

## ФЛУКТУАЦИОННЫЕ СОСТОЯНИЯ И ОПТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ С СИЛЬНЫМ ИЗОЭЛЕКТРОННЫМ ВОЗМУЩЕНИЕМ

А. А. Клочихин

*Институт ядерной физики Российской академии наук  
188350, Гатчина, С.-Петербург, Россия*

С. А. Пермогоров, А. Н. Резницкий

*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук  
194021, С.-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 30 июня 1998 г.

Предложен подход для описания плотности флуктуационных состояний в неупорядоченном твердом растворе с сильным возмущением, вносимым изоэлектронным замещением, в области концентраций центров притяжения ниже порога протекания по узлам разупорядоченной подрешетки. Для оценки числа локализованных состояний использованы результаты решеточной теории протекания. Описан способ выделения в рамках континуальной теории протекания «излучающих» состояний флуктуационного хвоста, формирующих полосу люминесценции при слабом возбуждении. Установлено положение полосы излучающих состояний относительно полосы поглощения основного состояния экситона и порога подвижности системы. Развитый подход используется для описания оптических спектров твердого раствора  $ZnSe_{1-c}Te_c$ , который в области малых концентраций  $Te$  может быть охарактеризован как система с сильным рассеянием. Учтено взаимодействие экситона с фононами и показано хорошее соответствие вычисленного и наблюдаемого спектров люминесценции локализованных экситонов.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Широкозонные твердые растворы групп II–VI активно используются при создании современных гетероструктур. Известно, что изменение оптических характеристик твердого раствора по сравнению с соединениями, образующими этот раствор, определяется двумя основными эффектами — концентрационным изменением ширины и размытием края запрещенной зоны за счет образования флуктуационного хвоста локализованных состояний.

Описание спектра электронных состояний кристалла в отсутствие дальнего порядка является важной задачей физики неупорядоченных систем и сохраняет актуальность на протяжении многих лет. Обзоры ранних работ, охватывающие основные направления в этой области, можно найти в [1–4]. Как особый случай можно выделить предельно малые концентрации примесных атомов,  $c \ll 1$ , когда возмущение в узле решетки превышает критическое значение и приводит к появлению отщепленного состояния. Эта задача была рассмотрена в работе [5] (см. также более поздние публикации [6, 7]) для электронных состояний и в работе [8] для колебательной задачи. При конечных концентрациях предпринимались попытки решить задачу о спектре примесных состояний как в приближении когерентного потенциала [9], так и с использованием более сложных подходов [10, 11]. Неупорядоченные твердые растворы кристаллов образуют круг

систем, где учет статистики заполнения узлов решетки оказывается критически существенным для понимания закономерностей распределения по энергиям локализации так называемых флуктуационных состояний хвоста. Значительное внимание было уделено в этой связи исследованию случайного потенциала, который характеризуется статистикой гауссовского белого шума [12–14], что, однако, не соответствует физической природе твердых растворов [15]. Ряд аспектов задачи о флуктуационных состояниях хвоста при случайном распределении по узлам решетки атомов двух сортов рассмотрен в работах [16, 17].

Целью данной работы является развитие систематического подхода к задаче вычисления плотности флуктуационных состояний неупорядоченных твердых растворов для описания их оптических спектров поглощения и люминесценции в случае, когда возмущение электронных состояний, вносимое атомом замещения, нельзя считать малым, и локализованное состояние может быть образовано небольшим числом атомов замещения (предел сильного рассеяния). Случай слабого рассеяния рассмотрен в работах [18, 19].

В следующем разделе мы найдем плотность локализованных состояний, используя для этой цели трехмерную двухкомпонентную модель, описываемую однозонным гамильтонианом с диагональным беспорядком, возникающим в результате случайного заполнения узлов кристаллической решетки атомами двух сортов  $A$  и  $B$ , а также континуальный аналог этой модели. Мы ограничимся областью малых концентраций атомов  $A$ , представляющих собой центры притяжения,  $c < p_c$ , где  $p_c$  — критическая концентрация задачи протекания по узлам подрешетки, в которой располагаются атомы замещения. В случае сильного рассеяния в твердых растворах с диагональным беспорядком флуктуационные состояния могут быть образованы отдельными атомами замещения и относительно небольшими их кластерами, образующимися при случайном распределении атомов.

В третьем разделе работы вычисляется контур бесфононной полосы люминесценции. В рамках данной задачи возможность оптической рекомбинации ограничивается временем жизни экситона по отношению к переходу (туннелированию) в нижележащие состояния хвоста флуктуационных состояний, сопровождаемому излучением фононов. Для описания люминесценции необходимо найти распределение по энергии достаточно изолированных состояний, для которых отсутствуют или сильно ограничены каналы такой релаксации. Ограничение здесь обусловлено конечностью радиуса туннелирования. Из общего числа состояний хвоста изолированными являются только те, которые отделены от соседей расстоянием, превышающим этот радиус. В общем случае задача нахождения распределения по энергии пространственно изолированных состояний представляет собой один из аспектов квантовой теории протекания [2–4, 20–29]. Изолированные состояния в решеточных моделях изучались в работах [30–36]. При учете конечности радиуса туннелирования в рассматриваемой задаче оказывается возможным использование континуальной теории протекания по перекрывающимся сферам [30–36]. Используя результаты этой теории мы можем разделить флуктуационные состояния на состояния одиночных (невзаимодействующих) кластеров, состояния суперкластеров (комплексов, состоящих из взаимодействующих кластеров) и состояния протекательного кластера. Пространственно изолированными мы будем считать состояния одиночных кластеров и основные состояния суперкластеров.

Распределение состояний по суперкластерам позволяет установить положение бесфононной полосы люминесценции относительно максимума бесфононной полосы по-

глощения основного состояния экситона и порога подвижности.

В четвертом разделе описывается влияние взаимодействия экситонов как с оптическими, так и с акустическими фононами на спектры поглощения и люминесценции локализованных экситонов. В интересующей нас области концентраций предполагается, что электрон взаимодействует с усредненным по флуктуационной яме распределением плотности дырок. Предварительные результаты учета экситон-фононного взаимодействия приведены в работе [37].

В последнем разделе приводятся результаты численных расчетов спектров поглощения и люминесценции для твердого раствора  $ZnSe_{1-c}Te_c$  при  $c = 0.15$ , который при этой концентрации может служить хорошей моделью системы с сильным рассеянием, и проводится сопоставление контуров вычисленной и наблюдаемой полос люминесценции.

## 2. СПЕКТР ФЛУКТУАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ

В рассматриваемой модели предполагается, что макроскопический объем  $V$  твердого раствора, состоящий из  $N$  узлов кристаллической решетки, случайным образом заполняется атомами двух сортов:  $A$  и  $B$ . Средние числа атомов  $A$  и  $B$  равны соответственно  $N_A = cN$  и  $N_B = (1 - c)N$ , где  $c$  — концентрация атомов  $A$ . Однозонный гамильтониан этой системы записывается в виде

$$H = - \sum_{n,m} \Psi_n W_m (\Psi_{n+m} - \Psi_n) + \sum_n E_n \Psi_n^2, \quad (1)$$

где  $\Psi_n$  будем считать вещественными. Диагональный матричный элемент  $E_n$  принимает значение  $E_A$ , если узел занят атомом  $A$ , и  $E_B$  в противоположном случае. В предельных случаях  $c = 0$  и  $c = 1$  гамильтониан (1) сводится к гамильтониану совершенного кристалла соответственно  $B$  или  $A$ . При этом все  $E_n$  заменяются на  $E_n = E_A$  или  $E_n = E_B$ . В представлении плоских волн матричный элемент гамильтониана в этом случае принимает вид

$$H_q^\alpha = \varepsilon_q + E_\alpha,$$

где  $\alpha$  есть  $A$  или  $B$  и соотношение

$$\varepsilon_q = W_0 - W_q \quad (2)$$

дает дисперсию электронной зоны.

### А. Представление функции Грина

Функция Грина совершенного кристалла  $A$  или  $B$  записывается как

$$G_{nm}^\alpha(\epsilon) = \{\epsilon \mathbf{I} - \mathbf{H}^\alpha\}_{nm}^{-1} = \frac{1}{N} \sum_q \frac{e^{iq(R_n - R_m)}}{\epsilon - \varepsilon_q - E_\alpha}, \quad (3)$$

$R_n$  — радиус-вектор узла решетки  $n$ . При случайном заполнении узлов решетки атомами двух сортов функция Грина для каждой реализации зависит от состава и расположения атомов

$$G_{nm}(\omega) = \{\omega I - H^{vc} - \Delta\}_{nm}^{-1}, \quad (4)$$

где  $I$  — единичная матрица, а матрицы  $H^{vc}$  и  $\Delta$  определены соотношениями

$$H_{nm}^{vc} = W_{n-m} - (W_0 - E_G)_n \delta_{nm}, \quad \Delta = \Delta_n \delta_{nm}, \quad (5)$$

$E_G$  — положение края рассматриваемой зоны.

Положение дна зоны твердого раствора в приближении виртуального кристалла связано со средним значением  $E_n$  в узле:

$$\langle E \rangle_G = cE_A + (1 - c)E_B. \quad (6)$$

Энергия  $\omega$  также отсчитывается от положения дна зоны  $E_G$ , причем  $\omega > 0$  для локализованных состояний. Диагональные матричные элементы потенциала  $\Delta$  можно представить как

$$\Delta_n = E_n - E_G, \quad (7)$$

где величина  $\Delta_n$  зависит теперь и от концентрации твердого раствора.

Решение задачи вычисления собственных функций и собственных значений гамильтониана кристалла при неупорядоченном, но фиксированном расположении атомов двух сортов получается в результате диагонализации матрицы ранга  $N$ , каждая строка которой имеет вид

$$\omega_\Lambda \varphi_\Lambda^A(\mathbf{n}) + \sum_m (H_{nm}^{vc} - \Delta_n \delta_{nm}) \varphi_\Lambda^A(\mathbf{m}) = 0. \quad (8)$$

Спектр неупорядоченной системы находится как результат усреднения, т. е. суммирования спектров, соответствующих различным реализациям, с весовыми множителями, равными вероятностям каждой реализации, и физический интерес представляет усредненная по всем возможным вариантам заполнения узлов мнимая часть функции Грина.

