

# О возможности оценки положения порога подвижности для носителей заряда с использованием одночастичных средних

Ю.В. Скрипник<sup>1</sup>, В.М. Локтев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Институт теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова НАН Украины  
ул. Метрологическая, 14-б, г. Киев, 03143, Украина*

<sup>2</sup>*Национальный технический университет Украины  
«Киевский политехнический институт имени Игоря Сикорского»  
пр. Победы, 37, г. Киев, 03056, Украина  
E-mail: vloktev@bitp.kiev.ua*

Статья поступила в редакцию 12 марта 2018 г., опубликована онлайн 28 мая 2018 г.

Рассмотрена зависимость положения порога подвижности от концентрации примеси при трансформации электронной зонной структуры неупорядоченной системы, описываемой моделью Лифшица. Проанализирована эволюция концентрационной динамики порога подвижности, происходящая при варьировании порогового параметра в критерии Иоффе–Регеля. Показано, что критическая концентрация примеси, приводящая к трансформации зонной структуры, при варьировании этого параметра меняется слабо, а соответствующее положение порога подвижности при этой концентрации остается стабильным. Обсуждаются предпосылки, необходимые для существования таких концентрационных интервалов, внутри которых порог подвижности смещается пропорционально кубическому корню из концентрации примеси.

Розглянуто залежність положення порога рухливості від концентрації домішки при трансформації електронної зонної структури неупорядкованої системи, яка описується моделлю Ліфшиця. Проаналізовано еволюцію концентраційної динаміки порога рухливості, яка має місце при варіюванні порогового параметра у критерії Іоффе–Регеля. Показано, що критична концентрація домішки, за якою відбувається трансформація зонної структури, при варіюванні цього параметра змінюється слабо, а відповідне положення порога рухливості при цій концентрації залишається стабільним. Обговорюються передумови, які необхідні для існування таких концентраційних інтервалів, усередині яких поріг рухливості зсувається пропорційно кубічному кореню з концентрації домішки.

PACS: 71.23.An Теории и модели; локализованные состояния;  
71.30.+h Переходы металл–изолятор и другие электронные переходы;  
72.80.Ng Неупорядоченные твердые тела.

Ключевые слова: неупорядоченная система, модель Лифшица, порог подвижности, функция Грина.

## 1. Введение

В 1965 году вышла работа А.М. Косевича, посвященная акустическим колебаниям в кристаллах с тяжелыми примесями [1]. На момент написания статьи квазилокальные колебания в кристаллах с тяжелыми примесями были актуальной тематикой как теоретических, так и экспериментальных исследований. Вопрос о возможности качественных изменений в колебательном спектре, происходящих при повышении кон-

центрации примеси, витал в воздухе. Скорее всего, именно в [1] была впервые высказана идея об анти-кроссинге, происходящем между акустической ветвью колебаний кристалла и бездисперсионной ветвью, расположенной на частоте примесной резонансной моды. Фактически А.М. Косевичем была предсказана происходящая с повышением концентрации примеси трансформация колебательного спектра кристалла, сопровождающаяся формированием в низкочастотной области спектра двух перекрывающихся ветвей колебаний. Помимо

уже сказанного, следует добавить, что в [1] был сделан важный вывод о пороговом характере протекания трансформации спектра, и была произведена оценка соответствующей критической концентрации примеси.

Впоследствии теоретически обоснованный в [1] процесс, приводящий к кардинальным изменениям низкочастотных колебаний примесного кристалла, был назван перестройкой спектра кроссового типа. В дальнейшем данная концепция была перенесена на электронные [2] и магنونные [3] спектры твердых тел, где она нашла свое полное экспериментальное подтверждение. Кроме того, теория кроссовой перестройки была разработана и для элементарных возбуждений в низкоразмерных системах, в которых процесс ее протекания обладает целым рядом отличительных особенностей. В последнее время было предсказано, что кроссовая перестройка спектра возможна и в двумерных системах с линейным законом дисперсии, в которых она приводит к удвоению числа точек Дирака [5].

При перестройке спектра кроссового типа в окрестности энергии примесного резонанса открывается транспортная щель. Зарождение транспортной щели происходит при некоторой критической концентрации примеси, значение которой обусловлено взаимным пространственным перекрытием отдельных примесных состояний. В результате меняется систематика состояний в спектре неупорядоченной системы: локализованные состояния на некотором интервале энергий замещают делокализованные. Таким образом, нижняя дисперсионная ветвь оказывается ограниченной порогом подвижности сверху, а верхняя — снизу. Для описания трансформированного спектра необходимо определить положение обоих порогов подвижности. К сожалению, вопрос о корректном определении положения порога подвижности аналитическими средствами все еще далек от своего окончательного разрешения.

Начиная с [1], в подавляющем большинстве научных публикаций, посвященных перестройке спектра, анализ систематики состояний в неупорядоченной системе проводится с помощью усредненной одночастичной функции Грина. Строго говоря, информация о локализации электронных состояний, содержащаяся в функции Грина, с необходимостью должна быть утеряна после усреднения по различным распределениям примесных атомов. Отсутствие такой информации делает невозможным корректное определение положения порога подвижности. Однако использование внутренней логики приближений, применяемых для вычисления усредненной функции Грина неупорядоченной системы, все же позволяет вырабатывать конструктивные критерии для определения его положения. Несмотря на свою феноменологическую сущность, такой подход дает возможность продвинуться намного дальше в вычислениях, проводимых аналитическим способом, и усилить предсказательный элемент теоретического рассмотрения

конкретной неупорядоченной системы. Ниже мы остановимся подробнее на вопросах, возникающих при построении таких критериев, и постараемся сделать еще один шаг к пониманию роли выбираемых параметров на примере неупорядоченной системы, описываемой моделью Лифшица.

