

К ТЕОРИИ ЖИДКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

М. В. Садовский

УДК 537.311.33

В работе рассматривается задача о плотности электронных состояний в жидкости. Получено модельное выражение для одноэлектронной функции Грина, приводящее к плотности состояний с характерной "псевдощелью", возникающей в области энергий, соответствующей запрещенной зоне кристалла.

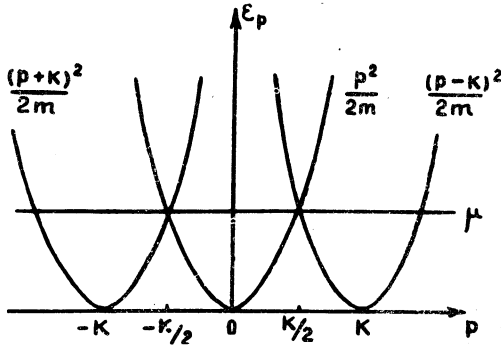
В последние годы проводились широкие экспериментальные исследования расплавов большинства известных полупроводников /1-3/. При этом была выделена группа веществ (таких, например, как $PbTe$, $SbTe$, $PbSe$ и др.), которые и в жидком состоянии по таким характеристикам, как электропроводность и термоэдс, ведут себя подобно кристаллическим полупроводникам, а по другим — таким, как эффект Холла, проявляют себя как хорошие металлы. Качественная интерпретация свойств "жидких полупроводников" по-видимому, требует сохранения определенного аналога зонной структуры электронного спектра и в жидком состоянии. Ниже показывается, что при некоторых модельных предположениях, в рамках картины "почти свободных электронов", рассеивающихся на слабом псевдопотенциале ионов жидкости, может быть получена плотность электронных состояний с характерной "псевдощелью", возникающей из-за эффективно сильного рассеяния в области энергий, соответствующей бывшей запрещенной зоне кристалла.

В общей части наше рассмотрение эквивалентно самосогласованному варианту приближения Эдвардса /4/, так что одноэлектронная функция Грина, усредненная по ансамблю ионных конфигураций, определяется уравнениями

$$G(\epsilon \vec{p}) = \left\{ \epsilon - \xi_p - \sum (\epsilon \vec{p}) \right\}^{-1}, \quad (1)$$

$$\Sigma(\epsilon \bar{p}) = \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}} |\langle \bar{p} + \bar{q} | V | \bar{p} \rangle|^2 S(\bar{q}) G(\epsilon \bar{p} + \bar{q}), \quad (2)$$

где $S(\bar{q})$ - структурный фактор кристалла, определяемый экспериментально и имеющий характерный максимум при $|\bar{q}| = |\bar{K}|$, $|\langle \bar{p} + \bar{q} | V | \bar{p} \rangle|$ - матричный элемент зонного псевдотензора (вобщем говоря, нелокального) $/5/$, $\epsilon_{\bar{p}} = p^2/2m - \mu$, μ - химпотенциал (уровень Ферми), N - полное число ионов в системе.



Р и с. I. Спектр свободных электронов и положение уровня Ферми.

Мы рассмотрим типично "полупроводниковую" ситуацию, когда $2r_F = K$, т.е. диаметр сферы Ферми свободных электронов совпадает с модулем волнового вектора, определяющего положение главного максимума структурного фактора $/2/$. Для одномерной модели этот случай проиллюстрирован на рис. I, где изображены кривые спектра свободных электронов (приближение "пустой" решетки для соответствующего кристалла). В этой модели, рассматривая электрон с $p \sim \pm K/2$ и моделируя $S(q)$ двумя острыми пиками при $q = \pm K$, мы получаем главный вклад в (2) в виде

$$\Sigma(\epsilon p) \cong \Lambda^2 \left\{ \epsilon - \epsilon_{p-K} - \Sigma(\epsilon p - K) \right\}^{-1} \quad (3)$$

где

$$\Lambda^2 \cong \frac{L}{N} \int \frac{dq}{2\pi} |\langle p + q | V | p \rangle|^2 S(q), \quad (4)$$

L - длина системы. Нетрудно убедиться, что поправки на конечную ширину пиков $S(q)$ малы, если

$$\epsilon \sim 1/R_c \ll |p - p_F|, \quad (5)$$

где α - упомянутая ширина, R_c , определенный в (5), играет роль радиуса корреляции "ближнего" порядка в одномерной модели жидкости. Из рис. 1 видны следующие свойства симметрии спектра свободных электронов:

$$\begin{aligned}\xi_{p-K} &= -\xi_p; & p \sim +K/2 \\ \xi_{p+K} &= -\xi_p; & p \sim -K/2\end{aligned}\quad (6)$$

Тогда (3) сводится к

$$\Sigma(\varepsilon; \pm \xi_p) = A^2 G(\varepsilon; \mp \xi_p), \quad (7)$$

так что функция Грина определяется системой уравнений

$$\begin{aligned}\varepsilon - \xi_p - G^{-1}(\varepsilon; \xi_p) &= A^2 G(\varepsilon; -\xi_p), \\ \varepsilon + \xi_p - G^{-1}(\varepsilon; -\xi_p) &= A^2 G(\varepsilon; \xi_p),\end{aligned}\quad (8)$$

решение которой дает

$$G^{R,A}(\varepsilon; \xi_p) = -\frac{\varepsilon + \xi_p}{2A^2} \left\{ \sqrt{1 - \frac{4A^2}{(\varepsilon \pm i\delta)^2 - \xi_p^2}} - 1 \right\}, \quad (9)$$

где R, A означают запаздывающее и опережающее решения. Отметим, что функция Грина такого же вида была получена для другой задачи в работе /6/.

