Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Н. Лихачев, В. А. Онищук, Принцип локального минимума энергии в донорно-акцепторных системах с малой компенсацией, *ТМФ*, 1997, том 111, номер 3, 452–461

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1021>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 52.23.180.231

26 апреля 2023 г., 12:48:05

В. Н. Лихачев*, В. А. Онищук*

ПРИНЦИП ЛОКАЛЬНОГО МИНИМУМА ЭНЕРГИИ В ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНЫХ СИСТЕМАХ С МАЛОЙ КОМПЕНСАЦИЕЙ

В донорно-акцепторных системах с малой компенсацией K изучены зарядовые состояния и структура одноакцепторных локальных комплексов (ОЛК) в зависимости от внешнего потенциала. Сформулирован критерий двухакцепторного локального комплекса (ДЛК), на базе которого получены стохастические уравнения для самосогласованных флуктуационных потенциалов (ФП) в ансамбле ОЛК и найдено выражение для уровня Ферми примесных электронов $\mu(K)$ через одноузельную функцию распределения ФП. В приближении “размазанных узлов” показано, что асимптотическое поведение $\mu(K)$ для малых K определяется средним размером ДЛК и эффектами самосогласованной экранировки зарядов в ОЛК.

1. ВВЕДЕНИЕ

Случайное распределение ионизованных примесей в донорно-акцепторных системах слаболегированных полупроводников с компенсацией приводит к появлению в них внутренних ФП, порожденных локальными нарушениями электронейтральности. Теоретическое изучение статистических свойств этих ФП и влияния их на равновесные и кинетические свойства легированных полупроводников было начато в работах Кнотека и Поллака [1, 2], Сринивасана [3], Куросавы и Сагимото [4], Шкловского и Эфроса с сотр. [5–10], Ли с сотр. [11]. Во всех этих работах рассматривалась проблема описания низкоэнергетических состояний донорно-акцепторной системы, состоящей из N случайно расположенных точечных донорных узлов, взаимодействующих с KN ($K < 1$) случайно расположенными отрицательно заряженными акцепторными узлами. При фиксированном положении всех узлов состояние электронной подсистемы описывается последовательностью $\{m_i\}$, $i = 1, 2, \dots, N$, где $m_i = 1$, если донор на i -м узле несет единственный положительный заряд, и $m_i = 0$, если этот узел нейтрален. Энергия системы в состоянии $\{m_i\}$ равна

$$E(\{m_i\}) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{m_i m_j}{r_{i,j}} - \sum_{i,\alpha} \frac{m_i}{r_{i,\alpha}} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{1}{r_{\alpha,\beta}}. \quad (1)$$

Здесь $r_{i,j}$, $r_{i,\alpha}$, $r_{\alpha,\beta}$ – расстояния между узлами донор-донор, донор-акцептор и акцептор-акцептор, соответственно. Энергии и длины в (1) безразмерны. Масштабом энергии является $e^2 n^{1/3} / \chi$, где e – заряд электрона, $n = N/V$ – плотность доноров в объеме

*Отдел электроники органических материалов Института биохимической физики РАН, Москва, Россия

V и χ – диэлектрическая проницаемость образца. За масштаб длины выбрано среднее расстояние между донорами $n^{-1/3}$. Таким образом, в безразмерных единицах среднее расстояние между донорами равно единице, а среднее расстояние между акцепторами составляет $K^{-1/3}$. Статистические свойства ФП изучаются на ансамблях образцов, генерируемых независимыми пуассоновскими распределениями донорных и акцепторных узлов в объеме V . Для усреднений по этим ансамблям будем использовать обозначения: $\overline{O}$ – для усреднения по донорам, $\langle O \rangle$ – для усреднения по акцепторам, например

$$\overline{O} = \frac{1}{V} \int_V d\vec{x}_1 \frac{1}{V} \int_V d\vec{x}_2 \dots \frac{1}{V} \int_V d\vec{x}_N O(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N). \quad (2)$$