## 2. Модельная неупорядоченная система и ее функция Грина

Рассмотрим классическую задачу о структуре электронного спектра неупорядоченной системы вблизи границы затравочной зоны. Предположим, из соображений простоты, что такая зона в исследуемой системе всего одна. Для описания примесей обратимся к модели Лифшица [4], иными словами, к широко используемой модели бинарного сплава замещения с диагональным беспорядком. Согласно этой модели, в гамильтониане сильной связи потенциалы на узлах кристаллической решетки могут принимать одно из двух фиксированных значений, в то время как интегралы перескока остаются неизменными. Выберем значения узельного потенциала в несимметричной форме:  $V_L$  — для узлов, занятых примесными атомами, и 0 — для узлов, занятых атомами основного кристалла. В результате модельный гамильтониан неупорядоченной системы принимает следующий вид:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) c^\dagger(\mathbf{k}) c(\mathbf{k}) + \frac{V_L}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', s} \exp(i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{r}_s) c^\dagger(\mathbf{k}) c(\mathbf{k}'), \quad (1)$$

где  $E(\mathbf{k})$  — закон дисперсии электронов в невозмущенной зоне исходного кристалла,  $s$  пробегает по занятым примесями узлам, имеющим радиус-вектор  $\mathbf{r}_s$ ,  $N$  — полное число узлов, а  $c^\dagger(\mathbf{k})$  и  $c(\mathbf{k})$  — операторы рождения и уничтожения электрона с волновым вектором  $\mathbf{k}$  соответственно. Ограничимся анализом структуры спектра обычной трехмерной неупорядоченной системы. Также постулируем, что вблизи дна затравочной зоны закон дисперсии имеет квадратичный характер:

$$E(\mathbf{k}) \approx \epsilon_0 (ka)^2, \quad ka \ll 1, \quad (2)$$

где  $a$  — постоянная кристаллической решетки. Усредненная по всем возможным реализациям пространственного распределения примесей одноэлектронная функция Грина

$$\hat{G} = \langle (E - \hat{H})^{-1} \rangle \quad (3)$$

обладает трансляционной инвариантностью решетки, и поэтому может быть представлена следующим образом:

$$G(\mathbf{k}, E) = (E - E(\mathbf{k}) - \Sigma(\mathbf{k}, E))^{-1}, \quad (4)$$

где  $\Sigma(\mathbf{k}, E)$  — собственная энергия. Примем как данное, что примеси занимают узлы решетки абсолютно случайным образом, т.е. без каких-либо корреляций во взаимном расположении, с некоторой вероятностью  $c \ll 1$ . В случае низкой концентрации примеси  $c$ , для собственной энергии может быть построено ренормированное разложение [6]:

$$\Sigma(\mathbf{k}, E) = c\tau \left( 1 - cA_{00} - cA_{00}^2 + c \sum_{l \neq 0} \frac{A_{0l}^3 \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_l) + A_{0l}^4}{1 - A_{0l}^2} + \dots \right),$$

$$A_{0l}(E) = \tau G_{0l}(E), \quad \tau = \frac{V_L}{1 - V_L G_{00}(E)},$$

$$G_{0l}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}, E) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_l), \quad (5)$$

где суммирование проводится по всем узлам решетки  $l$ . Первый член результирующего ряда для собственной энергии описывает вклад от многократного рассеяния на одном и том же узле, находящемся в такой эффективной среде, которая учитывает присутствие всего ансамбля примесей в неупорядоченной системе. Вторым же и третьим членами разложения соответствуют поправкам, возникающим из-за невозможности многократного заполнения узлов решетки примесями. Перечисленные члены ряда, взятые вместе с поправками на многократное заполнение узлов, имеющими более высокий порядок по концентрации, составляют в сумме известное приближение когерентного потенциала. Последний из приведенных в разложении членов в это приближение не входит, и качественно отличается от предыдущих тем, что характеризует рассеяние на различных двухпримесных кластерах. Иными словами, он представляет собой вклад от двухузельных диаграмм в собственную энергию, в то время как предыдущие члены — от одноузельных. Вклады в собственную энергию от рассеяния на примесных кластерах, состоящих из более чем двух дефектов, при записи (5) были опущены.

Известно, что в спектре неупорядоченной системы присутствуют такие интервалы энергии, внутри которых можно пренебречь всеми членами ренормированного ряда для собственной энергии, кроме первого. В результате, на этих интервалах собственная энергия не зависит от волнового вектора и может быть определена из условия самосогласования:

$$\Sigma(E) = \frac{cV_L}{1 - V_L G_{00}(E)}. \quad (6)$$

Воспользовавшись законом дисперсии (2), нетрудно получить часто используемую для трехмерных систем аппроксимацию диагонального по узлам матричного элемента усредненной одночастичной функции Грина:

$$G_{00}(E) \approx -\frac{\beta}{\epsilon_0} - i \frac{\sqrt{E - \Sigma(E)}}{4\pi\epsilon_0^{3/2}}, \quad \beta \sim 1, \quad (7)$$

которая обладает достаточной точностью при  $|E - \Sigma(E)| \ll \epsilon_0$ . Везде ниже будем использовать именно это приближенное выражение для диагонального элемента усредненной функции Грина, поскольку весь последующий анализ ограничен спектральной окрестностью дна затравочной зоны.

### 3. Малый параметр ренормированного разложения и положение порога подвижности

Систематика состояний вблизи особых точек спектра претерпевает радикальные изменения даже при низкой концентрации примеси в кристалле [4]. Наряду с трансформацией структуры спектра в указанных областях становятся неприменимыми и приближенные методы, широко используемые в физике неупорядоченных систем. Из всех возможных особых точек спектра наиболее пристальное внимание всегда уделялось границам зон.

Хорошо известно, что в неупорядоченных системах с точечными дефектами наблюдается концентрационное размытие краев затравочных зон, что сопровождается локализацией электронных состояний в их окрестностях. Локализованные состояния отделяет от токовых порог подвижности, концентрационная динамика которого является основным предметом данного исследования. Сосредоточим внимание на токовых состояниях. Если энергия находится в области спектра, занятой делокализованными состояниями, то по мере ее приближения к границе зоны постепенно увеличивается эффективный радиус пространственных осцилляций матричного элемента перенормированного пропагатора  $G_{0l}(E)$ . Поскольку матричные элементы функции Грина, взятые между различными узлами решетки, присутствуют исключительно в кластерных членах ренормированного ряда для собственной энергии (5), то увеличение эффективного радиуса с необходимостью приводит к возрастанию вкладов от рассеяния на примесных кластерах. Абсолютная величина отношения вклада от рассеяния на двухпримесных кластерах к первому члену ряда для обычных трехмерных систем имеет следующий порядок:

$$R(E) \equiv c \left| \sum_{l \neq 0} A_{0l}^2(E) \right|. \quad (8)$$

Хотя структура кластерных членов ряда для собственной энергии и усложняется с повышением соответствующего числа примесей, можно показать, что по порядку величины абсолютное значение отношения двух последовательных членов ряда не зависит от этого числа и составляет все ту же величину  $R(E)$ . Оценочно, сумма всех кластерных членов ренормированного раз-

