

УДК 539.293.536.21

В. Л. Бонч-Бруевич

ЭКРАНИРОВАНИЕ И ПОГЛОЩЕНИЕ ДЛИННЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В НЕУПОРЯДОЧЕННОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ С МЯГКОЙ ЩЕЛЮ

Изучена специфика экранирования электростатического поля в полупроводнике со всюду плотным спектром дискретных уровней в условиях, когда плотность состояний на уровне Ферми обращается в нуль. Для той же системы вычислена температурная и частотная зависимость коэффициента поглощения электромагнитных волн.

В предыдущей работе [1] было показано, что при довольно общих условиях в неупорядоченном полупроводнике со случайным полем появляется «мягкая кулоновская щель»: плотность состояний, $\rho(E)$ (усредненная по всем конфигурациям случайного поля), обращается в нуль при $E=F$ — уровню Ферми при $T=0$ (уровень Ферми предполагается расположенным в пределах запрещенной зоны, понимаемой как щель для подвижности). При этом вблизи уровня Ферми

$$\bar{\rho}(E) = \frac{1}{2} \bar{\rho}''(F) (E - F)^2. \quad (1)$$

Очевидно, возникновение такой щели должно радикально менять ряд низкотемпературных характеристик материала¹. В настоящей статье рассматриваются три эффекта — экранирование электронами и дырками, бесфононное поглощение длинных электромагнитных волн, связанное с переходами электронов между дискретными уровнями в запрещенной зоне, и спиновая магнитная восприимчивость.

§ 1. Экранирование

Будем исходить из обычного, самосогласованного уравнения для электрического потенциала Φ :

$$\nabla^2 \Phi = - \frac{4\pi}{\epsilon} q[\Phi],$$

где $q[\Phi]$ — объемная плотность заряда, ϵ — диэлектрическая проницаемость вещества. Потенциал Φ считается равным нулю в отсутствие электрического поля. Ставя здесь перед собой в основном методические цели, пренебрежем «технологической» корреляцией в пространственном распределении заряженных центров (в условиях, когда она существенна, рассматриваемая ниже задача естественно отпадает).

¹ Это обстоятельство отмечалось в работах [2—6]. Термин «низкие» температуры здесь и в дальнейшем означает, что тепловое возбуждение не выводит нас за пределы применимости формулы (1).

Будем считать, что температура T достаточно мала:

$$T \ll E_c - F, \quad F - E_v, \quad \text{и, далее} \quad e|\varphi| \ll E_c - F, \quad F - E_v.$$

Тогда можно пренебречь наличием свободных электронов и дырок, и условие «локальной нейтральности в среднем» принимает вид

$$\int_0^\infty \rho_a(W) f_n(W) dW = \int_0^\infty \rho_d(W) f_p(W) dW. \quad (2)$$

Мы совместили здесь (и в дальнейшем) начало отсчета энергии с толчком валентной зоны ($E_v=0$) и распространили пределы интегрирования до бесконечности. Через ρ_a и ρ_d обозначены плотности «акцепторных» и «донорных» состояний (усредненные по случайному полю), $f_n(W)$ есть функция Ферми, $f_p=1-f_n$. Вводя полную плотность состояний, $\rho=\rho_a+\rho_d$, можем переписать равенство (2) в виде

$$\int_0^\infty \rho(W) f_n(W) dW = \int_0^\infty \rho_d(W) dW. \quad (2')$$

В рассматриваемых условиях

$$q = e \left\{ \int_0^\infty \rho_d(W) f_p(W - e\varphi) dW - \int_0^\infty \rho_a(W) f_n(W - e\varphi) dW \right\} \quad (3)$$

Вводя опять полную плотность состояний и пользуясь (2'), приведем равенство (3) к стандартному виду

$$q = e(n_0 - n[\varphi]), \quad (4)$$

где

$$n_0 = \int_0^\infty \rho(W) f_n(W) dW, \quad n[\varphi] = \int_0^\infty \rho(W) f_n(W - e\varphi) dW. \quad (5)$$

При $T=0$ мы имеем

$$\begin{aligned} n - n_0 &= \int_F^{F+e\varphi} \rho(W) dW \simeq \\ &\simeq e\varphi \rho(F) + \frac{1}{2} (e\varphi)^2 \rho'(F) + \frac{1}{6} (e\varphi)^3 \rho''(F) + \dots \end{aligned} \quad (6')$$

В интересующих нас условиях $\rho(F)=\rho'(F)=0$ и экранирование при $T=0$ оказывается существенно нелинейным. Фактически, однако, всякий опыт производится при конечной температуре. Соответствующая поправка к правой части (6) легко вычисляется и составляет (с точностью до экспоненциально малых членов) $\pi^2/6 \rho''(F) T^2 e\varphi$.

