка радиуса экранирования. Тогда равенство (20) остается справедливым, когда  $\bar{R}_1$  и  $\bar{R}'_1$  лежат вне такой сферы, проведенной вокруг точки  $\bar{R}$ . Когда указанное условие не выполняется, т. е. либо  $\bar{R}_1$ , либо

$\bar{R}'_1$  или оба эти вектора лежат в данной сфере, можно оценить разность  $\frac{s_k(\bar{R}, \bar{R}'_1)}{s_k(\bar{R}, \bar{R}_1)} - 1$  так:

$$\frac{s_k(\bar{R}, \bar{R}'_1)}{s_k(\bar{R}, \bar{R}_1)} - 1 \leq \frac{N}{N_0}. \quad (21)$$

Используя (20) и (21) и разбивая в (18) суммирование по  $\bar{R}'_1$  и  $\bar{R}'_1$  по областям, находящимся внутри и вне сферы, радиусом порядка радиуса экранирования, проведенным вокруг точки  $\bar{R}$ , получим

$$a_k = 1 - \frac{N-k}{N_0} \frac{1}{N_0} \sum_{\bar{R}'} [e^{-isV(\bar{R}-\bar{R}')} - 1]^2 \left[ 1 + o\left(\frac{N}{N_0}\right) \right]. \quad (22)$$

Вычисляя произведение в (16) и разлагая  $\ln a_k$  в ряд по малому параметру  $\frac{N}{N_0} \frac{N_3}{N_0}$ , где  $N_3$  — число узлов решетки в сфере с радиусом порядка радиуса экранирования, получаем

$$\ln \prod_{k=1}^{N-1} a_k = -\frac{1}{2} \frac{N^3}{N_0^2} \sum_{\bar{R}'} [e^{-isV(\bar{R}-\bar{R}')} - 1]^2 \left[ 1 + o\left(\frac{N}{N_0}\right) \right].$$

Переходим от суммы по узлам решетки к интегрированию по кристаллу:

$$\ln \prod_{k=1}^{N-1} a_k = -\frac{1}{2} \frac{N}{N_0} \beta(s), \quad (23)$$

где  $\beta(s) = n \int d\bar{R} [e^{-isV(\bar{R})} - 1]^2$ , а  $n$  — концентрация примеси,  $n = \frac{N}{\Omega}$  (мы опустили члены, малые по параметру  $\frac{N}{N_0}$ ). Очевидно,  $\frac{N}{N_0} = \frac{1}{\gamma} n\vartheta_0 \ll 1$ , где  $\gamma$  число узлов решетки в элементарной ячейке, а  $\vartheta_0$  — объем элементарной ячейки ( $\gamma \sim 1$ ,  $n\vartheta_0 \ll 1$ ). Усредненная с исключением совпадений функция Грина в силу этого будет иметь вид

$$\tilde{G}(\bar{k}, E) = \frac{i}{(2\pi)^4} \int_0^\infty ds e^{-\Sigma s + is \left[ E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right]} - \frac{n\vartheta_0}{2\gamma} \beta(s) + \alpha(s), \quad (24)$$

здесь  $\beta(s)$  и  $\alpha(s)$  определяются выражениями (23) и (8).

В гауссовой области ([1], § 9) из (24) получим следующее выражение для плотности состояний:

$$\rho(E) = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \frac{1}{\sqrt{4\pi a^2 \left( 1 - \frac{n\vartheta_0}{2\gamma} \right)}} \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} e^{-\frac{(E-\varepsilon)^2}{4a^2 \left( 1 - \frac{n\vartheta_0}{2\gamma} \right)}} d\varepsilon, \quad (25)$$

где  $a^2 = \frac{1}{2} n \int d\bar{R} V^2(\bar{R})$ ,  $n = \frac{N}{\Omega}$  — примесная концентрация,  $V(\bar{R})$  — потен-

циал одного примесного центра. Из (6) мы бы получили плотность состояний в виде (25), где вместо  $a^2 \left[ 1 - \frac{n\phi_0}{2\gamma} \right]$  было бы просто  $a^2$ . Так как  $\frac{n\phi_0}{\gamma} \ll 1$ , эти плотности состояний отличаются лишь незначительно. Это не удивительно, потому что функция (24) отличается от функции, усредненной без исключения совпадений (6), лишь малой поправкой в экспоненте: вместо  $\alpha(s)$  в (6)  $\alpha(s) - \frac{n\phi_0}{2\gamma} \beta(s)$ .

Поэтому и плотность состояний, вычисленная с помощью (24), должна мало отличаться от найденной с помощью (6). Таким образом, плотность состояний, вычисленная на основе (6) в работе [1], меняется лишь незначительно.

## § 2. Уровень Ферми в сильно легированном частично компенсированном полупроводнике

В сильно легированном полупроводнике границы зоны проводимости и валентной зоны размываются и у каждой из них образуется хвост плотности состояний, убывающий в глубь запрещенной зоны. Будем рассматривать сильно легированный полупроводник с избыточной концентрацией донорной примеси при температурах, малых по сравнению с эффективной шириной запрещенной зоны. Тогда состояния на хвосте валентной зоны заполнены электронами, и концентрация электронов в зоне проводимости  $n$  будет  $n = n_D - n_A$ , где  $n_D$  и  $n_A$  — концентрации донорной и акцепторной примесей.

Таким образом:

$$n = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho_c(E)}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1} dE, \quad (25')$$

где  $\rho_c(E)$  — плотность состояний зоны проводимости сильно легированного полупроводника,  $\mu$  — уровень Ферми.