При низких температурах система (1) находится в состояниях, близких к состоянию $\{m_i^0\}$, минимизирующему энергию (1). Эти состояния определяются из условия минимума функционала [8]:

$$H = E\{m_i\} + \mu \sum_1^N m_i. \quad (3)$$

С физической точки зрения μ есть уровень Ферми примесных электронов в донорно-акцепторной системе [8]. Функциональная зависимость $\mu(K)$ определяется условием электронейтральности образца в целом:

$$\left\langle \sum_1^N \overline{m}_i \right\rangle = KN. \quad (4)$$

Исследование свойств основного состояния системы (1) проводилось обычно средствами машинного моделирования [5–11]. Аналитических результатов в рассматриваемой проблеме мало, в частности, о зависимости уровня Ферми от K известно, что $\mu(0) = 0.99$ и что $\mu(K) = O((1 - K)^{-\frac{1}{3}})$ при $K \rightarrow 1$ [8]. Цель нашей работы – изучить поведение $\mu(K)$ при $K \rightarrow 0$ исходя из представлений о структуре основного состояния системы (1), сформулированных в [8]. Согласно этим представлениям ионизованные доноры можно найти только в непосредственной близости от акцепторных узлов: отрицательно заряженный акцептор вместе с соседними с ним донорами, находящимися в различных состояниях ионизации, образует локальный комплекс (ЛК). При малых K подавляющее число ионизованных доноров принадлежит ОЛК, концентрация их порядка K . Имеются также редкие события (их концентрация порядка K^2), когда акцепторы расположены близко и вместе с соседними донорами образуют ДЛК. Мы будем пренебрегать влиянием трехакцепторных ЛК с концентрациями порядка K^3 . В нашем рассмотрении мы уточняем картину ОЛК, данную в [8], в следующих трех пунктах.

Во-первых, события, связанные с появлением ОЛК, несущих заряды Q , должны образовывать по терминологии теории вероятностей [12] полную систему попарно несовместимых событий. Кроме того, если χ_Q – индикатор события, связанного с зарядом Q на ЛК, то при $\chi_Q = 1$ минимум функционала (3) должен достигаться на состояниях $\{m_i^0\}$ со степенью ионизации $Q = +1$.

Во-вторых, сделанное на с. 76 книги [8] утверждение, что вблизи одного акцептора не может существовать более двух ионизованных доноров, формально противоречит теореме Ирншоу [13]¹⁾. Согласно этой теореме в окрестности акцептора можно найти

¹⁾ На этот факт обратил наше внимание А. А. Овчинников.

конфигурации доноров с любой наперед заданной степенью ионизации и сколь угодно низкой электростатической энергией. Однако такие состояния могут оказаться *нерелевантными*, т.е. вероятность реализации на них минимума функционала (3) может равняться нулю. Для выяснения этого вопроса рассмотрим целое число $S \geq 0$ и ассоциируем с ним S индикаторов χ_Q с $Q = -1, 1, 2, \dots, S-1$, описывающих состояния ионизации множества S ближайших соседей акцептора. Предполагается в соответствии с первым замечанием, что эти индикаторы удовлетворяют соотношениям полноты и парной несовместности:

$$\sum_{-1}^{S-1} \chi_Q = 1, \quad \chi_{Q'} \chi_Q = \delta_{Q',Q} \chi_Q, \quad (5)$$

и что равенство $\chi_Q = 1$ означает, что минимум функционала (3) достигается на состоянии со степенью ионизации $Q = +1$. Число S назовем *релевантным*, если вероятность максимальной ионизации $P_{S-1} = \bar{\chi}_{S-1}$ отлична от нуля. *Структурой* ОЛК назовем максимальное из релевантных чисел S и ассоциируемые с этим числом подмножества ω_S , содержащие S ближайших соседей на реализациях пуассоновского ансамбля из N доноров.