ложения, начиная с двухпримесного, не должна превосходить по величине первый член ряда, если

$$R(E) \leq \frac{1}{2}. \quad (9)$$

Нетрудно убедиться, что вблизи границ зон обсуждавшиеся выше поправки на многократное заполнение узлов, а также и подобные им члены ренормированного ряда, имеющие более высокий порядок по концентрации примесей, при  $c \ll 1$  существенного вклада в собственную энергию не дают. Таким образом, величина  $R(E)$  является малым параметром ренормированного ряда, и на тех интервалах спектра, где выполняется неравенство (9), можно вполне ограничиться только его первым членом. В противном случае,  $R(E) > 1/2$ , не представляется возможным выделить какую-либо последовательную систематику электронных состояний, и, соответственно, не может быть построено и адекватное структуре спектра разложение для собственной энергии.

Пусть в некоторой области спектра соблюдается условие (9). Тогда, отбросив все члены ряда, кроме первого, и применив хрестоматийные тождества, перепишем правую часть (8) в следующем виде:

$$R(E) = c \left| \tau^2 \left( \frac{\partial G_{00}(E)}{\partial(E - \Sigma(E))} + G_{00}^2(E) \right) \right|. \quad (10)$$

Подобное выражение неоднократно использовалось в качестве критерия, по которому можно судить о применимости приближения когерентного потенциала [7,8]. Было показано, что на границе зоны, рассчитанной при помощи этого приближения, параметр  $R(E)$  точно равен единице. Поскольку известно, что в ближайшей окрестности границы зоны приближение когерентного потенциала неприменимо, то было предложено не доверять результатам, полученным с применением приближения когерентного потенциала, на тех участках спектра, где значение параметра  $R(E)$  близко к единице. Основываясь на условии самосогласования (6), после несложных преобразований можно вывести следующее полезное соотношение:

$$\frac{1}{c} |\Sigma(E)|^2 = \frac{\text{Im} \Sigma(E)}{\text{Im} G_{00}(E)}, \quad (11)$$

которое является справедливым в той области спектра, где выполняется неравенство (9). Упростим (10), используя это соотношение:

$$R(E) = \left| \frac{\text{Im} \Sigma(E)}{\text{Im} G_{00}(E)} \left( \frac{\partial G_{00}(E)}{\partial(E - \Sigma(E))} + G_{00}^2(E) \right) \right|. \quad (12)$$

Замена диагонального элемента функции Грина в (12) на его аппроксимацию (7) дает:

$$R(E) \approx \left| \frac{\text{Im} \Sigma(E)}{2\sqrt{E - \Sigma(E)} \text{Re} \sqrt{E - \Sigma(E)}} \right|, \quad (13)$$

где отброшено несущественное вблизи края зоны слагаемое  $G_{00}^2(E)$ . Выполним стандартную подстановку:

$$E - \Sigma(E) \equiv \kappa^2 e^{i2\varphi}, \quad \kappa \geq 0, \quad (14)$$

где  $\varphi$  — половинная фаза перенормированной энергии, а  $\kappa$  — квадратный корень ее модуля. В результате выражение для параметра  $R(E)$  приобретает удобный вид:

$$R(E) = |\sin(\varphi)|. \quad (15)$$

Запишем общепринятые выражения для длины свободного пробега:

$$\ell(E) = \frac{a\sqrt{\epsilon_0}}{2\text{Im} \sqrt{E - \Sigma(E)}}, \quad (16)$$

и для значения волнового вектора, соответствующего той же энергии электрона:

$$k(E) = \frac{\text{Re} \sqrt{E - \Sigma(E)}}{a\sqrt{\epsilon_0}}. \quad (17)$$

Выразим обе эти величины через модуль и фазу перенормированной энергии:

$$\ell(E) = \frac{a\sqrt{\epsilon_0}}{2\kappa \sin(\varphi)}, \quad k(E) = \frac{\kappa \cos(\varphi)}{a\sqrt{\epsilon_0}}. \quad (18)$$

Достаточно беглого взгляда на записанные выше выражения, чтобы заметить, что локализационный параметр, входящий в критерий Иоффе–Регеля [9], находится во взаимно-однозначном соответствии с малым параметром ренормированного ряда  $R(E)$  [10,11]:

$$k(E)\ell(E) = \frac{\text{ctg}(\varphi)}{2} = \frac{\sqrt{1 - R(E)^2}}{2R(E)}. \quad (19)$$

С приближением к границе зоны значение малого параметра  $R(E)$  постепенно увеличивается, оставаясь при этом меньшим единицы, а значение локализационного параметра, в согласии с (19), снижается. Поэтому всегда присутствует такой интервал энергий, на котором произведение  $k(E)\ell(E)$  принимает значения порядка единицы. В соответствии с критерием Иоффе–Регеля порог подвижности должен принадлежать этому интервалу энергий. Пусть на некоторой энергии  $E_{\text{th}}$  малый параметр ряда принимает то пороговое значение, при котором ренормированное разложение для собственной энергии утрачивает свой смысл:  $R(E_{\text{th}}) = 1/2$ . Подставляя это значение в (19), имеем:

$$k(E_{\text{th}})\ell(E_{\text{th}}) = \frac{\sqrt{3}}{2}, \quad \varphi_{\text{th}} = \frac{\pi}{6}, \quad (20)$$

где  $\Phi_{th}$  — пороговое значение половинной фазы перенормированной энергии. Численное моделирование неупорядоченных систем устойчиво дает значение локализационного параметра на пороге подвижности равное 0,844 [12–14], что оказывается неожиданно близким к полученному выше аналитическим способом значению. Следовательно, ренормированный ряд для собственной энергии, предназначенный по своей сути для приближенного описания делокализованных состояний при помощи эффективного энергетического сдвига и эффективного затухания, вводимых в духе метода среднего поля, перестает соответствовать структуре электронных состояний одновременно с нарушением критерия Иоффе–Регеля. Это совпадение не только придает физический смысл пороговому значению малого параметра ряда, но также является и сильным аргументом в пользу определения положения порога подвижности из условия равенства половинной фазы перенормированной энергии пороговому значению  $\pi/6$ .