Выражение для плотности состояний при фиксированном наборе значений  $\Delta_n$  и данном значении квантовых чисел, который мы обозначили  $\Lambda$ , имеет вид

$$\rho_{\Delta, \Lambda}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_\Lambda \sum_n |\varphi_\Lambda^A(\mathbf{n})|^2 \exp\{-i[\omega I - H^{vc} - \Delta]_{\Lambda\Lambda} \tau_\Lambda\}, \quad (9)$$

где

$$[\omega I - H^{vc} - \Delta]_{\Lambda\Lambda} = \sum_{n,m} \varphi_\Lambda^A(\mathbf{n}) [\omega \delta_{nm} + H_{nm}^{vc} - \Delta_n \delta_{nm}] \varphi_\Lambda^A(\mathbf{m}). \quad (10)$$

Полная усредненная плотность состояний записывается в виде суммы по всем  $\Lambda$  и по всем реализациям  $\Delta$  с учетом их веса  $P_\Delta$ :

$$\rho(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\Delta} P_{\Delta} \sum_{\Lambda} d\tau_{\Lambda} \sum_n |\varphi_{\Lambda}^A(\mathbf{n})|^2 \exp\{-i[\omega I + H^{vc} - \Delta]_{\Lambda\Lambda} \tau_{\Lambda}\}. \quad (11)$$

Следовательно, мы должны перебрать все возможные варианты заполнения решетки и найти для каждого из них собственные значения и собственные функции. Интегрирование в (11) по  $\tau_\Lambda$  можно выполнить в общем виде, что дает выражение для  $\rho(\omega)$  в виде

$$\rho(\omega) = \sum_{\Delta} P_{\Delta} \sum_{\Lambda} \sum_{\mathbf{n}} |\varphi_{\Lambda}^{\Delta}(\mathbf{n})|^2 \delta(\omega - \omega_{\Lambda}^{\Delta}). \quad (12)$$

Мы обозначили собственное значение уравнения (8) для фиксированного набора  $\Delta_n$  как  $\omega_{\Lambda}^{\Delta}$ . Функции  $\varphi_{\Lambda}^{\Delta}$  для связанных состояний всегда могут быть выбраны нормированными на единицу.

Полученное выражение является строгим определением плотности состояний неупорядоченной системы, описываемой гамильтонианом (1), т.е. двухкомпонентного твердого раствора  $A_c B_{1-c}$ .

### В. Флуктуационные состояния кластеров. Правило сумм

В данной работе мы рассмотрим ситуацию, когда концентрация атомов  $A$  меньше критической  $p_c$  для задачи протекания по узлам анионной подрешетки  $c < p_c \approx 0.2$ . При этом условия атомы  $A$  могут образовывать только кластеры конечных размеров. Если возмущение, вносимое кластером, состоящим из  $n$  атомов  $A$ , превышает критическую величину и приводит к отщеплению состояния от дна зоны виртуального кристалла, то и все кластеры более высокого порядка также будут отщеплять локализованные состояния.

Мы предположим в качестве нулевого приближения, что волновые функции отдельных кластеров не перекрываются, и рассмотрим получающийся в результате спектр отщепленных состояний. При таком подходе среда за пределами кластера описывается приближением виртуального кристалла. В этом приближении спектр плотности состояний представляет собой набор  $\delta$ -образных пиков, соответствующих отдельным кластерам. Далее мы учтем флуктуации состава в низшем порядке теории возмущений, а потом применим вариационную процедуру для отыскания наиболее вероятных флуктуаций. При этом мы получим размытие отдельных пиков и общее сглаживание структуры в спектре плотности состояний. В то же время структурные особенности спектра могут быть наблюдаемы в области предельно низких концентраций.

#### 1. Приближение изолированных кластеров

Для любого из кластеров в этом приближении уравнение движения можно представить в виде

$$\{\mathbf{I} + \mathbf{g}^{vc}(\omega) \Delta\}_{nm} \varphi_{\Lambda}^{\Delta}(\mathbf{m}) = 0, \quad (13)$$

где  $\mathbf{n}$  и  $\mathbf{m}$  пробегает значения, соответствующие координатам узлов, занятых кластером, и  $\mathbf{g}^{vc}(\omega)$  — фрагмент матрицы функции Грина, ограниченный областью, занятой кластером. Используя подход, развитый в теории динамики примесной решетки [38], найдем собственные функции и собственные значения матрицы  $[\mathbf{g}^{vc}(\omega) \Delta]$ , ранг которой равен размеру кластера

$$\sum_{\mathbf{m} \in \mathcal{V}_{st,\kappa}} [\mathbf{g}^{vc}(\omega) \Delta]_{\mathbf{n},\mathbf{m}} \Phi^{\sigma}(\mathbf{m}, \omega) = \lambda^{\sigma}(\omega) \Phi^{\sigma}(\mathbf{n}, \omega), \quad (14)$$

где суммирование проводится по узлам, занятым кластером. Получаемые таким образом собственные функции образуют полную ортонормированную систему

$$\sum_{\sigma} \Phi^{\sigma}(\mathbf{m}, \omega) \Phi^{\sigma}(\mathbf{n}, \omega) = \delta_{\mathbf{nm}}, \quad (15)$$

С помощью этих собственных значений и собственных функций мы можем записать матрицу  $\{\mathbf{I} + \mathbf{g}^{vc}(\omega) \Delta\}^{-1}$  в виде

$$\{\mathbf{I} + \mathbf{g}^{vc}(\omega) \Delta\}_{\mathbf{nm}}^{-1} = \sum_{\sigma} \frac{\Phi^{\sigma}(\mathbf{n}, \omega) \Phi^{\sigma}(\mathbf{m}, \omega)}{1 - \lambda_{\sigma}(\omega)}. \quad (16)$$

В данном приближении локализованное состояние отщепляется, если хотя бы для одного из  $\sigma$  существует такое значение  $\omega = \omega_{loc} > 0$ , что выполняется равенство

$$\lambda_{\sigma}(\omega_{loc}) = 1. \quad (17)$$

В первую очередь всегда отщепляется состояние с безузельной волновой функцией, оно имеет наиболее глубокое значение энергии локализации и дает наибольший вклад в оптические процессы.

Волновые функции отщепленных локализованных состояний, нормированные на единицу, имеют, соответственно, вид

$$\phi^{\sigma}(\mathbf{n}) = \sum_{\mathbf{m} \in \mathcal{C}_{st,\kappa}} G_{\mathbf{n},\mathbf{m}}^{vc}(\omega) \Phi_{\mathbf{m}}^{\sigma}(\omega) \left| \sum_{\mathbf{n},\mathbf{m} \in \mathcal{C}_{st,\kappa}} \Phi_{\mathbf{n}}^{\sigma} G_{\mathbf{n},\mathbf{m}}^{vc}(\omega) \Phi_{\mathbf{m}}^{\sigma} \right|^{-1/2}, \quad (18)$$

где  $G_{\mathbf{n},\mathbf{m}}^{vc}(\omega) = \partial G_{\mathbf{n},\mathbf{m}}^{vc}(\omega) / \partial \omega$ , а суммирование ведется по узлам, занятым кластером.

Пусть вероятность появления кластера, состоящего из  $s$  атомов сорта  $A$  и имеющего периметр из  $t$  атомов  $B$ , есть

$$g_{st} c^s (1 - c)^t, \quad (19)$$

где  $g_{st}$  есть число кластеров, имеющих одно и то же количество атомов сорта  $A$ , одинаковое число атомов  $B$  по периметру, но образующих различные пространственные конфигурации. Учитывая только безузельные состояния, мы можем написать вместо выражения (11) для усредненной плотности состояний

$$\rho(\omega) = \sum_s \sum_{\kappa=1}^{g_{st}} \sum_{\mathbf{n}} |\phi_{\mathbf{n}}^{st,\kappa}|^2 c^s (1 - c)^t \delta(\omega - \omega_{loc}^{st,\kappa}). \quad (20)$$

Здесь мы пронумеровали собственные функции и собственные значения по их принадлежности к кластеру. Интегральная плотность состояний, отщепившихся от дна зоны виртуального кристалла, в расчете на один узел запишется тогда как

$$\mathcal{N}(0) = \int_0^{E_L} \rho(\omega) d\omega = \sum_{st,\kappa} g_{st} c^s (1 - c)^t = \sum_s n_s(c), \quad (21)$$

т. е. совпадает с полным числом кластеров в расчете на один узел [39]. Для вычисления количества состояний, имеющих энергию локализации превышающую  $\omega$ , необходимо

ограничить нижний предел интегрирования в (21) этой величиной, а суммирование в правой части этого выражения начать с такого размера кластера  $s$ , который приводит к появлению состояния с энергией локализации равной  $\omega$ . Максимальное число отщепившихся состояний всех типов не может превысить количество центров притяжения, т. е. величины

$$N_A = N \sum_{s=1}^{\infty} n_s(c) s. \quad (22)$$

Эта оценка применима в предельном случае сильного рассеяния.

Суммы вида (21) быстро сходятся во всем интервале концентраций. Поскольку функции  $n_s(c)$  известны для многих решеток, по крайней мере, для нескольких низших значений  $s$ , полученное правило сумм (21) может быть использовано для оценки количества состояний, отщепившихся от дна экситонной зоны кристалла. Так, для кубической гранецентрированной решетки в работах [20, 21] получено, что

$$n_1(c) = c(1-c)^{12}, \quad n_2(c) = 12c^2(1-c)^{18}, \quad n_3(c) = c^3 [24(1-c)^{23} + 126(1-c)^{24}]. \quad (23)$$

Наша оценка для вероятности появления кластера из четырех атомов дает

$$n_4(c) \approx 10^3 c^4 (1-c)^{30}. \quad (24)$$

Эти функции могут быть использованы в соответствии с полученным правилом сумм (21) для оценки числа состояний, образующихся ниже дна зоны виртуального кристалла. Дальнейшая полезная информация может быть получена, если известна хотя бы приближенно зависимость энергии локализации от числа атомов  $A$  в кластере. Это позволяет судить как о величине и поведении интегральной плотности состояний, так и о характере изменения плотности состояний.