Одноэлектронная плотность состояний может быть вычислена как

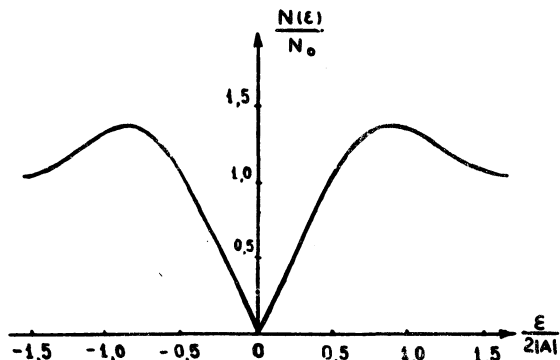
$$N(\varepsilon) = -\frac{N_0}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p \operatorname{Im} G^R(\varepsilon; \xi_p), \quad (10)$$

где N_0 - плотность состояний свободных электронов. Непосредственные вычисления дают

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} = \begin{cases} \frac{4}{\pi} \left(\frac{\varepsilon}{2A} \right)^2 \left\{ E \left(\frac{2A}{\varepsilon} \right) - K \left(\frac{2A}{\varepsilon} \right) \right\} + \frac{4}{\pi} K \left(\frac{2A}{\varepsilon} \right), & \left| \frac{\varepsilon}{2A} \right| > 1 \\ \frac{4}{\pi} \left| \frac{\varepsilon}{2A} \right| E \left(\frac{\varepsilon}{2A} \right); & \left| \frac{\varepsilon}{2A} \right| < 1, \end{cases} \quad (11)$$

где K и E - полные эллиптические интегралы 1-го и 2-го рода. Графически плотность состояний показана на рис. 2. Таким образом мы получили "псевдощель" типа предлагавшейся из качественных соображений в работах Мотта и других авторов. Подчеркнем, что функция Грина (9) не обладает особенностями полюсного типа в области энер-

гий, соответствующей "псевдощели", и в этом смысле не описывает какого-либо спектра элементарных возбуждений. Условие (5) указывает на неприменимость полученных формул в непосредственной окрестности уровня Ферми, т.е. в глубине "псевдощели". В этом смысле кажется сомнительным обращение плотности состояний в нуль в центре "псевдощели".



Р и с. 2. Плотность электронных состояний "жидкого полупроводника".

Обобщение полученных результатов на трехмерный случай вызывает определенные затруднения. Возникающие при этом интегрирование по полярному углу может сильно изменить результат (7). В работе /7/ в связи с этим предлагалось учитывать высшие порядки теории возмущений и высшие корреляционные функции положений ионов в жидкости. Не отрицая такой возможности, мы хотим указать, что учет нелокальности псевдопотенциала, в принципе, позволяет и в трехмерном случае свести (2) к виду (3). Нелокальный псевдопотенциал, вообще говоря, зависит от взаимной ориентации векторов \vec{p} и \vec{q} , причем есть указания на то, что в области $q \sim 2p_F$ доминирует вклад рассеяния "назад" (\vec{p} и \vec{q} антипараллельны) /5,8/. Не трудно убедиться, что при доминирующей роли рассеяния "назад" в конус с раствором

$$\theta_{\max}^2 \ll \left| \frac{p - p_F}{p_F} \right| \quad (12)$$

(2) сводится к (3) с очевидным переопределением параметра A^2 для

трехмерного случая. (При этом p и K в (3) имеют смысл модулей соответствующих трехмерных векторов). Дальнейшее рассмотрение повторяет переход от (3) к результатам (9) и (II), которые остаются в силе. Условие (I2) накладывает на наше рассмотрение ограничения того же типа, что и (5).

Автор искренне благодарен Л. В. Келдышу за руководство работой и многочисленные обсуждения. Он также признателен за обсуждение Е. Г. Максимова и Д. И. Хомскому.

Поступила в редакцию
14 мая 1973 г.

Л и т е р а т у р а

1. N. F. Mott, E. A. Davis. *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*. Oxford 1971. Н. Мотт. Электроны в неупорядоченных структурах. "Мир", 1969 г.
2. В. А. Алексеев, А. А. Андреев, В. Я. Прохоренко. УФН, 106, 393 (1972).
3. R. S. Allgaier. *Phys. Rev.*, 185, 227 (1968); *Phys. Rev.*, B2, 2257 (1970). *J. Vac. Sci. Techn.*, 8, 113 (1971).
4. S. F. Edwards. *Phil. Mag.*, 6, 617 (1961). *Proc. Roy. Soc.*, A267, 518 (1962).
5. У. Харрисон. Псевдопотенциалы в теории металлов. "Мир", 1968 г.
6. A. Schmid. *Zs. Physik*, 231, 324 (1970).
7. J. Ziman. *J. Phys.*, C2, 1704 (1969).
8. R. Shaw, N. Smith. *Phys. Rev.*, 178, 985 (1968).