В *третьих*, каждый ОЛК находится в ФП, создаваемом окружающими его ОЛК. Согласно [8] подавляющее число ОЛК имеют заряды $Q = 0$. Средний размер таких ОЛК, оцениваемый по расстоянию $(\bar{r}^2)^{1/2}$ до ближайшего донора, равен 0.59, тогда как среднее расстояние между ОЛК равно $K^{-1/3}$. Отсюда следует, что при малых K можно пренебречь изменением ФП на масштабах ОЛК, а при подсчете ФП сами ОЛК считать точечными зарядами или диполями. В работе [14] принималось, что ФП на i -м ЛК создается распределенными по Пуассону с плотностью K узлами локализации $\vec{X}_j$ случайно ориентированных диполей с пуассоновским распределением плеч $\vec{r}_j$:

$$V_i = \sum_{j=1, j \neq i}^{KN} \frac{\vec{R}_{i,j} \vec{r}_j}{R_{i,j}^3}, \quad \vec{R}_{i,j} = \vec{X}_i - \vec{X}_j. \quad (6)$$

Характеристическая функция распределения потенциала (6) на узле имеет вид [14]

$$\langle \exp(i\rho V_j) \rangle = \exp(-\gamma K |\rho|^3/2), \quad \gamma = 1.769, \quad (7)$$

из которого очевидно, что случайный потенциал (6) обладает бесконечными абсолютными моментами всех порядков начиная со второго. Причины этого кроются в сингулярности кулоновского потенциала на малых расстояниях и в допускаемой возможности сколь угодно близкого приближения источника ФП (узла $\vec{X}_j$) к точке наблюдения ФП (узлу $\vec{X}_i$). Очевидно, однако, что при сближении пары акцепторов на расстояние порядка среднего размера ДЛК необходимо рассматривать вместо двух точечных ОЛК один ДЛК с присущей ему структурой. Таким образом, из-за сингулярности кулоновского потенциала на малых расстояниях мы не можем пренебречь существованием ДЛК, следовательно, необходимо иметь критерий, отличающий пару ОЛК от одного ДЛК. Простейшим вариантом такого критерия, позволяющим ввести регуляризацию взаимодействия ОЛК на малых расстояниях, является следующий: *два ОЛК сливаются в один ДЛК, если их структуры имеют общие однородные узлы*. При подсчете моментов распределения потенциалов (6) и в иных аналогичных случаях следует использовать

сформулированный критерий, вводя под знаки средних соответствующие индикаторы. В данной работе мы будем использовать грубую форму критерия, средний размер ДЛК непосредственно включен во взаимодействие ОЛК:

$$\left(\frac{1}{R_{1,2}}\right)_{\text{reg}} = \frac{4\pi}{V} \sum_{\Lambda} \frac{\exp(i\vec{q}\vec{R}_{1,2})}{\vec{q}_+^2}, \quad (8)$$

здесь $\vec{q}_+^2 = \vec{q}^2 + \varepsilon^2$, где в конце вычислений $\varepsilon \rightarrow 0$. Сумма в (8) берется по всем $|\vec{q}| \leq \Lambda$, где Λ^{-1} имеет смысл среднего размера ДЛК. При $\Lambda \rightarrow \infty$ правая часть (8) переходит в разложение Фурье для кулоновского потенциала. Все моменты потенциала (6), вычисляемые по регуляризованному взаимодействию (8), конечны. Неаналитичность функции (7) формируется за счет поведения кулоновского взаимодействия ОЛК на малых расстояниях, т.е. именно там, где неприменимо представление о парах независимых ОЛК. В работе [14] распределение (7), модифицированное неточечностью диполей на масштабе среднего размера ОЛК, было использовано для вычисления $\mu(K)$. По приведенным выше соображениям результаты такого вычисления представляются нам ошибочными.