## 2. Влияние флуктуаций на состояния кластеров. Теория возмущений

До сих пор мы предполагали, что кластеры окружены однородной средой, представляющей собой виртуальный кристалл. Для того чтобы оценить роль флуктуаций, подставим найденные решения (18) в выражение (11) и найдем первую исчезающую поправку к плотности состояний за счет отклонения от приближения виртуального кристалла. В результате получаем

$$\rho(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \sum_s \sum_{\kappa=1}^{g_{st}} \sum_n |\phi_n^{st,\kappa}|^2 c^s (1-c)^t \times \\ \times \exp \left\{ -i(\omega - \omega_{loc}^{st,\kappa})\tau \right\} \left\langle \exp \left\{ -i \sum_{n \in \mathcal{C}_{st,\kappa}} \Delta_n |\phi_n^{st,\kappa}|^2 \tau \right\} \right\rangle, \quad (25)$$

где угловые скобки означают усреднение по всем возможным реализациям заполнения всей решетки за исключением одного выделенного кластера, а суммирование в экспоненте проводится по узлам решетки за пределами кластера. При случайном заполнении в каждом из них с вероятностью  $c$  оказывается атом  $A$  и с вероятностью  $(1-c)$  — атом  $B$ . Принимая во внимание, что усредняемая экспонента разбивается на произведение экспонент, каждая из которых усредняется независимо, получаем

$$\left\langle \exp \left\{ -i \sum_{n \in \mathcal{C}_{st,\kappa}} \Delta_n |\phi_n^{st,\kappa}|^2 \tau \right\} \right\rangle = \prod_{n \in \mathcal{C}_{st,\kappa}}^N \left\{ c \exp(-i\Delta_A |\phi_n^{st,\kappa}|^2 \tau) + (1-c) \exp(-i\Delta_B |\phi_n^{st,\kappa}|^2 \tau) \right\}. \quad (26)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \Delta_A &= E_A - E_G = -(1-c)\Delta, \\ \Delta_B &= E_B - E_G = c\Delta, \\ \Delta &= E_B - E_A > 0. \end{aligned} \quad (27)$$

Усредненное выражение для плотности состояний представляется теперь в виде

$$\begin{aligned} \rho(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \sum_s \sum_{\kappa=1}^{g_{st}} \sum_n |\phi_n^{st,\kappa}|^2 c^s (1-c)^t \times \\ &\times \exp \left\{ -i(\omega - \omega_{loc}^{st,\kappa})\tau + \sum_{n \in \mathcal{C}_{st,\kappa}} \ln [R_n(\tau)] \right\}, \end{aligned} \quad (28)$$

где

$$R_n(\tau) = c \exp [i\Delta(1-c) |\phi_n^{st,\kappa}|^2 \tau] + (1-c) \exp [-i\Delta c |\phi_n^{st,\kappa}|^2 \tau]. \quad (29)$$

Ограничиваясь первым неисчезающим кумулянтном, получаем для плотности состояний

$$\rho(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \sum_s \sum_{\kappa=1}^{g_{st}} \sum_n |\phi_n^{st,\kappa}|^2 c^s (1-c)^t \exp \left\{ -i(\omega - \omega_{loc}^{st,\kappa})\tau - \frac{\gamma_{st,\kappa}^2 \tau^2}{2} \right\}, \quad (30)$$

где

$$\gamma_{st,\kappa}^2 = \sum_{n \in \mathcal{C}_{st,\kappa}} c(1-c)\Delta^2 [|\phi_n^{st,\kappa}|^2]^2,$$

причем суммирование в последнем выражении проводится по узлам решетки за пределами данного кластера. После вычисления интеграла по  $\tau$

$$\rho(\omega) = \sum_s \sum_{\kappa=1}^{g_{st}} \sum_n |\phi_n^{st,\kappa}|^2 c^s (1-c)^t \frac{1}{\sqrt{2\pi\gamma_{st,\kappa}^2}} \exp \left\{ -\frac{(\omega - \omega_{loc}^{st,\kappa})^2}{2\gamma_{st,\kappa}^2} \right\}. \quad (31)$$

Полученное выражение отличается от (20) тем, что энергия локализации каждого кластера здесь определена с точностью до величины  $\gamma_{st,\kappa}$ . Если энергии локализации и величина  $\gamma_{st,\kappa}$  оказываются сравнимыми, то общее количество состояний, отщепившихся



от дна зоны виртуального кристалла, оказывается меньше, чем без учета флуктуаций (21), т. е.

$$\mathcal{N}(0) = \int_0^{E_L} \rho(\omega) d\omega \leq \sum_s n_s(c). \tag{32}$$

Полученный результат ограничен областью применимости теории возмущений, т. е. применим тем лучше, чем ниже концентрация кластеров и чем больше энергия локализации состояний кластеров, дающих основной вклад в плотность состояний.

3. Влияние флуктуаций на состояния кластеров. Вариационный подход

Рассмотрим проблему вычисления плотности состояний, используя возможности вариационного метода. Важным новым элементом в данной задаче является большое разнообразие кластеров, приводящих к отщеплению состояний от дна зоны. Это не позволяет выбрать единственным способом вариационную волновую функцию. Для дальнейших вычислений удобно перейти от интеграла Фурье (30) к плотности состояний, записанной с помощью преобразования Лапласа:

$$\rho(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_s \sum_{\kappa=1}^{g_{st}} \sum_n |\phi_n^{st,\kappa}|^2 c^s (1-c)^t \times \exp \left\{ -i \left( \sum_{nm} \phi_n^{st,\kappa} [H_{nm}^{vc} + \omega \delta_{nm}] \phi_m^{st,\kappa} \right) (\tau - i\theta_{st,\kappa}) + \sum_{n \in \mathcal{C}_{st,\kappa}} \ln [R_n(\tau - i\theta_{st,\kappa})] \right\}. \tag{33}$$

Вариационная задача в приближении независимых кластеров сводится к решению набора независимых нелинейных уравнений движения для связанных состояний кластеров, каждое из которых имеет вид

$$\sum_{nm} [H_{nm}^{vc} + \omega \delta_{nm}] \phi_m^{st,\kappa} + U_{st,\kappa}(\mathbf{n}) \phi_n^{st,\kappa} = 0. \tag{34}$$

Для каждого кластера потенциальная энергия в пределах кластера задается однозначно и не варьируется. Наиболее вероятная конфигурация соответствует тому случаю, когда потенциальная энергия  $U_{st,\kappa}(\mathbf{n})$  для кластера  $st, \kappa$  взята в виде

$$U_{st,\kappa}(\mathbf{n}) = \begin{cases} \Delta_n & \mathbf{n} \in \mathcal{C}_{st,\kappa} \\ -\frac{\partial \ln R_n(-i\theta_{st,\kappa})}{\partial \theta_{st,\kappa} |\phi_n^{st,\kappa}|^2} & \mathbf{n} \notin \mathcal{C}_{st,\kappa} \end{cases}, \tag{35}$$

где матричный элемент  $\Delta_n$  имеет значение  $[-(1-c)\Delta]$  в узлах  $s$  и  $c\Delta$  в узлах  $t$ , а

$$-\frac{\partial \ln R_n(-i\theta_{st,\kappa})}{\partial \theta_{st,\kappa} |\phi_n^{st,\kappa}|^2} = -(1-c)\Delta \left[ 1 - \frac{\exp(-\Delta \theta_{st,\kappa} |\phi_n^{st,\kappa}|^2)}{c + (1-c) \exp(-\Delta \theta_{st,\kappa} |\phi_n^{st,\kappa}|^2)} \right]. \tag{36}$$

Таким образом, вариационная процедура дает наиболее вероятную конфигурацию флуктуаций за пределами кластера. Заметим, что самосогласованные решения уравнений для связанных состояний дают функции  $\phi_n^{st,\kappa}$  и они же фиксируют величины

свободных параметров преобразования Лапласа  $\theta_{st,\kappa}$ . Разлагая в (33)  $\ln [R_n(\tau - i\theta_{st,\kappa})]$  в ряд по степеням  $\tau$  и сохраняя члены разложения вплоть до  $\tau^2$ , сведем интеграл (33) к гауссовскому. Выполняя интегрирование и преобразуя полученное выражение с помощью уравнения движения (34), получим в этом случае для плотности состояний

$$\rho(\omega) = \sum_s \sum_{\kappa=1}^{g_{st}} \sum_n |\phi_n^{st,\kappa}|^2 c^s (1-c)^t \times \frac{1}{\sqrt{2\pi\gamma_{st,\kappa}^2(\omega)}} \exp \left\{ \sum_{n \in \mathcal{G}_{st,\kappa}} \left[ \ln \left( \frac{c}{c+p(n)} \right)^{c+p(n)} \left( \frac{1-c}{1-c-p(n)} \right)^{1-c-p(n)} \right] \right\}, \quad (37)$$

где  $p(n) = -U_{st,\kappa}(n)/\Delta$ ,

$$\gamma_{st,\kappa}^2(\omega) = \frac{m_2}{\left[ \sum_n |\phi_n^{st,\kappa}|^2 \right]^2}, \quad (38)$$

$$m_2 = \Delta^2 \sum_n [|\phi_n^{st,\kappa}|^2]^2 [c+p(n)] [1-c-p(n)] \quad (39)$$

и  $\Delta = |E_B - E_A|$ . Локальные значения концентрации атомов, являющихся центрами притяжения и отталкивания, описываются соответственно выражениями  $[c+p(n)]$  и  $[1-c-p(n)]$ .