Введем обозначения

$$r_0^{-2} = \frac{2\pi^3 e^2 T^2 \rho''(F)}{3\varepsilon}, \quad a = \frac{2\pi e^4 \rho''(F)}{3\varepsilon}. \quad (7)$$

Тогда уравнение для потенциала принимает вид

$$\nabla^2 \varphi = r_0^{-2} \varphi + a\varphi^3. \quad (8)$$

Согласно (7) первое слагаемое в левой части (8) доминирует при

$$\left(\frac{e\varphi}{\pi T} \right)^2 \ll 1. \quad (9)$$

При этом потенциал φ дается обычным дебаевским выражением, причем роль дебаевского радиуса играет величина r_0 ¹. Подставляя это выражение в (9) и полагая $x=r/r_0$, получаем

$$[2\pi e^6 e^{-3} \bar{\rho}''(F)]^{1/2} x^{-1} e^{-x} \ll 1. \quad (9')$$

Параметр $\lambda = e^6 e^{-3} \bar{\rho}''(F)$ в типичных случаях невелик. Так, даже при $\bar{\rho}''(F) = 10^{22} \text{ см}^{-3} (\text{эВ})^{-3}$ и $\varepsilon = 10$ мы получаем $\lambda = 0,1$. Таким образом, неравенство (9') удовлетворяется уже при $r \simeq r_0$.

При меньших расстояниях, когда удовлетворяется неравенство, обратное (9), доминирует второе слагаемое в правой части (8). Введем какие-нибудь единицы измерения потенциала и длины φ и r , полагая

$$a(r\varphi)^2 = 1. \quad (10)$$

Сохраняя для безразмерных единиц прежние обозначения, получаем

$$\nabla^2 \varphi = \varphi^3 \quad (11)$$

или, для радиально симметричных решений вида $\varphi = u(r)r^{-1}$,

$$u'' = u^3 r^{-2}. \quad (11')$$

Поскольку точка $r=0$ есть особая точка уравнения (11'), мы не вправе (полагая для определенности $u \geq 0$) накладывать в ней обычное условие $u(0) = e/\varepsilon(r\varphi)^{-1}$, а можем требовать лишь ограниченности функции $u(r)$ при $r \rightarrow 0$. Далее при $r \rightarrow \infty$ интересующее нас решение должно удовлетворять условиям

$$E_r \equiv - \frac{d\varphi}{dr} > 0, \quad E_r \rightarrow 0, \quad U \rightarrow 0. \quad (12)$$

Заметим, однако, что выражение «на бесконечности» имеет здесь несколько условный смысл, ибо уравнение (11') инвариантно относительно произвольного изменения масштаба длины. Отсутствие в данной задаче характерного масштаба длины видно и из условия (10), которое накладывается лишь на произведение $r\varphi$. Такой масштаб появляется лишь при выходе за рамки уравнения (11), т. е. либо при сохранении обоих слагаемых в правой части (8), либо при учете высших членов разложения в (6). Последнее, как мы увидим, окажется необходимым в области достаточно малых значений r .

Уравнение (11') недавно исследовалось [7] в связи с одной модельной задачей квантовой теории поля. Схематический вид решения изображен на рисунке. При $r \ll 1$ и $r \gg 1$ интересующее нас решение имеет вид²

$$u = rr_1^{-1} (1 - r^2/3r_1^2), \quad u = (2 \ln r/c)^{-1/2}, \quad (13)$$

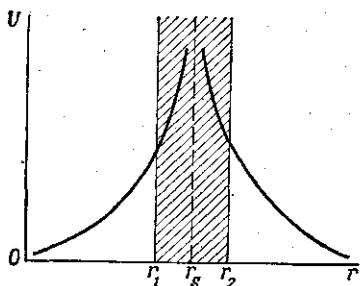
¹ Неравенство (9) по форме совпадает с обычным условием применимости теории Дебая для невырожденного электронного газа, но имеет другой смысл, ибо оно получено здесь в условиях сильного вырождения.