Кратко остановимся на содержании статьи. В разделе 2 рассмотрен вопрос о зарядовых состояниях и структуре ОЛК в зависимости от внешнего потенциала. В разделе 3 сформулированы уравнения для самосогласованных ФП в ансамбле ОЛК, получена связь уровня Ферми примесных электронов с распределением ФП и найдено асимптотическое поведение $\mu(K)$ при $K \rightarrow 0$ в приближении “размазанных узлов”. Решение системы уравнений для самосогласованных ФП, учитывающее эффекты экранировки зарядов ОЛК и их дискретность, будет дано в другом месте.

2. СТРУКТУРА ОДНОАКЦЕПТОРНЫХ ЛОКАЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ

В [8] сделано предположение о том, что ЛК состоит из акцептора, помещенного в начало координат, и двух донорных узлов – ближайших соседей этого акцептора. В такой структуре возможны зарядовые состояния с $Q = -1, 0, +1$. Индикаторы зарядовых состояний, построенные в [8], не удовлетворяют соотношениям полноты и взаимной несовместности (5) для соответствующих событий. Кроме того, в рамках приближения двух соседей невозможно решить вопрос о наличии состояний с зарядами $Q \geq 2$. Поэтому результаты [8] нуждаются в проверке. В данной работе мы рассмотрим возможность для ОЛК иметь структуру трех соседей и находиться во внешнем потенциале. Тем самым мы можем выяснить условия, при которых ОЛК имеет заряд $Q = 2$, а также выявить зависимость структуры ОЛК от внешнего поля.

Если $r_1 < r_2 < r_3$ – положения ближайших соседей, $r_{1,2}$, $r_{1,3}$ и $r_{2,3}$ – их взаимные расстояния, то в отсутствие внешнего потенциала ψ минимальные значения h_Q функционала (3) в зарядовых состояниях Q равны соответственно

$$\begin{aligned} h_{-1}(0) &= 0, & h_0(0) &= -\frac{1}{r_1} + \mu, \\ h_{+1}(0) &= \min(\varepsilon_{i,j}) + 2\mu, & h_{+2}(0) &= \varepsilon_{1,2,3} + 3\mu, \end{aligned} \quad (9)$$

где

$$\varepsilon_{ij} = -\frac{1}{r_i} - \frac{1}{r_j} + \frac{1}{r_{ij}}, \quad \varepsilon_{123} = -\sum_{i=1}^3 \frac{1}{r_i} + \sum_{i < j \leq 3} \frac{1}{r_{ij}}. \quad (9a)$$

Рис. 1

Во внешнем потенциале ψ имеем

$$h_Q(\psi) = h_Q(0) + Q\psi. \quad (10)$$

Из (9) и (10) следует, что разности $h_{Q_1} - h_{Q_2}$ зависят от μ, ψ только через комбинацию $U = \mu + \psi$. Индикатор события с зарядом Q равен

$$\chi_Q(U) = \prod_{Q_1 \neq Q} \theta(h_{Q_1}(\psi) - h_Q(\psi)), \quad (11)$$

где $\theta(x)$ — функция Хевисайда. Исходя из определений (9), (10) можно проверить, что условия (5) полноты и попарной несовместности для индикаторов (11) выполнены. Из построения (11) ясно также, что при $\chi_Q(U) = 1$ минимум функционала (3) достигается на состоянии со степенью ионизации $Q = +1$. Для вычисления вероятностей появления зарядовых состояний и среднего заряда $Q(U)$ необходимо усреднить индикаторы (11) по распределению Пуассона (2) для N доноров в объеме V :

$$P_Q(U) = \bar{\chi}_Q(U), \quad Q(U) = \sum_{Q=-1}^{+2} Q P_Q(U). \quad (12)$$

При усреднении индикаторов (11) необходимо учесть, что тройкой ближайших соседей может быть любая из $N(N-1)(N-2)$ троек ансамбля N донорных узлов в объеме $V = N$:

$$P_Q(U) = \iiint_{r_1 < r_2 < r_3} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \chi_Q(U) \exp\left(-\frac{4\pi}{3} r_3^3\right). \quad (13)$$