Будем искать решения  $\mu = \mu(T)$  уравнения (1) для случая  $\mu < 0$ , соответствующего невырожденному электронному газу. Плотность состояний в зоне проводимости будем аппроксимировать формулой

$$\rho_c(E) = \frac{(2m_c)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} \frac{1}{\sqrt{4a^2\pi}} \int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} e^{-\frac{(E-\varepsilon)^2}{4a^2}} d\varepsilon, \quad (26)$$

которая при  $E < 0$  правильно описывает плотность состояний в гауссовой области [1], а при  $E > 0$ ,  $E > a$  переходит в плотность состояний идеального электронного газа с эффективной массой  $m_c$ .

Здесь

$$a^2 = \frac{1}{2} n_A \int d\bar{R} V_A^2(\bar{R}) + \frac{1}{2} n_D \int d\bar{R} V_D^2(\bar{R}),$$

а  $V_A(\bar{R})$  и  $V_D(\bar{R})$  — потенциальные энергии электрона в поле акцепторного и донорного центров соответственно.

Чтобы решить уравнение (25') относительно  $\mu$ , рассмотрим два случая: а)  $|\mu| > kT$ ;  $kT \gg a$  — «слабое» случайное поле и б)  $|\mu| \gg a$ ;  $a \gg \pi kT$  — «сильное» случайное поле.

В случае а) после подстановки (26) в (25'), можно перейти в (25'), к распределению Больцмана. Интегралы тогда легко вычисляются, и мы получим<sup>1</sup>

$$n = n_c e^{\frac{\mu}{kT} + \frac{a^2}{(kT)^2}}, \quad n_c = \frac{(2\pi kT m_c)^{3/2}}{4\pi^3 \hbar^3}. \quad (27)$$

Для  $\mu$  поэтому имеем

$$\mu = kT \ln \left( \frac{n}{n_c} \right) - \frac{a^2}{kT}. \quad (28)$$

При  $a \rightarrow 0$  получим обычное выражение для  $\mu(T)$ ,  $\mu^{(0)}(T)$ .

В силу неравенств а) имеем  $\frac{|\mu| - |\mu^{(0)}|}{|\mu^{(0)}|} \ll 1$ , т. е. отличие  $\mu(T)$  от  $\mu^{(0)}(T)$  заключается лишь в появлении отрицательной малой добавки  $-\frac{a^2}{kT}$ . За счет появления новых разрешенных состояний на «хвосте»

вероятность заполнения данного уровня в зоне проводимости  $w(\epsilon) \sim e^{\frac{\mu - \epsilon}{kT}}$  немного уменьшается, что и проявляется в виде отрицательной добавки к  $\mu$ . Таким образом в условиях а) зависимость  $\mu = \mu(T)$  лишь немного отличается от случая  $a \rightarrow 0$ , который отвечает идеальному электронному газу плотности  $n = n_D - n_A$ . Пусть справедливы неравенства б). Подставляя, как и в случае а), (26) в (25') и пользуясь Фурье представлением функции Ферми, получим

$$n = \frac{(2m_c)^{3/2}}{4\pi^{3/2} \hbar^3} kT \operatorname{Re} \left\{ e^{-i \frac{5\pi}{4}} p.f. \int_0^{\infty} ds \frac{e^{is\mu - a^2 s^2}}{s^{3/2} \operatorname{sh} \pi s kT} \right\}. \quad (29)$$

Здесь символ *p.f.* означает, что надо взять конечную часть интеграла. Неравенства б) позволяют заменить  $\operatorname{sh} \pi s kT$  на  $\pi s kT$  под знаком интеграла, в результате чего мы получим

$$n = \frac{(2m_c)^{3/2}}{4\pi^{3/2} \hbar^3} \operatorname{Re} \left\{ e^{-i \frac{5\pi}{4}} p.f. \int_0^{\infty} \frac{ds}{s^{3/2}} e^{is\mu - a^2 s^2} \right\}. \quad (30)$$

Интеграл выражается через функции параболического цилиндра. Используя неравенство  $|\mu| \gg a$ , находим в первом порядке по параметру  $\frac{a}{|\mu|}$

$$n = \frac{4m_c^{3/2} a^4}{\pi^2 \hbar^3 |\mu|^{5/2}} e^{-\frac{\mu^2}{4a^2}}. \quad (31)$$

При этом  $e^{-\frac{\mu^2}{4a^2}} \ll 1$ , так что  $n \ll \frac{4m_c^{3/2} a^4}{\pi^2 \hbar^3 |\mu|^{5/2}}$  и, следовательно,

$$\mu \cong 2a \ln^{1/2} \left[ \frac{(2m_c a)^{3/2}}{(2\pi)^2 \hbar^3 n} \right]. \quad (32)$$

<sup>1</sup> Этот результат был ранее получен в работе [2].

Сравним теперь формулы (8) и (4). Видим, что выражение для  $\mu(T)$  в случае б) заметно отличается от обычного. Явной зависимости от температуры в (8) вообще нет, а  $\mu$  зависит от температуры лишь через радиус экранирования, который входит в  $a$ . Таким образом, в случае «сильного» случайного поля зависимость  $\mu = \mu(T)$  может существенно меняться по сравнению с результатом обычной теории.

Автор благодарит В. Л. Бонч-Бруевича за предложенную тему и постоянное руководство работой.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Бонч-Бруевич В. Л. Вопросы электронной теории сильно легированных полупроводников. В кн.: «Итоги науки. Физика твердого тела», под ред. С. В. Тябликова. М., изд. ВИНТИ, 1965.
2. Dyakonov M. T., Efros A. L., Mitchell D. L. Phys. Rev., **180**, 813, 1969.

Поступила в редакцию  
6.4 1970 г.

Кафедра  
полупроводников