Заметим, что изложенные выше соображения ни в коей мере не обладают должной строгостью. Во-первых, при выводе выражения для малого параметра ренормированного разложения было использовано несколько аппроксимаций. Во-вторых, неявно присутствующее предположение о том, что используемое приближение утрачивает свою валидность пороговым образом, не является полностью правомерным. Поэтому любой выбор некоторого наперед заданного порогового значения для малого параметра ренормированного ряда  $R(E)$ , взятого отдельно, вне его связи с критерием Иоффе–Регеля, не может быть полностью обоснованным. Кроме того, корректный выбор значения локализационного параметра в критерии Иоффе–Регеля, согласно которому следует определять положение порога подвижности, до сих пор является предметом непрекращающихся дискуссий. Поскольку выше для определения порогового значения фазы перенормированной энергии с необходимостью были привлечены аргументы, имеющие эвристический характер, в последующих разделах проанализируем изменения, возникающие в концентрационной динамике порога подвижности при отклонении порогового значения половинной фазы перенормированной энергии от предсказанного значения  $\pi/6$ .

#### 4. Концентрационная динамика порога подвижности

Найдем аналитические решения условия самосогласования (6), соответствующие предполагаемым положениям порога подвижности в рассматриваемой неупорядоченной системе. С этой целью произведем параметризацию обсуждаемой задачи, введя следующие безразмерные переменные:

$$\varepsilon = \frac{E}{E_l}, \quad \sigma = \frac{\Sigma(E)}{E_l}, \quad \varkappa = \frac{\kappa}{\sqrt{E_l}}, \quad x = \frac{|\alpha|^3 c}{(4\pi)^2}, \quad (21)$$

где

$$E_l = \frac{(4\pi)^2 \epsilon_0}{\alpha^2}, \quad \alpha = \frac{V_L/\epsilon_0}{1 + V_L\beta/\epsilon_0}. \quad (22)$$

Перепишем условие самосогласования (6) в этих новых переменных:

$$\varepsilon - \sigma = \varepsilon - \frac{\text{sgn}(\alpha)x}{1 + i\text{sgn}(\alpha)\sqrt{\varepsilon - \sigma}}. \quad (23)$$

Данное равенство удобно представить в виде алгебраического уравнения третьей степени:

$$iz^3 + \text{sgn}(\alpha)z^2 - iz + x - \text{sgn}(\alpha)\varepsilon = 0, \quad z = \varkappa e^{i\varphi}. \quad (24)$$

Для того чтобы иметь возможность исследовать различные стадии процесса трансформации зонной структуры неупорядоченной системы, иначе говоря перестройки ее спектра, необходимо наложить определенные ограничения на выписанные выше параметры задачи. Если не учитывать масштаб энергий, задаваемый постоянной  $\epsilon_0$ , имеющей порядок ширины затравочной зоны, то рассматриваемая система управляется единственным параметром — приведенной концентрацией примеси  $x$ . Значения приведенной концентрации, много меньшие единицы, легко реализуются за счет малости концентрации  $c$ . Однако качественно различные режимы концентрационной зависимости положения порога подвижности становятся доступными только в том случае, когда приведенная концентрация может принимать значения, много большие единицы. Поскольку, по условию задачи, всегда справедливо неравенство  $c \ll 1$ , то с необходимостью имеем:  $|\alpha| \gg 1$ . Кроме того, как будет ясно из дальнейшего, на кривой концентрационной зависимости положения порога подвижности присутствует перегиб, сигнализирующий о трансформации зонной структуры, только в случае  $\alpha > 0$ . Этим двум требованиям можно удовлетворить при условии, что примесный потенциал является притягивающим, т.е.  $V_L < 0$ , что является следствием работы вблизи дна затравочной зоны. При этом для выполнения неравенства  $|\alpha| \gg 1$  примесный потенциал по абсолютной величине должен лишь слегка превосходить пороговое значение  $\epsilon_0/\beta$ , при котором от затравочной зоны отщепляется локальный уровень. В этом случае единичная изолированная примесь приводит к появлению мелкого локального уровня с энергией  $E = -E_l$  ( $E_l \ll \epsilon_0$ ), расположенного ниже затравочной зоны. Указанное свойство объясняет физический смысл обезразмеривающего параметра  $E_l$ , используемого в (21). Заметим, что при наличии мелкого локального уровня порог подвижности с увеличением концентрации примеси постепенно углубляется внутрь затравочной зоны.

Выделим мнимую часть уравнения (24):

$$\cos(3\varphi)\varkappa^3 + \text{sgn}(\alpha)\sin(2\varphi)\varkappa^2 - \varepsilon \cos(\varphi)\varkappa = 0. \quad (25)$$

Воспользуемся формулами для кратного аргумента тригонометрических функций. В результате получим:

$$\varepsilon = \operatorname{sgn}(\alpha) 2 \sin(\varphi) \varkappa + (1 - (2 \sin(\varphi))^2) \varkappa^2. \quad (26)$$

Пусть на пороге подвижности половинная фаза перенормированной энергии  $\varphi$  принимает некоторое фиксированное значение  $\varphi_{\text{th}}$ , которое, вообще говоря, может несколько отличаться от  $\pi/6$ , независимо от концентрации примеси. Введем обозначение:

$$t = 2 \sin(\varphi_{\text{th}}). \quad (27)$$

Если пороговое значение половинной фазы перенормированной энергии составляет  $\pi/6$ , то нововведенный параметр  $t$  равен единице. При других разумных пороговых значениях половинной фазы перенормированной энергии значение параметра  $t$  может несколько отклоняться от единицы в ту или другую сторону. В общем случае для положения порога подвижности на шкале энергий имеем:

$$\varepsilon_{\text{th}} = \operatorname{sgn}(\alpha) t \varkappa_{\text{th}} + (1 - t^2) \varkappa_{\text{th}}^2. \quad (28)$$