Рис. 2

Интегралы (13) вычислялись методом Монте-Карло при значениях U из интервала $(-1, 2)$. Результаты этих вычислений представлены на рис. 1 и 2. Особый интерес представляет поведение среднего заряда (12) в окрестности корня U_0 уравнения

$$Q(U) = 0. \quad (14)$$

В этой окрестности мы нашли

$$Q(U_0 + \psi) = -\alpha\psi - \frac{1}{2}\beta\psi^2, \quad \alpha = 0.23, \quad \beta = 1.26, \quad U_0 = 0.98, \quad (15)$$

$$P_{\pm 1}(U_0) = 0.013, \quad P_0(U_0) = 0.974, \quad P_{+2}(U_0) = 0.$$

Физический смысл корня U_0 уравнения (14) состоит в следующем. При $K \rightarrow 0$ можно положить равным нулю флуктуационный потенциал ψ , создаваемый на данном ОЛК окружающими его ОЛК, и пренебречь наличием ДЛК. Последнее означает, что усреднение по положениям доноров в условии электронейтральности (4) сводится к независимым усреднениям по структурам каждого из KN ОЛК. Результатом такого усреднения является усреднение $KNQ(\mu) = 0$, эквивалентное уравнению (14). Таким образом, U_0 есть не что иное как $\mu(0)$ – значение уровня Ферми примесных электронов в пределе $K \rightarrow 0$. Полученные нами значения для $\mu(0)$, вероятностей зарядовых состояний с $Q = 0, \pm 1$ и параметров α и β находятся в превосходном согласии с результатами [8]. Равенство нулю вероятности зарядового состояния с $Q = +2$ (см. (15)) означает, что при малых величинах внешних потенциалов ψ структуру ЛК действительно составляют два ближайших соседа. Однако уже при $\psi < -0.25 - \mu(0)$ для описания ЛК необходима структура трех ближайших соседей, поскольку в таких полях появляются ЛК с зарядом $Q = +2$. Из рис. 1 видно, что вероятность $P_0(U)$ изменяется плавно

с изменением U , тогда как вероятности заряженных состояний возникают и исчезают скачкообразно. Этот факт должен иметь значение для теории самосогласованных ФП в пограничных двойных слоях.

3. САМОСОГЛАСОВАННЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ФЛУКТУАЦИОННЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

Здесь мы сформулируем самосогласованные уравнения, связывающие значения ФП на ОЛК. Поскольку при малых K эти ФП малы, то структура ОЛК состоит из двух ближайших соседей. Индикаторы χ_Q^j зарядовых состояний ОЛК на узле $\vec{X}_j$ и его заряд зависят от ФП ψ_j и координат ω_j структуры этого ОЛК:

$$Q^j = \sum_Q Q \chi_Q^j(\mu + \psi_j, \omega_j). \quad (16)$$

Самосогласованные уравнения для ФП имеют вид

$$\psi_i = \sum_{j \neq i} \left(\frac{Q^j}{R_{i,j}} + \chi_0^j \frac{\vec{r}_j \vec{R}_{i,j}}{R_{i,j}^3} \right), \quad 1 \leq i \leq KN. \quad (17)$$

Узлы акцепторов $\vec{X}_j$ распределены в объеме V в соответствии с распределением Пуассона, $\vec{r}_j$ – положения их ближайших соседей – доноров. Кулоновские потенциалы, входящие в (17), регуляризованы согласно (8). Пренебрегая ДЛК, запишем условие электронейтральности (4) в виде

$$\frac{1}{KN} \sum_{j=1}^{KN} \langle Q^j(\mu + \psi_j, \omega_j) \rangle = 0. \quad (18)$$