² Смысл обращения $u(r)$ в нуль понятен: сильное экранирование, которое имело бы место при кулоновском виде потенциала, приводит к «самоуничтожению» напряженности поля.

где r_1 и c — постоянные. При некотором значении $r=r_s$ (также определяемом постоянными интегрирования) функция u обращается в бесконечность: $u=r_s\sqrt{2}/|r_s-r|$. В области вблизи r_s мы, однако, выходим за пределы применимости уравнения (11) и самого разложения (6'). Действительно, последнее оправдано лишь если

$$\rho''(F) \gg \rho'''(F) e\varphi, \text{ т. е. если } e\varphi \ll \bar{W}$$

— характерной энергии, определяющей скорость изменения плотности состояний вблизи уровня Ферми. В противном случае лучше пользоваться непосредственно выражением (6); результат будет, строго говоря, зависеть от всего вида плотности состояний. Ситуация, однако, заметно упрощается, если не слишком далеко от уровня Ферми имеется



Схематический вид решения уравнения (11) с условиями (12). Заштрихована область, в которой уравнение становится неприменимым. Левая и правая ветви кривой отвечают соответственно первой и второй формулам (13)

пик (или несколько пиков) плотности состояний. Тогда существует очевидным образом определяемая область достаточно больших значений потенциала, в которой заполнены почти все состояния в пике. При этом интеграл в правой части (6) лишь очень слабо зависит от потенциала:

$$\int_F^{F+e\varphi} \rho(W) dW \simeq N = \text{const.} \quad (14)$$

Полагая в этом случае

$$\bar{r} = \left(\frac{3e}{2\pi e^2} \right)^{1/2} [2\rho''(F) N^2]^{1/6}, \quad \bar{\varphi} = \left[\frac{N\sqrt{2}}{e^3\rho''(F)} \right]^{1/3}, \quad (15)$$

мы получаем из (1), (4) и (5) (при $T=0$)

$$u \equiv r\varphi = r^3/\sqrt{2} + A_2 r + A_1, \quad (16)$$

где A_1 и A_2 — постоянные интегрирования.

Очевидно, это решение доминирует в области малых r . Более того, потенциал, определяемый формулой (16), имеет минимум при $r=r_m = (A_1/\sqrt{2})^{1/2}$, причем $\varphi_{\min} = A_2 + \sqrt{2}A_1 + A_1/2$.

Если эта величина положительна и притом удовлетворяет условию $\varphi_{\min} \gg \bar{W}/e\varphi$, то решение (16) можно распространить на всю область $r \leq r_2$ (см. рис.). При этом первая из формул (13), равно как и вся левая ветвь функции $u(r)$, изображенной на рисунке, не имеет физического значения, а полное решение можно получить, сшивая функцию (16) с правой ветвью функции $u(r)$ (см. рис.). Как мы сейчас увидим, так обстоит дело при

$$\lambda < \left(\frac{e\bar{\Phi}}{\bar{W}} \right)^{3/2} \gg 1. \quad (17)$$

При этом известное представление о ходе потенциала во всем пространстве можно получить, сшивая функцию (16) непосредственно с асимптотическим выражением (13) в точке $r=r_c$, определяемой условием $\varphi(r_c) = \bar{W}/e\bar{\Phi}$. Поскольку основной экранирующий заряд сосредоточен во внутренней области, можем положить

$$A_1 \simeq e/\epsilon r \bar{\Phi} = \lambda (2\pi/3)^{1/2}. \quad (18)$$

При этом с точностью до асимптотически малых величин $\int dr q(r) = e$, как это и должно быть.

Для величины r_c и констант A_2 , с при этом получается

$$r_c = \left(\frac{\pi}{3} \lambda^2 \right)^{1/6}, \quad A_2 = - \frac{(9\pi)^{1/3}}{2^{1/2}} \lambda^{2/3}, \quad (19)$$

$$c = r_c \exp \left\{ - \frac{1}{2} \left(\frac{3}{\pi \lambda^2} \right)^{1/3} \left(\frac{e\bar{\Phi}}{\bar{W}} \right)^2 \right\}.$$

Видно, что в условиях (17) $r_c/c \gg 1$, и все принятые предположения оправдываются.