Следует отметить, что при  $t = 1$  в (28) присутствует только первое слагаемое. Порог подвижности  $\varepsilon_{\text{th}}$  при этом прямо пропорционален величине  $\varkappa_{\text{th}}$ , определяющей предельное значение волнового вектора вблизи края зоны. Указанная линейная зависимость порога подвижности от предельного значения волнового вектора представляется несколько неожиданной, поскольку отличается от квадратичной зависимости энергии от волнового вектора в невозмущенном законе дисперсии. Данное соотношение остается справедливым при всех концентрациях примеси, только если параметр  $t$  точно равен единице. Поскольку предельное значение волнового вектора увеличивается вместе с ростом концентрации примеси, то при отклонении  $t$  от единицы растет по абсолютной величине и второе слагаемое в (28). Тем не менее его вклад остается несущественным, пока выполняется неравенство

$$\varkappa_{\text{th}} \ll \frac{t}{|1 - t^2|} \equiv \varkappa_{\text{quad}}. \quad (29)$$

При  $t < 1$  второе слагаемое в (28) положительно. Начиная с некоторой концентрации примеси, оно становится доминирующим, после чего порог подвижности будет зависеть от предельного значения волнового вектора квадратичным образом. Интересно, что при  $t > 1$  отрицательное второе слагаемое может, в принципе, приводить к движению порога подвижности в обратную сторону при увеличении концентрации примеси.

Выделим теперь действительную часть уравнения (24):

$$-\sin(3\varphi) \varkappa^3 + \operatorname{sgn}(\alpha) \cos(2\varphi) \varkappa^2 + \varepsilon \sin(\varphi) \varkappa + x - \operatorname{sgn}(\alpha) \varepsilon = 0. \quad (30)$$

После подстановки порогового значения половинной фазы перенормированной энергии и ряда несложных преобразований получаем следующее соотношение:

$$x = t \varkappa_{\text{th}}^3 - \operatorname{sgn}(\alpha) t^2 \varkappa_{\text{th}}^2 + t \varkappa_{\text{th}}, \quad (31)$$

которое связывает пороговое значение волнового вектора и приведенную концентрацию. В отличие от уравнения (28), задающего порог подвижности, варьирование  $t$  к качественным изменениям не приводит. Основные режимы зависимости задаются первым и третьим слагаемым в (31), в которые параметр  $t$  входит как множитель.

Уравнения (28) и (31), взятые вместе, задают зависимость порога подвижности от приведенной концентрации параметрически. На рис. 1 представлена параметрическая область, занимаемая концентрационными зависимостями порога подвижности при изменении параметра  $t$  от 0,65 до 1,15, а также некоторые отдельные кривые. На рисунке видно, что при всех представленных значениях  $t$  на кривых присутствует точка перегиба, что указывает на трансформацию зонной структуры неупорядоченной системы. Общий характер зависимости при варьировании параметра  $t$  тоже сохраняется.

До точки перегиба ход кривых слабо зависит от  $t$ , однако после точки перегиба изменение параметра  $t$  начинает оказывать ощутимое влияние на концентрационную динамику порога подвижности. Так, при увеличении  $t$  ( $t > 1$ ) кривые заметно выполаживаются, что обусловлено наличием отрицательного второго слагаемого в (28). Напротив, с уменьшением  $t$  ( $t < 1$ ) порог подвижности заходит глубже в затравочную зону,

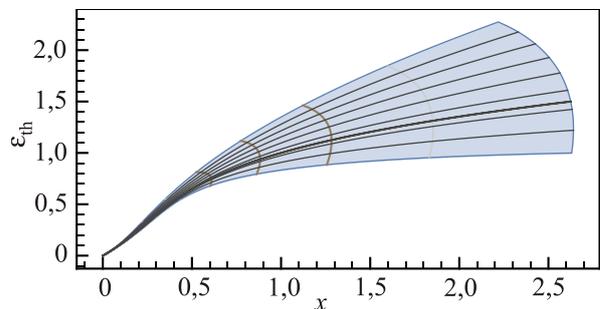


Рис. 1. Семейство зависимостей порога подвижности  $\varepsilon_{\text{th}}$  от приведенной концентрации примеси  $x$ , полученное при непрерывном варьировании параметра  $t$ ;  $0,65 < t < 1,15$ ;  $\varkappa_{\text{th}}$  изменяется от 0 до 1,5. Жирной линией показана кривая, соответствующая  $t = 1$ .

причем относительное увеличение порога подвижности растет вместе с ростом приведенной концентрации.

Воспользуемся выражениями (18), (21), а также очевидным соотношением  $\cos(\varphi_{th}) = \sqrt{4-t^2}/2$ . Тогда для предельного значения волнового вектора можно записать:

$$k(E_{th}) \equiv k_{th} = \frac{2\pi}{\alpha a} \sqrt{4-t^2} \varkappa_{th}. \quad (32)$$

На рис. 2 дана концентрационная динамика предельного волнового вектора в рассматриваемой системе при варьировании параметра  $t$ , рассчитанная из уравнения (31). Показательно, что область, занимаемая кривыми концентрационных зависимостей, существенно уже, чем в предыдущем случае. При всех значениях  $t$  из интервала  $0,63 < t < 1,15$  на кривых присутствует точка перегиба. Поскольку анализируется спектр вблизи края зоны, то с необходимостью должно выполняться неравенство  $ak_{th} \ll 1$ . Таким образом, имеет смысл рассматривать достаточно большие приведенные концентрации ( $x > 1$ ) только в том случае, когда  $\alpha \gg 1$ .

### 5. Критические значения параметров

Как было показано в предыдущем разделе, на кривой зависимости порога подвижности от концентрации примеси присутствует точка перегиба. Эта точка разделяет два качественно различных режима концентрационной динамики порога подвижности. Отметим, что не только характер концентрационной зависимости порога подвижности, но и другие значимые параметры неупорядоченной системы, а также общая структура спектра вблизи края заправочной зоны отличаются между двумя указанными режимами. Именно поэтому критическая концентрация примеси, при которой происходит смена режимов поведения неупорядоченной системы, и является ее ключевой характеристикой.

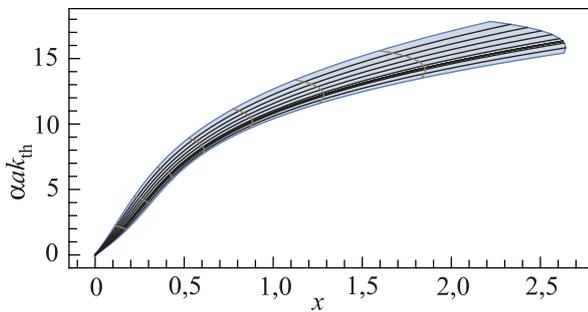


Рис. 2. Семейство зависимостей предельного волнового вектора  $k_{th}$  от приведенной концентрации примеси  $x$ , полученное при непрерывном варьировании  $t$ ;  $0,65 < t < 1,15$ ;  $\varkappa_{th}$  изменяется от 0 до 1,5. Жирной линией показана кривая, соответствующая  $t = 1$ .