Уравнение (18) с помощью функции распределения ФП на одном узле

$$F(\psi) = \frac{1}{KN} \sum_{j=1}^{KN} \langle \delta(\psi - \psi_j) \rangle \quad (19)$$

и среднего заряда (12) можно записать в виде

$$\int Q(\mu + \psi) F(\psi) d\psi = 0. \quad (20)$$

При выводе (20) из (18) проведена факторизация средних:

$$\overline{\delta(\psi - \psi_j) \chi_Q^j(\mu + \psi_j)} \cong \overline{\delta(\psi - \psi_j)} P_Q(\mu + \psi). \quad (21)$$

Основания для подобного приближения таковы. Из (16) и (17) следует, что ψ_i не зависит от ω_i явно. Неявная зависимость возникает за счет поляризации i -м ОЛК комплексов j ($j \neq i$) и последующего влияния поляризации этих комплексов на сам i -й ОЛК.

Простейшая оценка показывает, что ФП без учета таких полей реакции имеют порядок $K^{1/2}$ (см. (25) и (29)), тогда как поля реакции²⁾ имеют порядок $K^{2/3}$. Следовательно, при $K \rightarrow 0$ этими полями можно пренебречь и рассматривать ψ_j и ω_j как независимые случайные величины. Из-за наличия в уравнениях (17) микроскопических зарядов (16) эти уравнения не поддаются анализу без следующих существенных упрощений. Во-первых, поскольку при малых K индикаторы нейтральных состояний ЛК близки к единице (см. (15)), мы примем их равными единице в уравнениях (17). Тогда вклад от нейтральных ЛК задается регуляризованными потенциалами (6). При этом потенциалы (6) следует рассматривать как внешние случайные поля, не зависящие от структур заряженных ОЛК. Во-вторых, следуя методу среднего поля, заменим в уравнениях (17) микроскопические заряды их усредненными по структурам ω_j величинами и воспользуемся приближенной независимостью переменных ω_j и ψ_j . В результате таких упрощений уравнения для ФП примут вид

$$\psi_i = \sum_{j \neq i} \frac{Q(\mu + \psi_j)}{R_{i,j}} + V_i, \quad i = 1, 2, \dots, KN. \quad (22)$$

Решение системы (20), (22) ищем методом последовательных приближений. В нулевом приближении имеем результат раздела 2:

$$\psi_i^{(0)} = 0, \quad F^{(0)}(\psi) = \delta(\psi), \quad \mu^{(0)} = \mu(0). \quad (23)$$

Подставляя нулевое приближение $\mu(0)$ в систему (22) и линеаризуя заряды по малым ψ в соответствии с (15), имеем систему уравнений первого приближения:

$$\psi_i + \alpha \sum_{j \neq i} \frac{\psi_j}{R_{i,j}} = V_i, \quad 1 \leq i \leq KN. \quad (24)$$

Поправка первого приближения $\delta\mu = \mu^{(1)} - \mu^{(0)}$ получается подстановкой разложения (15) для среднего заряда в условие электронейтральности (20):

$$\delta\mu = -\left(\frac{\beta}{2\alpha}\right) \int \psi^2 F^{(1)}(\psi) d\psi = -\left(\frac{\beta}{2\alpha}\right) \frac{1}{KN} \sum_{j=1}^{KN} \langle \overline{\psi_j^2} \rangle. \quad (25)$$

Потенциалы, входящие в правую часть (25), — это решения системы (24), усредненные по положениям акцепторов и по параметрам потенциалов Хольцмарка (6). Для вычисления поправки первого приближения $\delta\mu$ необходимо разработать асимптотическую теорию возмущений для решения стохастической системы уравнений (24) при $K \rightarrow 0$, учитывающую как эффекты самосогласованной экранировки зарядов ЛК, так и дискретность распределения ЛК. Решение этой задачи будет дано в другом месте. Здесь же