§ 2. Поглощение электромагнитных волн

Как известно (см., например, [8, 9]), вещественная часть электропроводности σ на частоте ω дается выражением

$$\text{Re } \sigma(\omega) \sim \omega \int dW \int dR \rho(W) \rho(W + \hbar\omega) \times \\ \times \Psi(W, W + \hbar\omega; R) x^2(W, W + \hbar\omega; R) \{f_n(W) - f_n(W + \hbar\omega)\}. \quad (20)$$

Здесь Ψ — двухуровневая функция корреляции, $x(W, W + \hbar\omega; R)$ — матричный элемент координаты, вычисленный с помощью локализованных волновых функций, принадлежащих энергиям W и $W + \hbar\omega$, R — расстояние между соответствующими центрами локализации.

Пусть частота столь низка, что для $\rho(W + \hbar\omega)$ остается в силе формула (1). Тогда при низких температурах мы получаем

$$\sigma(\omega) = \sigma_0(\omega) \left[\frac{\rho''(F)}{\rho_0(F)} \right]^2 \frac{7\pi^4}{60} T^4, \quad T \gg \hbar\omega, \quad (21a)$$

$$\sigma(\omega) = \sigma_0(\omega) \left[\frac{\rho''(F)}{\rho_0(F)} \right]^2 \frac{(\hbar\omega)^4}{120}, \quad T \ll \hbar\omega. \quad (21b)$$

Здесь $\sigma_0(\omega)$ — электропроводность, которая была бы в рассматриваемой системе, если бы плотность состояний на уровне Ферми была отлична от нуля и равнялась $\rho_0(F)$ (явный вид $\sigma_0(\omega)$ хорошо известен [8—10]).

Видим, что при достаточно низких температурах ($T \ll \hbar\omega$) наличие кулоновской щели приводит к резкому усилению частотной зависимости $\sigma(\omega)$ и, следовательно, коэффициента поглощения длинных электромагнитных волн.

Аналогичные результаты получаются и для спиновой магнитной восприимчивости локализованных носителей заряда. Стандартное вы-

числение показывает, что в рассматриваемой системе обычная паулиевская восприимчивость отсутствует. Вместо нее мы получаем

$$\chi = \frac{\pi^2}{3} \beta^2 \rho''(F) T^2, \quad T \gg \beta H, \quad (22a)$$

$$\chi = \beta^4 \rho''(F) H^2, \quad T \ll \beta H. \quad (22b)$$

Здесь H — напряженность магнитного поля, β — магнетон Бора. Таким образом, при достаточно низких температурах линейный режим намагничивания отсутствует вообще.

Исследование рассмотренных здесь эффектов было бы, вероятно, небезынтересно для проверки правильности самого представления о кулоновской щели. С другой стороны, если это представление оправдано, то формулы (22a) и (22b) наводят на мысль о возможности дать еще одно (в дополнение к уже имеющимся) объяснение экспериментально наблюдаемых в неупорядоченных полупроводниках «магнитных аномалий»: в равновесных условиях спиновая восприимчивость оказывается гораздо меньше, чем можно было бы ожидать на основании привычных формул статистики.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бонч-Бруевич В. Л. «Вестн. Моск. ун-та. Физ., астроном.», 1977, 18, № 3.
2. Srinivasan G. «Phys. Rev.», 1971, B4, 2581.
3. Efros A. L., Shklovskii B. I. «J. Phys. C: Solid State Phys.», 1975, 49—51.
4. Efros A. L. «J. Phys. C: Solid State Phys.», 1976, 9, 2021—2030.
5. Эфрос А. Л. В трудах шестой международной конференции по аморфным и жидким полупроводникам. Л., 1976, с. 126—129.
6. Kurosawa T., Sugimoto H. «Progr. Theor. Phys. Suppl.», 1975, N 57, 217.
7. Calucci G. «Il Nuovo Cim.», 1976, 34A, N 2, 221—228.
8. Бонч-Бруевич В. Л. ЖЭТФ, 1970, 59, 985.
9. Bonch-Bruевич V. L., Mironov A. G., Zviagin I. P. «La Rivista del Nuovo Cim.», 1973, N 4, 321.
10. Мотт Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. М., 1974.

Поступила в редакцию
11.12 1976 г.
Кафедра
физики полупроводников