Найдем значение критической концентрации для рассматриваемой модельной системы и исследуем его зависимость от параметра  $t$ . С этой целью воспользуемся стандартными правилами вычисления производных для параметрически заданных функций и определим вторую производную порога подвижности по приведенной концентрации из (28) и (31), что дает:

$$\frac{d^2 \varepsilon_{th}}{dx^2} = \frac{2(-3(1-t^2)\varkappa_{th}^2 - 3\text{sgn}(\alpha)t\varkappa_{th} + 1)}{t^2(3\varkappa_{th}^2 - 2\text{sgn}(\alpha)t\varkappa_{th} + 1)^3}. \quad (33)$$

Приравняв числитель полученного выражения к нулю, имеем:

$$(1-t^2)\varkappa_{th,cr}^2 + \text{sgn}(\alpha)t\varkappa_{th,cr} = \frac{1}{3}, \quad (34)$$

где  $\varkappa_{th,cr}$  — значение, которое принимает  $\varkappa_{th}$  при критической концентрации примеси. Сравним левую часть равенства (34) с (28). Из сравнения с очевидностью следует, что для порога подвижности при критической концентрации примеси  $\varepsilon_{th,cr}$  справедливо следующее равенство:

$$\varepsilon_{th,cr} = \frac{1}{3}. \quad (35)$$

Таким образом, мы приходим к примечательному результату, состоящему в том, что безразмерный порог подвижности  $\varepsilon_{th}$  при критической концентрации всегда находится на энергии  $1/3$  независимо от значения, которое принимает параметр  $t$ . Проиллюстрируем данное соотношение графически. Для этого, исходя из уравнений (28) и (33) и варьируя параметр  $t$ , построим семейство зависимостей второй производной порога подвижности по приведенной концентрации от собственно порога подвижности. Как отчетливо видно из рис. 3, отдельные кривые, соответствующие различным значениям  $t$ , фокусируются в точке  $(1/3, 0)$ .

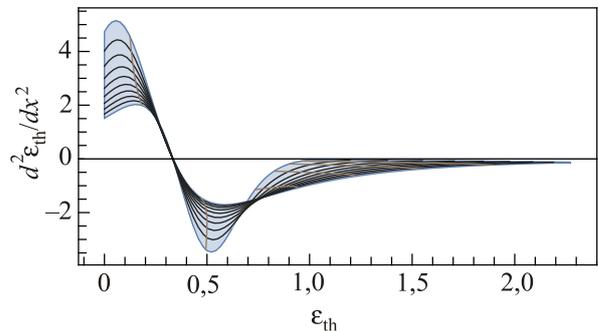


Рис. 3. Семейство зависимостей второй производной порога подвижности по приведенной концентрации примеси  $d^2 \varepsilon_{th}/dx^2$  от порога подвижности  $\varepsilon_{th}$ , полученное при непрерывном варьировании параметра  $t$ ;  $0,65 < t < 1,15$ ;  $\varkappa_{th}$  изменяется от 0 до 1,5.

В качестве следующего шага рассчитаем значение  $x_{th}$  при критической концентрации примеси, применив уравнение (34). При этом следует выбирать тот корень квадратного уравнения, который дает  $x_{th,cr} > 0$ , поскольку данная величина является существенно положительной. В результате получим:

$$x_{th,cr} = \text{sgn}(\alpha) \frac{\sqrt{4-t^2} - \sqrt{3}t}{2\sqrt{3}(1-t^2)}. \quad (36)$$

Чтобы устранить ложный полюс, присутствующий в данном выражении, домножим числитель и знаменатель дроби на  $\sqrt{4-t^2} + \sqrt{3}t$ . После несложных преобразований выражение (36) принимает вид

$$x_{th,cr} = \frac{2\text{sgn}(\alpha)}{\sqrt{3}(\sqrt{4-t^2} + \sqrt{3}t)}. \quad (37)$$

Отметим, что значение  $x_{th,cr}$  изменяется весьма умеренно при варьировании  $t$ . Перепишем последнее соотношение в других обозначениях, выражая предельное значение волнового вектора при критической концентрации примеси через пороговое значение половинной фазы перенормированной энергии:

$$k_{th,cr} = \frac{4\pi\text{sgn}(\alpha)}{\sqrt{3}\alpha a} \frac{1}{\text{ctg}(\varphi_{th}) + \sqrt{3}}. \quad (38)$$

Здесь уместно напомнить, что  $t=1$  соответствует  $\text{ctg}(\varphi_{th}) = \sqrt{3}$ .

Поступая согласно описанной выше процедуре, вычислим первую производную порога подвижности по приведенной концентрации примеси:

$$\frac{d\varepsilon_{th}}{dx} = \frac{t\text{sgn}(\alpha) + 2(1-t^2)x_{th}}{t - 2\text{sgn}(\alpha)t^2x_{th} + 3tx_{th}^2}. \quad (39)$$

Изобразим на рис. 4 набор зависимостей первой производной порога подвижности по приведенной концентрации примеси от приведенной концентрации примеси, рассчитанных из уравнений (39) и (31) при различных значениях параметра  $t$ . Нетрудно видеть, что максимумы на представленных кривых, соответствующие критическим концентрациям примеси, слабо смещаются при вариации  $t$ .