Полученное выражение плотности состояний для каждого значения  $s$  представляет собой набор, состоящий из  $g_{st}$  полос, форма которых в окрестности максимума близка к гауссовской. По мере удаления от максимума форма каждой полосы приобретает урбаховский характер. В пределе малых концентраций центров притяжения полученное выражение для плотности состояний (37) описывает ее структурные особенности, обусловленные кластерами минимальных размеров.

#### 4. Приближенное описание зависимости $\rho(\omega)$

Для описания зависимости  $\rho(\omega)$  в окрестности порога подвижности и ниже предположим, что в нулевом приближении все состояния с энергией локализации  $\omega_j$ , превышающей некоторую энергию  $\omega_0$ , можно считать локализованными и достаточно изолированными друг от друга. Величина  $\omega_0$ , измеряемая относительно  $E_G$ , должна быть выбрана таким образом, чтобы полное число состояний с энергией, превышающей это значение,

$$\mathcal{N}(\omega_0) = \int_{\omega_0}^{E_L} \rho(\omega) d\omega, \quad (40)$$

где  $E_L$  — граница Лифшица для твердого раствора, удовлетворяло бы условию

$$\mathcal{N}(\omega_0) a^3 \ll 1. \quad (41)$$

Здесь  $a \approx \sqrt{\hbar^2/2M\omega_0}$  определяет характерную длину экспоненциального убывания волновой функции изолированной ямы за пределами ямы.

Величина  $\omega_0$  в дальнейшем рассмотрении играет роль границы области применимости теории и важного ее параметра, при помощи которого будет варьироваться зависимость  $\rho(\omega)$  в окрестности порога подвижности.

Для вычисления зависимости  $\rho(\omega)$  используем приближение эффективной массы и предположение Гальперина—Лэкса о возможности описания локализованных состояний усредненной волновой функцией [12, 13]. Рассмотрим такие флуктуационные ямы, которые превышают по своей мощности компактный кластер, необходимый для образования локализованного состояния глубиной  $\omega_0$ . Используя подход, развитый в работах [18, 16, 17], получаем

$$\rho(\omega) \sim \frac{1}{v_0 \sqrt{2\pi\gamma^2(\omega)}} \exp \left\{ \int \frac{d^3r}{v_0} \left[ \ln \left( \frac{c}{c+p(r)} \right)^{c+p(r)} \left( \frac{1-c}{1-c-p(r)} \right)^{1-c-p(r)} \right] \right\}, \quad (42)$$

где

$$\gamma^2(\omega) = \frac{m_2}{\left[ \int \frac{d^3r}{v_0} \varphi_{tr}^2(r) \right]^2}, \quad (43)$$

$$m_2 = \Delta^2 \int \frac{d^3r}{v_0} \varphi_{tr}^4(r) [c+p(r)][1-c-p(r)], \quad (44)$$

$v_0 = V/N$  — объем, приходящийся на атом в решетке, причем  $\Delta = |E_B - E_A|$ . Локальные значения концентрации атомов, являющихся центрами притяжения и отталкивания, описываются соответственно выражениями  $[c+p(r)]$  и  $[1-c-p(r)]$ . Здесь мы использовали величину  $p(r)$ , представляющую собой отклонение концентрации центров притяжения от среднего. В таком случае самосогласованная потенциальная яма  $U_{tr}(r)$  может быть описана выражением

$$U_{tr}(r) = -\Delta p(r), \quad (45)$$

где

$$p(r) = \begin{cases} (1-c) & r \leq R_0, \\ (1-c) \left[ 1 - \frac{\exp(-t\varphi_{tr}^2\Delta)}{c+(1-c)\exp(-t\varphi_{tr}^2\Delta)} \right] & r > R_0, \end{cases} \quad (46)$$

и

$$R_0 = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2M[(1-c)\Delta - \omega_0]}} \left[ \pi - \arctg \sqrt{\frac{(1-c)\Delta - \omega_0}{\omega_0}} \right] \quad (47)$$

находится в результате решения уравнения

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + \omega - U_{tr}(r) \right\} \varphi_{tr}(r) = 0. \quad (48)$$

Для оценки абсолютной величины плотности состояний найдем коэффициент пропорциональности в (42) путем вычисления интегральной плотности состояний и сшивания полученного значения при  $\omega \approx \omega_0$  с интегральной плотностью состояний, найденной с помощью правила сумм (32) и соотношений (23), (24). Полученная плотность состояний приведена в последнем разделе работы.

### 3. БЕСФОНОННЫЕ ПОЛОСЫ ПОГЛОЩЕНИЯ И ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ

Для описания бесфононной полосы поглощения используем метод, развитый ранее в работе [18]. Оптическое поглощение в области основного состояния экситона в совершенном кристалле описывается его спектральной плотностью при равном нулю волновом векторе

$$\alpha_{1s}(\omega) = \frac{v_0}{\pi} |\psi_{1s}(0)|^2 \text{Im } G_{00}(\omega - E_{1s} - i\delta), \tag{49}$$

где

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(\omega - E_{1s}) = \frac{1}{\omega - \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2M - E_{1s} - i\delta}.$$

Здесь  $E_{1s}$  и  $\psi_{1s}(r = 0)$  — соответственно собственное значение и собственная функция основного состояния экситона. Как было принято ранее, начало отсчета энергии совпадает с дном зоны  $1s$ -состояния экситона  $E_G$ , так что  $E_{\Lambda=1s} = 0$ .

Мнимая часть одночастичной функции Грина представляет собой диагональный матричный элемент, полученный в результате двукратного преобразования Фурье и усреднения по конфигурациям мнимой части функции Грина (4). В общем случае результат можно записать в форме

$$\langle \text{Im } G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(\omega) \rangle = \frac{\tau_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(\omega)}{[\omega - \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2M - \Delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(\omega)]^2 + \tau_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^2(\omega)}, \tag{50}$$

где  $\tau_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(\omega)$  и  $\Delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(\omega)$  связаны дисперсионным соотношением, что обеспечивает правильную нормировку выражения для спектральной плотности. В области локализованных состояний, когда выполняется условие (41), эти функции представляют собой мнимую и вещественную части усредненной по конфигурациям матрицы рассеяния [41, 42]. Если в каждой флуктуационной яме образуется лишь одно локализованное состояние, соотношение между  $\tau_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(\omega)$  и  $\rho(\omega)$  имеет вид

$$\tau_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(\omega) = \frac{6v_0}{\pi^3} \Delta^2 \sqrt{\omega/\Delta} \left( \frac{E_{cr}}{\Delta} \right)^{3/2} |I_1(\mathbf{k})|^2 \rho(\omega), \tag{51}$$

где зависимость  $\rho(\omega)$  дается соотношением (42) с учетом коэффициента пропорциональности, найденного с использованием правила сумм (32);

$$I_1(\mathbf{k}) = \left( \frac{2M\omega}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3r \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \varphi_{tr}(\mathbf{r}), \tag{52}$$

причем при  $k = 0$

$$\int d^3r \varphi_{tr}(\mathbf{r}) = \frac{\Delta}{\omega} \int d^3r \varphi_{tr}(\mathbf{r}) p(\mathbf{r}), \tag{53}$$

поскольку  $p(\mathbf{r})$  описывает конфигурацию флуктуационной ямы и связано с  $\varphi_{tr}(\mathbf{r})$  соотношениями (45) и (48). Полученный результат (51) дает возможность найти мнимую часть матрицы рассеяния  $\tau_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(\omega)$  в интересующей нас области.

Более сложной задачей является нахождение функции  $\Delta_{kk}(\omega)$ , поскольку для этого необходимо знать  $\tau_{kk}(\omega)$  в широкой области спектра, после чего функция  $\Delta_{kk}(\omega)$  может быть вычислена при помощи дисперсионного соотношения. В отличие от  $\tau_{kk}(\omega)$ , которая в области  $\omega > \omega_0$  изменяется по экспоненциальному закону, вещественная часть матрицы рассеяния  $\Delta_{kk}(\omega)$  убывает с ростом  $\omega$  медленно, по степенному закону, стремясь в пределе больших  $\omega$  к нулю как  $1/\omega$ . Поэтому для приближенного описания спектральной плотности в относительно узкой области энергий в окрестности ее максимума можно заменить  $\Delta_{kk}(\omega)$  на постоянную величину  $\Delta_{kk}^0$ . В результате при  $k \approx 0$  получаем

$$\langle \text{Im } G_{00}(\omega) \rangle \approx \frac{\tau_{00}(\omega)}{[\omega - \Delta_{00}^0]^2 + \tau_{00}^2(\omega)}, \quad (54)$$

где  $\Delta_{00}^0$  выбирается таким образом, чтобы вычисленное положение максимума полосы  $1s$ -состояния в спектре поглощения соответствовало экспериментальному значению.

#### А. Основные характеристики твердого раствора $\text{ZnSe}_{1-c}\text{Te}_c$ и оценки параметров задачи

Для сопоставления наших результатов с экспериментом мы выбрали твердый раствор  $\text{ZnSe}_{1-c}\text{Te}_c$ . Возмущение, вносимое атомами  $\text{Te}$ , является достаточно сильным, чтобы локализованное состояние возникало на кластере, состоящем из двух или более атомов  $\text{Te}$  [40].