²⁾ Оценку поля реакции $\delta\varphi_i^j$, наведенного узлом j на узле i , можно получить, рассмотрев реакцию на изменение $\delta Q_i = 1$. Тогда имеем

$$\delta\psi_j = O(K^{1/3}), \quad \delta Q_j = \alpha\delta\psi_j = O(K^{1/3}), \quad \delta\varphi_i^r = O(\delta Q_j K^{1/3}) = O(K^{2/3}).$$

мы приведем оценку $\delta\mu$, используя приближение “размазанных узлов”. В этом приближении ФП является непрерывной функцией пространственной координаты, элемент объема $d\vec{x}$ содержит $K d\vec{x}$ узлов, а система (24) заменяется интегральным уравнением

$$\psi(\vec{x}) + \alpha K \int \frac{\psi(\vec{y}) d\vec{y}}{|\vec{x} - \vec{y}|} = V(\vec{x}) \quad (26)$$

со стохастической правой частью

$$V(\vec{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\Lambda} e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}} V_{\vec{q}}, \quad V_{\vec{q}} = \frac{4\pi i}{q_+^2} \sum_{j=1}^{KN} (\vec{q} \vec{r}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{X}_j}, \quad (27)$$

здесь $V_{\vec{q}}$ — фурье-компонента потенциала Хольцмарка (6). Решением уравнения (26) является экранированный потенциал Хольцмарка (6)

$$\psi_{\vec{q}} = \frac{\vec{q}^2 V_{\vec{q}}}{\vec{q}^2 + q_0^2}, \quad (28)$$

где $q_0^2 = 4\pi\alpha K$.

Вычисляя с помощью (27), (28) дисперсию $\langle \overline{\psi^2(x)} \rangle$ и подставляя ее в (25), получим следующую асимптотическую формулу приближения “размазанных узлов”:

$$\delta\mu = -\frac{4\beta}{3\alpha} K \overline{r_i^2} \left[\Lambda - \frac{3\pi}{4} q_0 + 2 \left(\frac{q_0^2}{\Lambda} \right) + O \left(\frac{q_0^4}{\Lambda^2} \right) \right], \quad (29)$$

здесь $\overline{r_1^2} = 0.35$, а значения постоянных α и β даны в разложении (15). Член порядка K в (29) порожден флуктуациями потенциала Хольцмарка (6). Если пренебречь размером ДЛК, то этот вклад расходится. Члены порядков $K^{3/2}$, K^2 связаны с эффектами самосогласованной экранировки зарядов в ОЛК.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Сформулировано понятие структуры ОЛК. Исследованы зарядовые состояния и структура ОЛК в зависимости от внешнего потенциала ψ . При $\psi \cong 0$ структура ОЛК сводится к двум ближайшим соседям. В этой области потенциалов зарядовые характеристики ОЛК находятся в хорошем согласии с результатами [8]. В области отрицательных внешних потенциалов имеется тенденция к делокализации структуры ОЛК: при $\mu(0) + \psi < -0.25$ с вероятностью, отличной от нуля, возникают зарядовые состояния с $Q = +2$, описание которых возможно только в рамках структуры из трех соседей. Обнаружено, что с изменением внешнего потенциала возникновение и исчезновение заряженных состояний ОЛК носят скачкообразный характер. Этот факт может иметь значение для теории пограничного двойного слоя.