Теперь подставим найденное значение  $x_{th,cr}$  из (37) в (31) и получим критическое значение приведенной концентрации:

$$x_{cr} = \text{sgn}(\alpha) \frac{8t(4 + \sqrt{3}\sqrt{4-t^2}t)}{(\sqrt{3}\sqrt{4-t^2} + 3t)^3}. \quad (40)$$

Возьмем производную от критической концентрации по параметру  $t$ :

$$\frac{dx_{cr}}{dt} = \frac{32\sqrt{3}\sqrt{4-t^2}}{(\sqrt{3}\sqrt{4-t^2} + 3t)^4}. \quad (41)$$

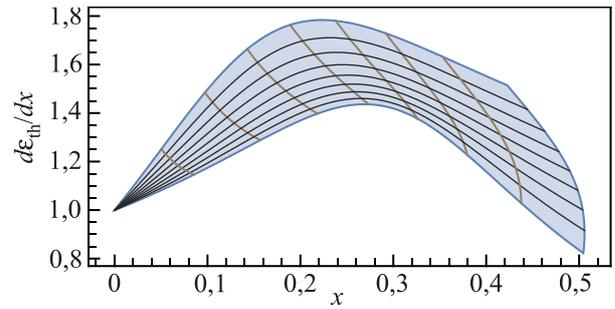


Рис. 4. Семейство зависимостей первой производной порога подвижности по приведенной концентрации примеси  $d\varepsilon_{th}/dx$  от приведенной концентрации примеси  $x$ , полученное при непрерывном варьировании параметра  $t$ ;  $0,65 < t < 1,15$ ;  $x_{th}$  изменяется от 0 до 0,65.

Легко убедиться в том, что в рассматриваемом интервале изменений  $t - 0,65 < t < 1,15$  — выполняется неравенство  $dx_{cr}/dt \ll 1$ . Таким образом, значение критической концентрации оказывается весьма устойчивым по отношению к вариациям  $t$ . Для большей наглядности разложим критическую приведенную концентрацию в ряд вблизи точки  $t = 1$ :

$$x_{cr} \approx \frac{7}{27} + \frac{2}{27}(t-1) + \mathcal{O}(t-1)^2. \quad (42)$$

Подчеркнем, что стабильность критической концентрации при варьировании параметра  $t$  вселяет дополнительную уверенность в надежности полученных ранее оценок этой важной характеристики неупорядоченной системы.

Выше анализировались особенности концентрационной зависимости порога подвижности. Аналогичный анализ может быть проведен и для концентрационной зависимости  $x_{th}$ , задаваемой в неявной форме равенством (31). Нетрудно показать, что в точке перегиба соответствующих кривых величина  $x_{th}$  принимает значение

$$x'_{th,cr} = \text{sgn}(\alpha) \frac{t}{3}, \quad (43)$$

которое ощутимым образом изменяется при варьировании  $t$ . В свою очередь, для значения приведенной концентрации в точке перегиба имеем

$$x'_{cr} = \text{sgn}(\alpha)t^2 \frac{9-2t}{27}. \quad (44)$$

Сравнение зависимостей  $x'_{cr}$  и критической концентрации  $x_{cr}$  от параметра  $t$  приведено на рис. 5. Отметим, что при  $t < 1$  всегда выполняется неравенство  $x'_{cr} < x_{cr}$ , причем с уменьшением  $t$  отличие между двумя концентрациями монотонно нарастает. Две эти концент-

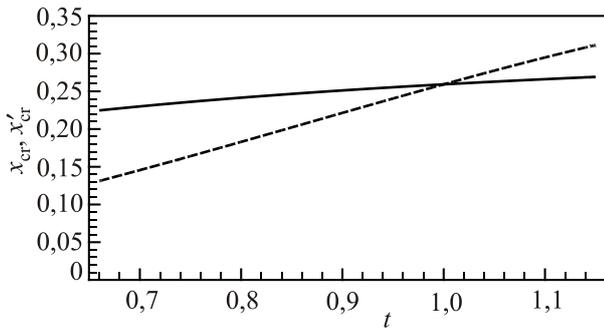


Рис. 5. Зависимости критической приведенной концентрации примеси  $x_{cr}$  (сплошная линия) и концентрации  $x'_{cr}$  (штриховая линия) от значения параметра  $t$ .

рации совпадают только при  $t = 1$ . Также совпадают при  $t = 1$  и значения, принимаемые  $\varkappa_{th,cr}$  и  $\varepsilon_{th,cr}$ , что непосредственно следует из уравнения (28).

### 6. Обсуждение результатов

Резюмируя вышесказанное, перечислим основные следствия варьирования порогового значения фазы перенормированной энергии. Допустим, что  $\alpha > 0$ , и реализуются все остальные требования, необходимые для трансформации зонной структуры рассматриваемой неупорядоченной системы. Прежде всего отметим, что варьирование параметра  $t$  не изменяет качественным образом поведение предельного волнового вектора при увеличении концентрации примеси. Более того, присутствующие изменения являются в значительной мере тривиальными, поскольку наиболее значимые в предельных случаях первое и третье слагаемые в выражении (31) линейны по  $t$ . Если концентрация примеси намного превышает критическую, то  $\varkappa_{th} \gg 1$ , и из (31) следует, что в этом пределе

$$\varkappa_{th} \approx \left(\frac{x}{t}\right)^{1/3}. \quad (45)$$

Воспользовавшись (18), (21) и (22), получим:

$$k_{th} \approx \frac{\cos(\varphi_{th})}{a} \left(\frac{2\pi}{\sin(\varphi_{th})}\right)^{1/3} c^{1/3}, \quad x \gg (2-t)t. \quad (46)$$

Данная асимптотика полностью согласуется с имеющимися оценками и соображениями феноменологического характера, поскольку предельный волновой вектор обратно пропорционален среднему расстоянию между примесями. Отметим, что малые пороговые фазы перенормированной энергии приводят к росту предельных волновых векторов, что накладывает ограничение на допустимые значения концентрации примеси.

Вернемся к концентрационной динамике порога подвижности. Повторим, что при варьировании пара-

метра  $t$  практически не изменяется поведение порога подвижности на участке  $x < x_{cr}$ , сохраняется положение порога подвижности при критической концентрации примеси, а отклонения самой критической концентрации от ее значения при  $\varphi = \pi/6$  являются весьма умеренными.

Значение параметра  $t$  оказывает существенное влияние на ход зависимостей порога подвижности от концентрации примеси только при  $x > x_{cr}$ . Традиционно считается, что при концентрациях примеси, намного превышающих критическую,  $E_{th} \sim c^{2/3}$ . Пусть  $\varphi_{th} = \pi/6$ , т.е.  $t = 1$ . Тогда в правой части равенства (28) остается только первое, линейное по  $\varkappa_{th}$ , слагаемое. Начиная с некоторой концентрации, будет выполняться условие  $\varkappa_{th} \gg 1$ , а следовательно, будет справедливой и асимптотика (45). Таким образом, порог подвижности перемещается пропорционально кубическому корню из концентрации,  $E_{th} \sim c^{1/3}$ , что отличается от устоявшегося результата.