Экспериментально измеряемая концентрационная зависимость ширины запрещенной зоны твердого раствора,

$$\mathcal{E}_G(c) = c \mathcal{E}_G^A + (1 - c) \mathcal{E}_G^B - \Delta \mathcal{E}_G(c), \quad (55)$$

характеризуется прогибом  $\Delta \mathcal{E}_G(c)$ , т. е. отклонением от простой линейной интерполяции между предельными значениями  $\mathcal{E}_G^A$  и  $\mathcal{E}_G^B$ . Развитие электронной теории твердых растворов тесно связано с исследованием феномена нелинейной зависимости ширины запрещенной зоны от концентрации (прогиба) [43–48]. Если в ранних работах, посвященных объяснению прогиба, наблюдаемый эффект связывался с эффективным усреднением параметров электронного гамильтониана и (или) с рассеянием на одноузельных флуктуациях, то результаты последних исследований в этой области [46–48] показывают, что возмущение электронных состояний, вносимое изоэлектронным замещением, носит более сложный характер и для объяснения наблюдаемого эффекта необходимо учесть структурные изменения решетки, обусловленные изменением длин связей замещающего аниона с соседними катионами. Согласно данным [46–49] изменение ширины запрещенной зоны является результатом самосогласованного перестроения электронных состояний, возникающих под воздействием химических и структурных возмущений, вносимых изоэлектронным замещением.

Детальный анализ этой зависимости [40, 50] для системы  $\text{ZnSe}_{1-c}\text{Te}_c$  показывает, что прогиб  $\Delta \mathcal{E}_G(c)$  может быть представлен в виде суммы двух составляющих

$$\Delta \mathcal{E}_G(c) = \Delta \mathcal{E}_1(c) + \Delta \mathcal{E}_2(c), \quad (56)$$

имеющих разную зависимость от концентрации. Большей по величине является симметричная часть прогиба, которая описывается соотношением  $\Delta \mathcal{E}_1(c) = b_1 c(1 - c)$  и

составляет в максимуме при  $c = 0.5$  около 0.25 эВ, что сравнимо с разницей запрещенных зон кристаллов ZnSe и ZnTe равных соответственно 2.82 и 2.39 эВ [51]. Несимметричная относительно  $c = 0.5$  составляющая,  $\Delta\mathcal{E}_2(c)$ , достигает максимального значения  $\approx 0.1$  эВ при  $c \approx 0.15$ .

Как поглощение, так и люминесценция твердых растворов  $\text{ZnSe}_{1-c}\text{Te}_c$  [37, 40, 50, 52–55] свидетельствуют об образовании флуктуационных хвостов локализованных состояний экситонов, экспоненциально убывающих в глубину запрещенной зоны  $\propto \exp(-\omega/\varepsilon_U)$ . Урбаховский параметр  $\varepsilon_U$  достигает максимального значения  $\approx 0.025$  эВ при  $c \approx 0.15$ , причем его изменение в зависимости от концентрации в широкой области практически совпадает с функцией несимметричной части прогиба [50]. Это совпадение указывает на одинаковое происхождение  $\Delta\mathcal{E}_2(c)$  и флуктуационного хвоста и позволяет связать обе эти характеристики с такими флуктуациями состава, которые ответственны за отщепление локализованных состояний.

Большая величина прогиба и значительное размытие края зоны флуктуационными хвостами указывают на то, что твердый раствор  $\text{ZnSe}_{1-c}\text{Te}_c$  представляет собой систему, где возмущение электронных состояний валентной зоны при замене Se на Te оказывается сильным по крайней мере в области концентраций Te  $c \leq 0.30$ . Об этом свидетельствует также тот факт, что хвост флуктуационных состояний в области малых концентраций,  $c \approx 0.01$ , имеет структурные особенности [37, 40, 50, 52–55], обусловленные локализованными состояниями кластеров малых размеров, состоящих из двух и трех атомов Te. По мере роста концентрации Te и понижения среднего уровня потенциала величина возмущения, вносимого каждым атомом Te, закономерно уменьшается.

Еще одной особенностью  $\text{ZnSe}_{1-c}\text{Te}_c$ , которая отличает этот твердый раствор от ряда других соединений данного типа, является сильное экситон-фононное взаимодействие, которое в области  $c \leq 0.30$  приводит к появлению в спектрах люминесценции бесструктурных полос [40, 50, 52, 53] с полушириной  $\approx 0.1$  эВ. Возрастание константы фрелиховского взаимодействия с LO-фононами в твердом растворе по сравнению с исходными кристаллами ZnSe и ZnTe подтверждает тот факт, что в данной области концентраций происходит достаточно глубокая локализация экситонов, в результате чего становятся возможными электронно-колебательные переходы с участием фононов, волновые векторы которых занимают заметную часть зоны Бриллюэна.

Параметрами задачи, которые определяют урбаховскую энергию  $\varepsilon_U$ , являются  $\Delta$  и  $\Delta/E_{cr}$ . Для нахождения этих параметров были использованы экспериментальные значения урбаховских энергий, полученные из измерений коэффициентов поглощения [40, 52]. Значения параметров оказались равными  $\Delta \approx 1$  эВ и  $\Delta/E_{cr} \approx 0.8$ .

Дополнительно величину этих параметров гамильтониана можно оценить, рассматривая концентрационную зависимость сдвига максимума полосы основного состояния экситона (55). В однозонной модели нелинейный вклад  $\Delta E_1(c)$  представляет собой первую поправку к положению дна валентной зоны за счет рассеяния на одноузельных флуктуациях и выражается через те же параметры, что и урбаховская энергия  $\varepsilon_U$ . Известно, что в общем случае такая оценка не обеспечивает хорошего согласия теоретических и экспериментальных данных. Однако, если параметры  $\Delta$  и  $\Delta/E_{cr}$  модельного гамильтониана выбраны таким образом, чтобы достичь согласия с наблюдаемыми величинами урбаховских энергий, внутренняя согласованность модели предполагает, что флуктуационный сдвиг края зоны, который равен

$$\Delta E_1(c) = \Delta^2 G_{nn}^{vc}(0) c(1-c), \quad (57)$$

должен удовлетворять неравенству  $\Delta E_1 \leq \Delta \mathcal{E}_1$ , где  $\Delta \mathcal{E}_1(c)$  — экспериментальное значение прогиба запрещенной зоны. Справедливость этого неравенства следует из того факта, что вычисляемый сдвиг  $\Delta E_1$  относится к валентной зоне, которая обуславливает появление хвоста, а наблюдаемая величина  $\Delta \mathcal{E}_1$  содержит также вклад зоны проводимости, который, как правило, имеет противоположный знак и увеличивает величину прогиба. В решеточном варианте модели критическое значение одноузельного потенциала возмущения связано с функцией Грина электрона соотношением

$$G_{nn}^{vc}(0) = E_{cr}^{-1}. \quad (58)$$

Таким образом, мы видим, что симметричная часть сдвига выражается через те же параметры, что и урбаховская энергия.

Величина  $\Delta E_1(c)$  не связана непосредственно с образованием локализованных состояний и поэтому при всех расчетах удобно провести дополнительную перенормировку начала отсчета энергии, исключая эту величину из рассмотрения при вычислении энергий локализации. Сдвиг дна зоны, обусловленный одноузельными флуктуациями, в приближении эффективной массы обращается в бесконечность, что также требует проведения перенормировки [14].

Несимметричная часть прогиба  $\Delta \mathcal{E}_2(c)$  с учетом перенормировки определяется из экспериментальных данных как положение максимума наблюдаемой полосы поглощения относительно дна зоны виртуального кристалла (56) после вычитания симметричной части прогиба  $\Delta \mathcal{E}_1(c)$ . Разделение концентрационного смещения края запрещенной зоны  $\Delta \mathcal{E}_G$  на  $\Delta \mathcal{E}_1(c)$  и  $\Delta \mathcal{E}_2(c)$  позволяет установить надежно лишь максимально возможное значение  $\Delta \mathcal{E}_1(c)$ . С другой стороны, в том случае когда за образование хвоста плотности состояний ответственна одна зона (в данном случае предполагается, что это валентная зона), значение  $\Delta \mathcal{E}_2(c)$ , полученное из эксперимента, и величина  $\Delta E_2(c)$ , найденная в процессе расчета в однозонной модели, должны с хорошей точностью совпадать:

$$\Delta E_2(c) = \Delta \mathcal{E}_2(c). \quad (59)$$

Поскольку величина  $\Delta E_2(c)$  связана с теми же флуктуациями, которые приводят к образованию локализованных состояний, зависимость  $\Delta E_2(c)$  от концентрации должна иметь вид

$$\Delta E_2(c) \sim \varepsilon_U \sim \frac{\Delta(1-c)}{\ln(1/c)} \left( \frac{\Delta(1-c)}{E_{cr}} \right)^{3/2}. \quad (60)$$

### В. Бесфононная полоса люминесценции

Проведенное выше рассмотрение предполагает, что флуктуационные потенциальные ямы, приводящие к локализации экситона, представляют собой кластеры атомов узкозонной компоненты твердого раствора, причем за образование флуктуационных состояний в данной модели ответствен диагональный беспорядок. При случайном распределении атомов двух сортов флуктуационные потенциальные ямы хаотически распределены по объему кристалла. Рассматриваемые состояния в самом грубом приближении изолированы друг от друга. Однако это справедливо лишь для тех состояний, энергия локализации которых достаточно велика. По мере приближения к порогу подвижности

все большая часть состояний принадлежит не отдельному кластеру, а их комплексам (суперкластерам). В данном разделе мы разовьем подход к проблеме люминесценции, который основан на аналогии задачи протекания по флуктуационным состояниям и задачи классической теории протекания по перекрывающимся сферам.

1. Классификация локализованных состояний

Окружая каждую потенциальную яму, в которой имеется состояние энергией  $\omega > \omega_0$ , сферой радиуса  $R_{int} > \sqrt{\hbar^2/2M\omega_0}$ , величина которого будет параметром задачи, мы используем теорию протекания по перекрывающимся сферам [30–36] для вычисления таких характеристик состояний хвоста как среднее число комплексов (суперкластеров)  $\langle n_s \rangle$ , состоящих из  $s$  перекрывающихся сфер. Будем считать, что состояние, принадлежащее данной потенциальной яме, изолировано в пространстве, если в объеме сферы  $4\pi R_{int}^3/3$  нет других потенциальных ям с энергией локализации, превышающей энергию локализации в данной яме. Применительно к рассматриваемой задаче можно сказать, что  $\langle n_1 \rangle$  представляет собой количество изолированных локализующих потенциальных ям,  $\langle n_2 \rangle$  — количество суперкластеров, состоящих из парных ям и т. д.

