Письма в ЖЭТФ, том 25, вып. 4, стр. 197 – 200 *20 февраля 1977 г.*

ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ В ОДНОМЕРНОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ С УЗКОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНОЙ ПРИ НАЛИЧИИ ПРИМЕСЕЙ

А.А.Овчинников, Н.С.Эрихман

Найдена плотность энергетического спектра в одномерном полупроводнике с узкой запрещенной зоной при наличии примесей.

Проблема описания энергетического спектра квантовых одномерных (и квазиодномерных) систем с примесями все еще является актуальнейшей. Прежде всего потому, что нарушение, даже малое, строгой периодичности в одномерном случае приводит к резкому изменению характера спектра системы, к локализации всех собственных состояний [1, 2], к обращению в ноль статической проводимости системы [3 – 6] и т. д. В этой работе мы рассмотрим энергетический спектр системы в ситуации, когда щель между двумя зонами в одномерном полупроводнике сравнима по величине со случайным полем, имеющем коррелятор типа "белого шума". Если химический потенциал невозмущенной случайным полем системы расположен посредине запрещенной зоны (этот случай имеет место, например, когда появление щели связано с Пайерлсовским переходом в одномерной решетке), то плотность энергетических состояний в запрещенной зоне определяет такие термодинамические характеристики при низких температурах как теплоемкость, магнитную восприимчивость и т. д. Подробно эта связь прослеживается в обзоре [7].

Как известно, полупроводник с узкой запрещенной зоной может быть описан двухкомпонентным уравнением Дирака [8]

$$\begin{cases} -i\dfrac{\partial\psi_1}{\partial x} + \Delta\psi_2 = E\psi_1 \\ i\dfrac{\partial\psi_2}{\partial x} + \Delta\psi_1 = E\psi_2\,, \end{cases} \tag{1}$$

где ψ_1 и ψ_2 представляют амплитуды частиц 1 и 2, двигающихся направо и налево, Δ – параметр взаимодействия частиц 1 и 2. В нашем случае Δ будет случайной функцией x вида

$$\Delta(x) = \Delta_o + \xi(x) \tag{2}$$

Δ_o – константа, $\xi(x)$ – случайное поле с коррелятором ($< .... >$ – операция статистического усреднения)

$$< \xi(x) > = 0, \quad < \xi(x)\xi(y) > = 2D\delta(x-y). \tag{3}$$

Система (1) имеет решения двух типов: $\psi_2 = \psi_1^*$ и $\psi_2 = -\psi_1^*$. Выберем, например, первый случай. Тогда для мнимой (f_2) и действительной (f_1) части ψ_1 будем иметь систему уравнений

$$\hat{H}\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta(x), & \dfrac{d}{dx} \\ -\dfrac{d}{dx}, & -\Delta(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Граничные условия выберем в виде

$$f_1(0) = f_1(L) = 0 \tag{5}$$

обеспечивающем эрмитовость оператора $\hat{H}$. Следует подчеркнуть, что при макроскопически большом L плотность энергетического спектра не зависит от вида граничных условий. Другой возможный их вид, например, $\psi_1(0) = \psi_1(L)$, $\psi_2(0) = \psi_2(L)$. Отметим без доказательства два важнейших свойства этих уравнений: 1) плотность состояний $\rho(E)$ при условии (2) и (3) и большом L является четной функцией относительно точки $E = 0$ (в этом легко убедиться, например, по теории возмущений). 2) Количество состояний в интервале энергий от 0 до E – $N(E)$ – равно числу нулей функций f_1 в интервале $(0, L)$. Это последнее утверждение точно выполняется для $\Delta(x) = \mathrm{const}$, однако для $\Delta(x)$, подчиняющегося условиям (2) и (3), его можно доказать только для достаточно большого L (в противоположность обычному уравнению Шредингера [9]).

Подсчет числа нулей функции $f_1(x)$ или полюсов функции $z(x) = f_2/f_1$, можно произвести, выписав уравнение для $z(x)$:

$$\frac{dz}{dx} = (E - \Delta_o) + (E + \Delta_o)z^2 + \xi(x)(z^2 - 1) \tag{6}$$

и, используя, Гальперина метод [9], чтобы получить уравнение для функции

$$P(z, x) = < \delta(z(x) - z) >. \tag{7}$$

Основное уравнение имеет следующий вид

$$\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z}\{[(E - \Delta_o) + (E + \Delta_o)z^2 + 2Dz(z^2 - 1)]P\} - D\frac{\partial^2}{\partial z^2}[(z^2 - 1)^2 P] = 0 \tag{8}$$

Очевидно, что при больших x, $P(z, x)$ не зависит от x, т. е. функция $N(E)$ определяется через $P(z)$ следующим образом

$$N(E) = \lim_{z \to \infty} \left\{ (E + \Delta_o)\, z^2 P(z) - D(z^2 - 1) \frac{\partial}{\partial z} [(z^2 - 1) P(z)] \right\} . \quad (9)$$

Уравнение (8) в стационарном случае нужно решить с двумя граничными условиями

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(z) dz = 1 \quad (10)$$

и

$$P(+\infty) = P(-\infty) . \quad (11)$$

Опуская промежуточные вычисления, получим

$$N(E) = \frac{4D}{\pi^2 \{ N_\nu^2(E/2D) + J_\nu^2(E/2D) \}} , \quad (12)$$

где $\nu = \dfrac{\Delta_o}{2D}$, J_ν и N_ν – функции Бесселя и Неймана, соответственно.