Допустим, что  $t > 1$ . Тогда второе, квадратичное по  $\varkappa_{th}$ , слагаемое в правой части равенства (28) отлично от нуля. Предположим, что с ростом концентрации оно стало доминирующим, что должно изменить концентрационную зависимость порога подвижности. Примем во внимание, что при  $t > 1$  это слагаемое отрицательно. Следовательно, в случае его доминирования порог подвижности опустится ниже границы затравочной зоны, что не представляется реалистичным.

Предположим теперь, что  $t < 1$ . Как и в предыдущем случае, при  $\varkappa_{th} > \varkappa_{quad}$  доминирующим в (28) является слагаемое, квадратичное по  $\varkappa_{th}$ . В результате восстанавливается стандартная концентрационная зависимость порога подвижности:  $E_{th} \sim c^{2/3}$ . Тем не менее, если выполняется неравенство

$$\frac{\varkappa_{quad}}{\varkappa_{th,cr}} = \frac{2\sqrt{3}}{\text{ctg}(\varphi_{th}) - \sqrt{3}} \gg 1, \quad \varphi_{th} < \frac{\pi}{6}, \quad (47)$$

то существует широкий интервал концентраций, превышающих критическую, внутри которого квадратичное по  $\varkappa_{th}$  слагаемое можно не учитывать, и стандартная концентрационная зависимость порога подвижности не соблюдается. Подчеркнем, что условие (47) будет выполняться даже при девиации  $\varphi_{th}$  от значения  $\pi/6$  в сторону меньших углов на двадцать процентов.

Часто положение порога подвижности находят из условия

$$E_{th} - \text{Re}\Sigma(E_{th}) \sim \text{Im}\Sigma(E_{th}). \quad (48)$$

В терминах настоящей статьи данное условие соответствует  $\varphi = \pi/8$ . Нетрудно удостовериться, что равенство  $\varkappa_{th} = \varkappa_{quad}$  выполняется при концентрации примесей, превышающей критическую примерно в пятнадцать раз. Значит, процесс трансформации зон-

ной структуры, происходящий с повышением концентрации примеси, полностью завершается задолго до того, как устанавливается стандартная концентрационная зависимость порога подвижности  $E_{\text{th}} \sim c^{2/3}$ . Попутно заметим, что для перехода концентрационной зависимости порога подвижности в стандартный режим при  $c \ll 1$  необходимо удовлетворить достаточно жестким ограничениям на близость локального примесного уровня к границе затравочной зоны.

Интервал концентраций, внутри которого смещение порога подвижности происходит пропорционально кубическому корню из концентрации примеси, является хорошо выраженным, если выполняется неравенство  $\varkappa_{\text{quad}} \gg 1$ . Перепишем это неравенство через отклонение порогового значения половинной фазы перенормированной энергии от значения  $\pi/6$ :

$$\phi \ll \frac{1}{2\sqrt{3}}, \quad \phi = \frac{\pi}{6} - \phi_{\text{th}} > 0. \quad (49)$$

Отсюда следует, что концентрационная зависимость порога подвижности вида  $E_{\text{th}} \sim c^{1/3}$  может наблюдаться при изменениях порогового значения фазы перенормированной энергии, происходящих в довольно широких пределах.

Таким образом, даже при существенном варьировании порогового значения половинной фазы перенормированной энергии вблизи значения  $\pi/6$  общий сценарий трансформации зонной структуры рассматриваемой неупорядоченной системы остается неизменным. При этом на концентрационной зависимости порога подвижности присутствует такой интервал концентраций, внутри которого порог подвижности смещается пропорционально кубическому корню из концентрации примеси.

Работа частично поддерживалась и выполнялась в рамках Программ Фундаментальных исследований Отделения физики и астрономии НАН Украины (гранты № 0117U000236 и № 0117U000240).

1. А.М. Косевич, *Письма в ЖЭТФ* **1**, 42 (1965).
2. I.M. Lifshitz, S.A. Gredeskul, and L.A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems*, Wiley, N.Y. (1988).
3. M.A. Ivanov, V.M. Loktev, and Yu.G. Pogorelov, *Phys. Rep.* **153**, 209 (1987).
4. И.М. Лифшиц, *УФН* **13**, 483 (1964).

5. Y.V. Skrypnik and V.M. Loktev, *J. Phys.: Condens. Matter* **25**, 195301 (2013).
6. M.A. Ivanov, *Sov. Phys. Solid State* **12**, 1508 (1971).
7. F. Ducastelle, *J. Phys. C* **7**, 1975 (1974).
8. F. Ducastelle and F. Gautier, *J. Phys. F* **6**, 2039 (1976).
9. A.F. Ioffe and A.R. Regel, *Prog. Semicond.* **4**, 237 (1960).
10. Y. Skrypnik, *Phys. Rev. B* **70**, 212201 (2004).
11. Y. Skrypnik, *J. Non-Crys. Solids* **352**, 4325 (2006).
12. C.M. Soukoulis, E.N. Economou, G.S. Grest, and M.H. Cohen, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 575 (1989).
13. E.N. Economou and C.M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **40**, 7977 (1989).
14. A. Kirchner, K. Busch, and C.M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **57**, 277 (1998).

On the possibility to estimate the mobility edge position for charge carriers using single-particle averages

Y.V. Skrypnik and V.M. Loktev

Dependence of the mobility edge position on the impurity concentration that is realized under the electronic band structure transformation is considered in a disordered system described by the Lifshitz model. Evolution of the concentrational dynamics of the mobility edge position caused by varying the threshold parameter in the Ioffe–Regel criterion is analyzed. It is demonstrated that the critical impurity concentration, which triggers the band structure transformation, changes slightly with varying this parameter, while the corresponding mobility edge position at this concentration remains stable. Preconditions required for the existence of concentration intervals, within which the mobility edge is shifted in proportion to the cubic root of the impurity concentration, are discussed.

PACS: 71.23.An Theories and models; localized states;  
71.30.+h Metal–insulator transitions and other electronic transitions;  
72.80.Ng Disordered solids.

Keywords: disordered system, Lifshitz model, mobility threshold, Green’s function.