Используя известное выражение для  $\langle n_1 \rangle$  [30–35], получаем соотношение

$$\langle n_1(\omega) \rangle \approx \exp(-[R_{int}/\overline{r(\omega)}]^3) \equiv \exp\{-2\mathcal{P}(\omega)\}. \tag{61}$$

Здесь

$$\overline{r(\omega)} = \left( \frac{3}{4\pi} \frac{1}{\mathcal{N}(\omega)} \right)^{1/3} \tag{62}$$

и  $\langle n_1(\omega) \rangle \equiv \langle n_1(\mathcal{N}(\omega)) \rangle$ . Концентрация потенциальных ям  $\mathcal{N}(\omega)$  с энергией локализации, ограниченной с одной стороны величиной  $\omega$  и с другой — границей Лифшица, определяется соотношением вида (40). Функция  $\mathcal{P}(\omega)$  представляет собой плотность локализованных экситонов в единицах первого вириального коэффициента. Данные различных авторов по величине критического значения плотности для протекания по сферам собраны в работе [34]. Эти значения заключены в интервале  $1.17 \geq \mathcal{P}_{cr}^{cl} \geq 1.40$ . Из (61) и (62) видно, что критическое значение  $\mathcal{P}(\omega_{ME})$  в нашем случае зависит от величины введенного параметра  $R_{int}$  и значения интегральной плотности на пороге протекания  $\mathcal{N}(\omega_{ME})$ .

Зависимости числа  $\langle n_s \rangle$  от концентрации сфер для  $s = 2-5$  были получены в работе [34] в форме рядов по степеням концентрации. Для использования этих функций в области порога протекания мы провели следующие экстраполяции полученных там рядов для  $s = 2, 3, 4$ :

$$\langle n_2(\omega) \rangle = \mathcal{P}(\omega) \exp\{-3.073 \mathcal{P}(\omega)\}, \quad \langle n_3(\omega) \rangle = 1.375 \mathcal{P}^2(\omega) \exp\{-4.09 \mathcal{P}(\omega)\},$$

$$\langle n_4(\omega) \rangle = 2.1842 \mathcal{P}^3(\omega) \exp\{-5.084 \mathcal{P}(\omega)\}. \tag{63}$$

Разложение полученных выражений по степеням  $\mathcal{P}(\omega)$  приводит к результатам, которые с высокой точностью совпадают с рядами, найденными в работе [34]. Кроме того, оценить точность приведенной экстраполяции для функции  $\langle n_2(\omega) \rangle$  возможно при использовании результатов численных расчетов функции  $P_3(p_{norm})$  в [30]. Функция



$P_3(p_{norm})$  дает вероятность того, что случайно выбранная потенциальная яма принадлежит суперкластеру с размером  $s > 3$ , при этом  $P_3(p_{norm})$  связана с  $\langle n_2(\omega) \rangle$  соотношением  $P_3(p_{norm}) = 1 - \langle n_1 \rangle - 2\langle n_2 \rangle$ , а связь между  $p_{norm}$  и  $\mathcal{P}(\omega)$  имеет вид  $p_{norm} = \mathcal{P}(\omega)/8$ . Проведенное сравнение  $P_3(p_{norm})$  с результатами вычислений [30] показало хорошее согласие в наиболее важной области,  $0.3 > p_{norm} > 0.1$ , т.е. в окрестности порога подвижности.

## 2. Времена жизни локализованных состояний

Рассмотрим простейшую из возможных ситуаций, предполагая, что локализованное состояние может либо рекомбинировать с излучением фотонов, либо перейти в другое состояние с меньшей энергией, передав некоторое количество фононов решетке. При этом будем пренебрегать взаимодействием между двумя или большим числом реально возбужденных экситонов, считая, что степень заполнения состояний близка к нулю вследствие слабости возбуждения. Используя классификацию локализованных состояний по их принадлежности к суперкластерам разного размера, можно утверждать, что состояния, принадлежащие к единичным ямам, могут только рекомбинировать. Состояния, принадлежащие к парным суперкластерам  $s = 2$ , делятся на два типа — одно из них (нижнее) при нулевой температуре также может только рекомбинировать, в то время как второе (верхнее) имеет возможность для перехода на нижнее с излучением фононов. Очевидно, что полная концентрация состояний, которые могут только рекомбинировать, есть

$$\mu_0(\omega) \equiv \mu_{rad}(\omega) = \left\langle \sum_{s=1}^{\infty} n_s(\omega) \right\rangle. \quad (64)$$

Здесь  $n_s(\omega)$  — количество суперкластеров, состоящих из  $s$  потенциальных ям с энергией локализации большей или равной  $\omega$  в расчете на одну яму, а угловые скобки означают усреднение по всем возможным реализациям суперкластера данного размера.

В рамках рассматриваемой модели  $\mu_{rad}(\omega)$  дает долю состояний, которым соответствует полное время жизни равное радиационному времени:

$$\tau^{(0)} \equiv \tau_{rad}; \quad (65)$$

будем считать его величиной, не зависящей от энергии локализации. Остальные состояния суперкластера будут иметь времена жизни, ограниченные процессами распада с излучением фононов. Так, верхние состояния парных кластеров и вторые состояния кластеров большего размера (состояния суперкластера нумеруются в порядке уменьшения их энергии локализации) будут иметь единственную возможность для распада. С ростом номера состояния в суперкластере возрастает количество каналов распада с излучением фононов. Для простоты предположим, что время жизни состояния зависит только от количества каналов распада данного состояния и не зависит от конфигурации суперкластера. Тогда состоянию с номером  $s \geq 1$  соответствует полное время жизни

$$\tau^{(s-1)} = \frac{\tau_{dec}^{(s-1)} \tau_{rad}}{\tau_{dec}^{(s-1)} + \tau_{rad}}, \quad (66)$$

где индекс  $(s-1)$  равен числу каналов распада, а  $\tau_{dec}^{(s-1)}$  — время жизни относительно переходов в лежащие ниже состояния суперкластера. Количество состояний, имеющих  $s$  каналов распада, по аналогии с соотношением (64) дается выражением

$$\mu_s(\omega) = \left\langle \sum_{k=s+1}^{\infty} n_k(\omega) \right\rangle. \tag{67}$$

Величина  $\mu_{rad}$  в первом приближении может быть представлена как

$$\mu_{rad} \approx \langle n_1(\omega) + n_2(\omega) \dots \rangle = \exp \{-2\mathcal{P}(\omega)\} + \mathcal{P}(\omega) \exp \{-3.073 \mathcal{P}(\omega)\} + \dots, \tag{68}$$

а для доли состояний, которые имеют один канал релаксации,  $\mu_1$ , имеем

$$\begin{aligned} \mu_1 &\approx \langle n_2(\omega) + n_3(\omega) + \dots \rangle = \\ &= \mathcal{P}(\omega) \exp \{-3.073 \mathcal{P}(\omega)\} + 1.375 \mathcal{P}^2(\omega) \exp \{-4.09 \mathcal{P}(\omega)\} + \dots \end{aligned} \tag{69}$$

Суммы (64) и (67) с хорошей точностью определяются их нижним пределом [36], т. е. несколькими первыми их слагаемыми, которые представлены в соотношениях (68), (69). Они хорошо определены при малых концентрациях, в критической области  $|\delta \mathcal{N}(\omega)| \equiv |1 - \mathcal{N}(\omega) / \mathcal{N}(\omega_{ME})| \ll 1$  и при концентрациях, превышающих критическую, хотя в последних двух областях они экспоненциально малы. Использование подхода, описанного в работе [36], позволяет в критической области представить сингулярную часть сумм (64) и (67) как  $|\delta \mathcal{N}(\omega)|^{\nu D+1}$ , где  $D$  — размерность системы и  $\nu$  — критический индекс параметра порядка, зависящий от размерности системы. Для  $D = 3$  значение  $\nu \approx 0.87$ , что приводит к пренебрежимо малым сингулярным частям этих сумм в критической области.

### С. Контур бесфононной полосы люминесценции

Стационарная концентрация заселенных состояний при непрерывном и достаточно слабом межзонном возбуждении пропорциональна плотности состояний при данной энергии и времени их жизни. Учитывая, что вклад каждого заселенного состояния в спектральную плотность излучения совпадает с вкладом в коэффициент поглощения  $1s$ -состояния, мы можем представить бесфононную полосу люминесценции в виде

$$I_{1s}^0(\omega) \sim \alpha_{1s}^0(\omega) P(\omega) \tau_{rad}, \tag{70}$$

где

$$P(\omega) = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{\mu_{(s-1)}(\omega) \tau^{(s-1)}}{\tau_{rad}} \equiv \sum_{s=1}^{\infty} P^{(s-1)}(\omega) \tag{71}$$

дает суммарную относительную заселенность принадлежащих суперкластерам различного размера состояний с энергией локализации  $\omega$ . Учет первых двух слагаемых  $P(\omega)$  за счет изолированных кластеров и основных состояний суперкластеров с  $s = 2$  приводит к выражению

$$I^0(\omega) \sim \alpha_{1s}^0(\omega) \tau_{rad} [\exp \{-2\mathcal{P}(\omega)\} + \mathcal{P}(\omega) \exp \{-3.073 \mathcal{P}(\omega)\}], \tag{72}$$

которое не зависит от времен безызлучательной релаксации. Дальнейшие слагаемые, которые также не зависят от скорости безызлучательной релаксации, появляются за счет основных состояний суперкластеров больших размеров. Кроме того, все суперкластеры, начиная с  $s = 2$ , дают вклады, зависящие от безызлучательных времен. Так, первая

поправка за счет второго состояния суперкластера с  $s = 2$  может быть представлена в виде

$$\alpha_{1s}^0(\omega)P^{(1)}(\omega)\tau_{rad} \approx \alpha_{1s}^0(\omega)\langle n_2(\omega) \rangle \tau^{(1)} = \alpha_{1s}^0(\omega)\mathcal{P}(\omega) \exp\{-3.073\mathcal{P}(\omega)\} \frac{\tau_{dec}\tau_{rad}}{\tau_{dec} + \tau_{rad}}. \quad (73)$$

Последнее выражение показывает, что роль поправки зависит от соотношения между  $\tau_{dec}$  и  $\tau_{rad}$ .