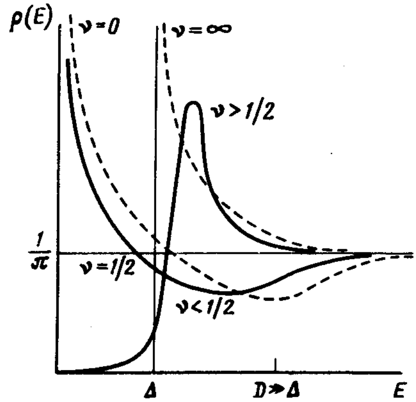
Плотность уровней выражается через $N(E)$ обычным образом $\rho(E) = N'(E$ При исследовании (12) нужно различать два случая $\nu < 1/2$ и $\nu > 1/2$, для которых плотность $\rho(E)$ имеет принципиально разное поведение при $E \to 0$. Для $\nu > 1/2$, $\rho(E) \sim |E|^{2\nu - 1} \to 0$, для $\nu < 1/2$, $\rho(E) \sim |E|^{2\nu - 1} \to \infty$. Таким образом, можно сказать, что при $\Delta_o > D$ имеет место спектр со "псевдощелью, а при $\Delta_o < D$ "псевдощель" закрывается. Следует сказать, что к аналогичному результату пришли авторы [10], использовав теорию возмущений Брюллюэна – Вигнера второго порядка в похожей проблеме. Перечислим основные предельные случаи формулы (12)

$$\rho(E) \sim \frac{-1}{|E| \ln^3 |E|} , \quad \nu = 0; \quad \rho(E) \sim |E|^{2\nu - 1} , \quad 0 < \nu < \infty ;$$

$$\rho(E) = \frac{|E|}{\pi \sqrt{E^2 - \Delta_o^2}} , \quad \nu = \infty . \quad (13)$$

Отметим, что при $\nu = 0$ аналогичная особенность была получена Дайсоном [11] для плотности спектра точно в середине зоны. При $\nu \to \infty$ $\rho(E)$ переходит в свое невозмущенное значение. При меньших ν особенности в плотности при $|E| \sim \Delta_o$ сглаживаются и превращаются в максимум, причем значение в максимуме равно $\sim \nu^{1/3}$. Примерные профили для $\rho(E)$ при различных значениях ν приведены на рис. 1. Неожиданным является, то что при $\nu = 1/2$ ($\Delta_o = D$) влияние щели точно компенсируется наличием нерегулярностей и $\rho(E) = 1/\pi$, т. е. своему значению в отсутствие взаимодействия частиц 1 и 2 и примесей. Наконец, в случае, когда щель становится очень большой $\nu >> 1$ и мы рассматриваем поведение спектра вблизи края зоны, (12) переходит в выражение, полученное

Гальпериным $\pi^{-2}[\mathrm{Ai}^2(-2\epsilon) + \mathrm{Bi}^2(-2\epsilon)]^{-1}$, где $\epsilon = E - \Delta_o$, Ai и Bi – функции Эйри, причем за единицу энергии принята величина $(4D)^{2/3}\Delta_o^{1/3}$, а длины – $(4D)^{-1/3}\Delta_o^{-2/3}$.



Примерные профили плотности $\rho(E)$ в зависимости от параметра $\nu = \Delta_o/2D$

Полученные выше результаты подтверждают высказанную в работе [7] гипотезу об определяющей роли нерегулярностей решетки в формировании парамагнитной восприимчивости $\chi(T)$ при низких температурах для квазиодномерных органических кристаллов NMP – TCNQ. В отличие от работы [7], однако, особенность в $\chi(T)$ при $T \to 0$ может появляться при любой степени переноса электронов с донора на акцептор [12], то есть при произвольном значении химического потенциала. Другим следствием, является то, что для достаточно регулярных кристаллов поведение $\chi(T)$ при $T \to 0$ является не экспоненциальным, а степенным $\chi(T) \sim T^{2\nu - 1}$.

В заключение приносим благодарность В.А.Онищуку за полезное обсуждение результатов.

Физико-технический институт
им. Л.Я.Карпова

Поступила в редакцию
19 января 1977 г.

Литература

[1] N.F.Mott., W.D.Twoose. Adv. Phys., 10, 137, 1961.

[2] R.E.Borland, Proc. Royal. Soc., 274A, 529, 1963.

[3] Ю.А.Бычков. ЖЭТФ, 65, 427, 1973.

[4] В.Л.Березинский. ЖЭТФ, 65, 1251, 1973.

[5] А.А.Гоголин, В.И.Мельников. Э.И.Рашба. ЖЭТФ, 69, 327, 1975.

[6] А.А.Абрикосов, И.А.Рыжкин. ЖЭТФ, 71, 1204, 1976.

[7] Л.Н.Булаевский, А.В.Зворыкина, Ю.С.Каримов,Р.Б.Любовский, И.Ф.Шеголев. ЖЭТФ, 62, 725, 1972.

[8] Л.В.Келдыш. ЖЭТФ, 45, 364, 1963.

[9] B. Halperin, Phys. Rev., 139A, 104, 1965.

[10] М.Я.Овчинникова, А.А.Овчинников. ФТП, 3, №6, 1969.

[11] F.J.Dyson. Phys. Rev., 92, 1331, 1953.

[12] В.Е.Клименко, В.Я.Кривнов, А.А.Овчинников, И.И.Украинский, А.Ф.Швец. ЖЭТФ, 69, 240, 1975.