

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.

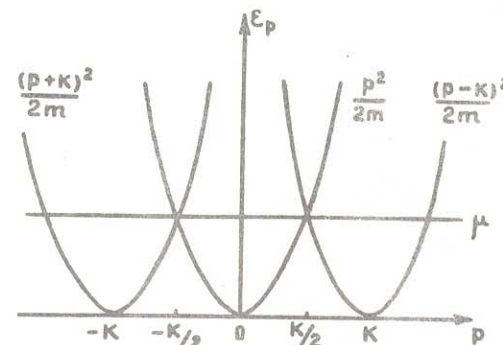
В последние годы проводились широкие экспериментальные исследования расплавов большинства известных полупроводников [1-3]. При этом была выделена группа веществ (таких, например, как  $PbTe$ ,  $ZnTe$ ,  $PbSe$  и др.), которые и в жидком состоянии по таким характеристикам, как электропроводность и термоэдс, 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

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

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

где  $S(\vec{q})$  — структурный фактор жидкости, определяемый экспериментально и имеющий характерный максимум при  $|\vec{q}| = |\vec{K}|$ ,  $|\langle \vec{p} + \vec{q} | V | \vec{p} \rangle|$  — матричный элемент ионного псевдопотенциала (вообще говоря, нелокального) [5],  $\xi_p = p^2/2m - \mu$ ,  $\mu$  — химпотенциал (уровень Ферми),  $N$  — полное число ионов в системе.



Р и с. 1. 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. 1, где изображены кривые спектра свободных электронов (приближение "пустой" решетки для соответствующего кристалла). В этой модели, рассматривая электрон с  $p \sim K/2$  и моделируя  $S(q)$  двумя острыми пиками при  $q = \pm K$ , мы получаем главный вклад в (2) в виде

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

где

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

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

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

где  $\alpha$  — 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:

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

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

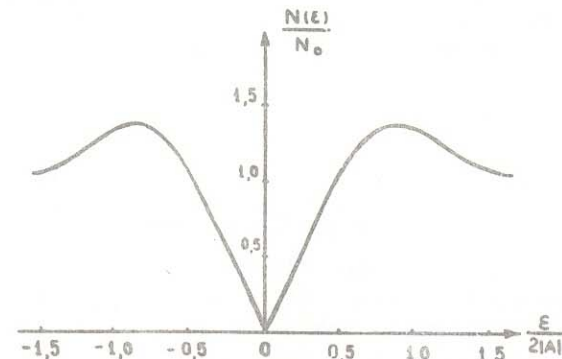
$$N(\varepsilon) = -\frac{N_0}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p \operatorname{Im} G^R(\varepsilon; \xi_p), \quad (10)$$

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 конусе 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 повлечет 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. Комскому.

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., G2, 1704 (1969).
8. R. Shaw, N. Smith. Phys. Rev., 178, 985 (1968).

#### СДВИГ ЛИНИИ ИЗЛУЧЕНИЯ ИНЖЕКЦИОННЫХ ЛАЗЕРОВ НА ОСНОВЕ InSb ПРИ УВЕЛИЧЕНИИ КОНЦЕНТРАЦИИ АКЦЕПТОРНЫХ ПРИМЕСЕЙ

С. П. Гришечкина, А. П. Шотов

УДК 537.311.33

Получена генерация когерентного излучения при  $T=20^{\circ}\text{K}$  при электрической инжекции носителей с помощью  $p^+-p-n^+$  структуры. По спектру спонтанного и когерентного излучения наблюдалось уменьшение ширины запрещенной зоны с увеличением концентрации акцепторных примесей. Показана возможность изменения в небольших пределах ( $\sim 5\%$ ) частоты лазерного излучения.

Известно, что с ростом концентрации мелких водородоподобных примесей в полупроводниках наблюдается уменьшение энергии ионизации примесных уровней до их слияния с основной зоной. Исследования рекомбинационного излучения, проведенные в германии /1/  $n$ -типа показали, что с ростом концентрации примесей наблюдается уменьшение энергии излучательных переходов зона проводимости - валентная зона при практически неизменной энергии излучательных переходов электрона с донорного уровня в валентную зону. Объяснение этого факта дано в работе /3/, где рассмотрено экранированное кулоновское взаимодействие электронов с заряженными донорами и показано, что с ростом концентрации доноров должно иметь место только изменение относительно вакуума энергии основной зоны, и практически неизменной должна оставаться энергия основного состояния донорного уровня.

В настоящей работе проведено исследование спонтанного и когерентного излучения в кристаллах InSb  $p$ -типа при электрической инжекции носителей с помощью  $p^+-p-n^+$  структуры. На чистых и легированных кристаллах InSb была получена генерация ко-