Суперкластеры минимального размера обеспечивают во всех случаях основные вклады, в то время как старшие члены дают лишь малые поправки как в области малых концентраций  $\mathcal{N}(\omega)/\mathcal{N}(\omega_{ME}) \ll 1$  за счет того, что их число пропорционально нарастающим с размером суперкластера степеням концентрации [34]  $\mathcal{P}(\omega)$ , так и в окрестности порога подвижности за счет более быстрого экспоненциального убывания старших слагаемых.

#### 4. ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Электрон-фононное взаимодействие оказывает дополнительное влияние на форму спектров поглощения и люминесценции, вследствие того что поглощение и рекомбинация сопровождаются излучением как акустических, так и оптических фононов.

Для описания взаимодействия экситонов как с  $LO$ -, так и с  $LA$ -фононами можно использовать результаты работ [18, 19]. Коэффициент поглощения и интенсивность люминесценции при нулевой температуре с учетом взаимодействия с фононами могут быть записаны соответственно как

$$\alpha_{1s}(\omega) = \int_0^{\infty} dz \alpha_{1s}^0(\omega + z)F(z) \quad (74)$$

и

$$I_{1s}(\omega) = \int_{-\infty}^0 dz I_{1s}^0(\omega - z)F(z), \quad (75)$$

где

$$F(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp \left[ i\omega t + \sum_q \frac{|H_{\Phi\Phi}(\mathbf{q})|^2}{\Omega_q^2} (\exp(-i\Omega_q t) - 1) \right] \quad (76)$$

дает плотность электронно-колебательных состояний крыла.

В случае сильного рассеяния локализованный экситон представляет собой дырку, локализованную в случайном потенциале твердого раствора, и электрон, связанный с ней кулоновским взаимодействием. Этой модели соответствует волновая функция  $\Phi$ , взятая в форме

$$\Phi = \phi_{tr}(\mathbf{R})\psi_{1s}(\xi), \quad (77)$$

где  $\phi_{tr}(\mathbf{R})$  описывает состояние частицы, локализованной случайным потенциалом твердого раствора, в то время как  $\psi_{1s}(\xi)$  представляет собой волновую функцию основного состояния в кулоновском потенциале. Аргумент  $\mathbf{R}$  в выражении  $\phi_{tr}$  описывает в этом случае координату дырки  $\mathbf{R} = \mathbf{r}_h$ , а аргумент  $\psi_{1s}$  представляет собой координату электрона  $\xi = \mathbf{x}_e$ .

Запишем гамильтониан экситон-фононного взаимодействия в виде

$$H(\mathbf{q}) = H_{LO}(\mathbf{q}) + H_{LA}(\mathbf{q}),$$

где  $\mathbf{q}$  нумерует волновые векторы фононов, а каждое слагаемое представляет собой сумму электронного и дырочного гамильтонианов:

$$H_{LO,LA}(\mathbf{q}) = H_{LO,LA}^e(\mathbf{q}) + H_{LO,LA}^h(\mathbf{q}).$$

Матричные элементы экситон-фононного гамильтониана могут быть представлены в форме [56, 57]

$$H_{\Phi\Phi}^\alpha(\mathbf{q}) = [\mathcal{F}_{e,q}^\alpha \exp i(\mathbf{q}\mathbf{r}_e) + \mathcal{F}_{h,q}^\alpha \exp i(\mathbf{q}\mathbf{r}_h)]_{\Phi\Phi}, \quad (78)$$

где индексы  $\alpha$  обозначают механизмы взаимодействия. Поскольку каждая экспонента в (78) зависит только от одного аргумента, то

$$H_{\Phi\Phi}^\alpha(\mathbf{q}) = \mathcal{F}_{e,q}^\alpha [\exp i(\mathbf{q}\mathbf{r}_e)]_{1s1s} + \mathcal{F}_{h,q}^\alpha [\exp i(\mathbf{q}\mathbf{r}_h)]_{\phi_{tr}\phi_{tr}}. \quad (79)$$

Функции  $\mathcal{F}_{e,q}^\alpha$  и  $\mathcal{F}_{h,q}^\alpha$  приведены, например, в работе [56].

В расчетах спектров  $\alpha_{1s}(\omega)$  и  $I_{1s}(\omega)$  учитывались фрелиховское взаимодействие с продольными оптическими фононами и деформационное и пьезоэлектрическое взаимодействия с продольными акустическими фононами. Основные параметры твердого раствора, необходимые для расчета (эффективные массы электрона и дырки, константы деформационного потенциала, пьезоэлектрического и фрелиховского взаимодействий), получались путем линейной интерполяции между их значениями для ZnSe и ZnTe [58].

## 5. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА И ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты вычислений плотности флуктуационных состояний  $\rho(\omega)$  и интегральной плотности состояний  $\mathcal{N}(\omega)$  представлены на рис. 1. Интегральная плотность состояний представляет собой полное число состояний с энергией, превышающей  $\omega$ , вычисленное на основании  $\rho(\omega)$ , определяемой соотношениями (42)–(48). Коэффициент пропорциональности в выражении (42) и параметр  $\omega_0$  выбирались таким образом, чтобы обеспечить совпадение величины интегральной плотности, найденной по правилу сумм (32) и вычисленной с помощью  $\rho(\omega)$  при  $\omega = \omega_0$ . Значение  $\omega_0$  получилось равным  $0.098 \pm 0.005$  эВ, что попадает в интервал между значениями энергии локализации для кластеров с числом атомов Te равном  $s = 3$  и  $s = 4$ . Энергии локализации для кластеров оценивались в приближении эффективной массы и сферических потенциальных ям соответствующих размеров. Интегральная плотность состояний для кластеров, отмеченная на рис. 1 точками, вычислялась по правилу сумм (32). Описанная процедура дает плотность состояний, приведенную на рис. 1, в области  $\omega \geq \omega_0$  и позволяет провести экстраполяцию этой функции в область  $\omega \leq \omega_0$ . На рис. 1 приведена также плотность

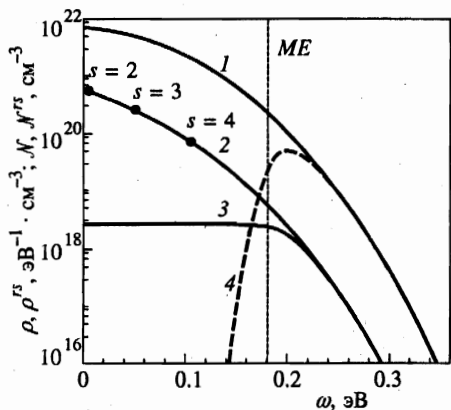


Рис. 1

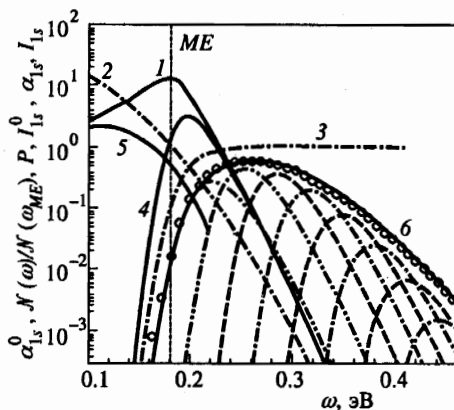


Рис. 2

Рис. 1. Результаты вычислений: 1 — плотность состояний  $\rho(\omega)$ , 2 — интегральная плотность состояний  $\mathcal{N}(\omega)$ , 3 — плотность «излучающих» состояний  $\mathcal{N}^{rs}(\omega)$ , 4 — интегральная плотность излучающих состояний  $\rho^{rs}(\omega)$  флуктуационного хвоста твердого раствора  $\text{ZnSe}_{1-c}\text{Te}_c$  при  $c = 0.15$ . Сплошные кружки — оценки интегральной плотности состояний по правилу сумм. Нуль энергии соответствует положению дна зоны виртуального кристалла с учетом симметричной части прогиба  $\Delta E_1(c)$ . Вертикальной линией отмечено положение порога подвижности  $\omega_{ME}$  (см. текст)

Рис. 2. Результаты вычислений: 1 — контур бесфононной полосы поглощения  $\alpha_{1s}^0(\omega)$ , 2 — относительная интегральная плотность состояний  $\mathcal{N}(\omega)/\mathcal{N}(\omega_{ME})$ , 3 — доля радиационных состояний  $P(\omega)$ , 4 — бесфононная полоса люминесценции  $I_{1s}^0(\omega)$ , 5 — полоса поглощения  $\alpha_{1s}(\omega)$  и 6 — полоса люминесценции  $I_{1s}^0(\omega)$   $1s$ -состояния с учетом взаимодействия с фононами, штриховые кривые — составляющие контура полосы люминесценции, обусловленные взаимодействием с  $LO$ -фононом; кружки — спектр люминесценции  $\text{ZnSe}_{1-c}\text{Te}_c$  при  $c = 0.15$  и  $T = 2$  К

«излучающих» состояний  $\rho^{rs}(\omega) = \rho(\omega)P(\omega)$ , где  $P(\omega)$  определена формулой (71), и их интегральная плотность  $\mathcal{N}^{rs}(\omega)$  как функции энергии локализации  $\omega$ .