На базе представлений о структуре ОЛК сформулирован критерий ОЛК и получена стохастическая система самосогласованных уравнений для ФП. В приближении “размазанных узлов” найдена качественная оценка поведения уровня Ферми примесных электронов $\mu(K)$ при $K \rightarrow 0$. Коэффициент при главном по K члене формируется критерием ДЛК. Таким образом, несмотря на малую концентрацию ДЛК их структура

определяет главный член асимптотического разложения для $\mu(K)$. Этот парадоксальный факт является следствием сингулярного характера кулоновского взаимодействия дипольных ОЛК на малых расстояниях. Второй член асимптотического разложения ($\sim K^{3/2}$) имеет неаналитическое поведение при $K \rightarrow 0$ и возникает за счет процессов самосогласованной экранировки кулоновского взаимодействия заряженных ЛК на больших масштабах. Этот член остается конечным при $\Lambda \rightarrow 0$. Для вычисления $\mu(K)$ на основе полученной стохастической системы уравнений (24) необходимо разработать асимптотическую теорию возмущений по малым K , способную учитывать как дискретность расположения ОЛК, так и эффекты самосогласованной экранировки зарядов в ОЛК. Решение этой задачи будет опубликовано в другом месте. Мы надеемся также, что на основе сформулированного в работе критерия ДЛК станет возможной разработка теории, в которой характеристики донорно-акцепторной системы будут свободны от феноменологического параметра Λ .

Авторы выражают благодарность член-корр. РАН А. А. Овчинникову и проф. В. Я. Кривнову за интерес к работе в процессе ее выполнения и за обсуждение результатов. Мы благодарны участникам семинара отдела электроники органических материалов Института биохимической физики за обсуждение результатов.

В процессе выполнения работа поддерживалась грантом МНТЦ № 015 и частично грантом РФФИ 96-03-32279а/520.

Список литературы

- [1] *M. Pollak*. Disc. Faraday Soc. 1970. V. 50. P. 13.
- [2] *M. L. Knotek, M. Pollak*. J. Non-Cryst. Solids. 1972. V. 8–10. P. 505.
- [3] *G. Srinivasan*. Phys. Rev. B. 1971. V. 4. P. 2581.
- [4] *T. Kurosawa, H. Sugimoto*. Progr. Theor. Phys. Suppl. 1975. № 57. P. 217.
- [5] *A. L. Efros, B. I. Shklovskii*. J. Phys. C. 1975. V. 8. P. L49.
- [6] *A. L. Efros*. J. Phys. C. 1976. V. 9. P. 2021.
- [7] *S. D. Baranovskii, A. L. Efros, B. I. Gelmont, B. I. Shklovskii*. J. Phys. C. 1979. V. 12. P. 1023.
- [8] *Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос*. Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука, 1979.
- [9] *С. Д. Барановский, Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос*. ЖЭТФ. 1980. Т. 78. С. 395.
- [10] *A. L. Efros, Nguen Van Lien, B. I. Shklovskii*. J. Phys. C. 1979. V. 12. P. 1869.
- [11] *J. H. Davies, P. A. Lee, T. M. Rice*. Phys. Rev. B. 1984. V. 29. P. 4260.
- [12] *Ю. А. Розанов*. Теория вероятностей, случайные процессы и математическая статистика. М.: Наука, ФМЛ, 1989.
- [13] *И. Е. Тамм*. Основы теории электричества. М.: ТТЛ, 1957.
- [14] *Ю. Я. Ткач, Е. В. Ченский*. ЖЭТФ. 1992. Т. 102. С. 1683.

Поступила в редакцию 7.X.1996 г.

V. N. Likhachev, V. A. Onischuk

PRINCIPLE OF ENERGY LOCAL MINIMUM FOR DONOR-ACCEPTOR SYSTEMS WITH LOW COMPENSATION

The charged states and structures of one-acceptor local complexes (OLC) are studied as functions of external potentials for the donor-acceptor systems with low compensations K . The criterium of a two-acceptor local complex (TLC) is formulated. It is used to formulate the stochastic equations for selfconsistent fluctuating potentials (FP) in the OLC-ensemble and to derive an expression for the Fermi-level $\mu(K)$ of impurity electrons via one-site distribution of FP. It is shown in the approximation of the "smeared sites" that an asymptotic behavior $\mu(K)$ for small K is built by the average size of TLC and by the selfconsistent screening effects in the OLC-ensemble.