На рис. 2 представлены результаты вычисления контура бесфононных полос поглощения и люминесценции основного состояния экситона твердого раствора  $\text{ZnSe}_{1-c}\text{Te}_c$  для  $c = 0.15$ . Отмеченное на рисунке положение порога подвижности и параметр теории  $R_{int}$ , введенные в разд. 3.В.1, были выбраны так, чтобы сдвиг максимума полосы люминесценции относительно максимума поглощения соответствовал наблюдаемой величине. При этом в расчете использовалось значение  $\mathcal{P}(\omega_{ME}) = 1.4$ , что соответствует величине, полученной в работе [34] для критической концентрации в классической задаче перекрывающихся сфер.

Приведенный на рис. 2 контур бесфононной полосы люминесценции показывает, что только относительно небольшая доля флуктуационных состояний, расположенных в области малых значений коэффициента поглощения, определяет процесс люминесценции. Максимум распределения этих излучающих состояний смещен относительно максимума поглощения в красную область уже без учета взаимодействия с колебаниями решетки, что качественно хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными данными по неупорядоченным системам. Взаимодействие с фононами приводит к до-

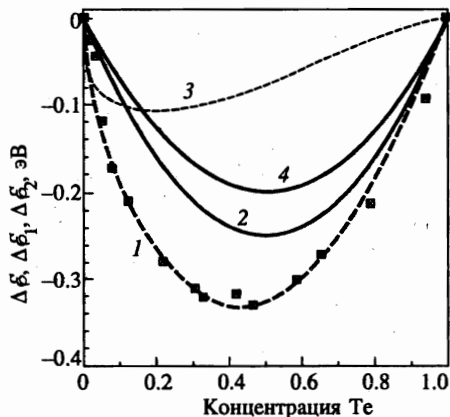


Рис. 3. Экспериментальные данные по концентрационному прогибу ширины запрещенной зоны  $\Delta E_G(c)$  (квадратики), 1 — аппроксимация  $\Delta E_G(c)$  выражением (80), представляющим собой комбинацию функций (57) и (60), при  $b_1 = 1.0$  эВ и  $b_2 = 0.3$  эВ, 2 — максимально возможная величина симметричной части прогиба  $\Delta E_1(c)$ , 3 — несимметричная составляющая прогиба  $\Delta E_2(c)$ , 4 — оценка величины  $\Delta E_1(c)$  по соотношению (57)

полнительным стоковским сдвигам полос поглощения и излучения в противоположных направлениях. На рис. 2 приведены результаты учета влияния экситон-фононного взаимодействия на положение и форму полосы люминесценции и экспериментальный спектр твердого раствора  $ZnSe_{1-c}Te_c$  при  $c = 0.15$ . В расчете волновая функция локализованного экситона бралась в виде произведения волновой функции локализованной дырки и кулоновской функции электрона. Поскольку в этой области концентраций энергия связи экситона  $E_{ex}(c)$  заметно меньше энергии локализации излучающих состояний, электрон не успевает адиабатически следить за движением дырки и взаимодействует с усредненным по флуктуационной яме ее распределением. Удовлетворительное согласие с экспериментальной кривой достигается при учете 10 LO-фононных повторений, разложение контура полосы люминесценции на составляющие приведено на рисунке.

На рис. 3 приведены экспериментальные данные по зависимости прогиба ширины запрещенной зоны от концентрации  $\Delta E_G(c)$  и разделение экспериментально измеряемой величины смещения максимума  $\Delta E_G(c)$  на  $\Delta E_1(c)$  и  $\Delta E_2(c)$  с использованием соотношения

$$\Delta E_G(c) = b_1 c(1 - c) + b_2 \frac{(1 - c)^{5/2}}{\ln(1/c)}, \tag{80}$$

а также оценка  $\Delta E_1(c)$  по соотношению (57) с использованием приведенных в данной работе параметров. Как видно из рисунка, полученная величина  $\Delta E_1(c)$  удовлетворяет приведенному выше неравенству  $\Delta E_1 \leq \Delta E_G$ . При этом вычисленное с учетом взаимодействия с фононами положение максимума полосы поглощения для  $c = 0.15$ , равное  $\approx 0.1$  эВ (см. рис. 2) и наблюдаемое значение  $\Delta E_2(c)$  также хорошо согласуются между собой.

В заключение отметим, что предложенный в работе теоретический подход к описанию спектра флуктуационных состояний неупорядоченного твердого раствора с диагональным беспорядком при концентрации узкозонной компоненты ниже порога протекания для разупорядоченной подрешетки может быть обобщен как на двумерные системы, так и на другие типы протекания.

Классификация состояний по их принадлежности к суперкластерам может оказаться полезной и для таких неупорядоченных систем, где плотность флуктуационных со-

стояний трехмерна, но статистика суперкластеров двумерна. Такая ситуация может реализоваться, например, в случае квантовых ям, образованных твердым раствором, если ширина таких ям достаточна для размещения в нем трехмерных флуктуационных кластеров, но недостаточно велика для образования трехмерных суперкластеров.

Эта работа поддержана фондом INTAS (грант 94-324) и Российским фондом фундаментальных исследований (проекты 96-02-16933 и 97-02-18138).

## Литература

1. И. М. Лифшиц, УФН **83**, 617 (1964).
2. D. J. Thouless, Phys. Rep. C **13**, 95 (1974).
3. Progr. Theor. Phys. (Supplement), №.84 *Anderson Localization*, ed. by Y. Nagoaka (1985).
4. *Anderson Localization*, ed. by T. Ando and H. Fukuyama, Springer, Berlin (1988).
5. G. F. Koster and J. C. Slater, Phys. Rev. **95**, 1167 (1954).
6. M. Lannoo and P. Lenglar, J. Phys. Chem. Sol. **30**, 2409 (1969).
7. J. Bernholc and Sokratas Pantelides, Phys. Rev. B **18**, 1780 (1978).
8. I. M. Lifshitz, Nuovo Cimento, Suppl. Vol. 3, ser. X, 716 (1956).
9. R. J. Elliott, J. A. Krumhansl, and P. L. Leath, Rev. Mod. Phys. **46**, 465 (1974).
10. М. А. Иванов, Ю. Г. Погорелов, ЖЭТФ **72**, 2198 (1977).
11. М. А. Иванов, Ю. Г. Погорелов, ЖЭТФ **76**, 1010 (1979).
12. B. I. Halperin and M. Lax, Phys. Rev. **148**, 722 (1966).
13. B. I. Halperin and M. Lax, Phys. Rev. **159**, 802 (1966).
14. E. Brezin and G. Parizi, J. Stat. Phys. **19**, 269 (1978).
15. А. А. Ключихин, С. Г. Оглоблин, ЖЭТФ **100**, 2026 (1991).
16. А. А. Ключихин and S. G. Ogloblin, Phys. Rev. B **48**, 3100 (1993).
17. А. А. Ключихин, Phys. Rev. B **53**, 10979 (1995).
18. А. А. Ключихин, С. А. Пермогоров, А. Н. Резницкий, Письма в ЖЭТФ **65**, 274 (1997).
19. А. А. Ключихин, С. А. Пермогоров, А. Н. Резницкий, ФТТ **39**, 1170 (1997).
20. P. G. de Gennes, P. Lafore, and J. P. Millot, J. Phys. Chem. Sol. **11**, 105 (1966).
21. P. G. de Gennes, P. Lafore, and J. P. Millot, J. Phys. Radium **20**, 624 (1959).
22. Y. Cho and Y. Toyozawa, J. Phys. Soc. Jap. Suppl. **26**, 71 (1969).
23. S. Kirkpatrick and T. P. Eggarter, Phys. Rev. B **6**, 3598 (1972).
24. A. B. Harris and T. C. Lubensky, Phys. Rev. B **23**, 2640 (1981).
25. A. B. Harris and T. C. Lubensky, Phys. Rev. Lett. **49**, 296 (1982).
26. Y. Shapir, A. Aharony, and A. B. Harris, Phys. Rev. Lett. **49**, 486 (1982).
27. W. Y. Ching and D. L. Huber, Phys. Rev. B **25**, 1096 (1982).
28. Y. Meir, A. Aharony, and A. B. Harris, Europhys. Lett. **10** (3), 275 (1989).
29. I. Chang, Zvi Lev, A. B. Harris, J. Adler, and A. Aharony, Phys. Rev. Lett. **74**, 2094 (1995).
30. D. F. Holcomb and J. J. Rehr, Jr., Phys. Rev. **183**, 733 (1969).
31. V. K. S. Shante and S. Kirkpatrick, Adv. in Phys. **20**, 325 (1971).
32. J. W. Essam, Rep. on Progr. in Phys. **43**, 833 (1980).
33. G. E. Pike and C. H. Seager, Phys. Rev. B **10**, 1421 (1974).
34. S. W. Haan and R. Zwanzig, J. Phys. A: Math. Gen. **10**, 1547 (1977).
35. W. T. Elam, A. R. Kerstein, and J. J. Rehr Jr., Phys. Rev. Lett. **52**, 1516 (1984).
36. A. Bunde and S. Havlin, in *Fractals and Disordered Systems*, ed. by A. Bunde and S. Havlin, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo, Hong Kong, Barcelona, Budapest (1991), p. 97.

37. A. Klochikhin, S. Permogorov, and A. Reznitsky, *J. of Crystal Growth* **159**, 848 (1996).
38. Nguen Xuan Xinh, A. A. Maradudin, and R. A. Coldwell-Horsfall, *J. de Phys.* **26**, 717 (1965).
39. J. W. Essam, in *Phase transitions and critical Phenomena* Ch. 6, Vol. 2, ed. by C. Domb and M. S. Green, Academic Press, London, New York (1972), p. 197.
40. S. Permogorov and A. Reznitsky, *J. of Luminescence* **52**, 201 (1992).
41. R. G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles*, McGraw-Hill, New York (1966).
42. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распад в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1971).
43. J. A. Van Vechten and T. K. Bergstresser, *Phys. Rev. B* **1**, 3351 (1970).
44. D. Richardson, *J. Phys. C: Solid State Physics* **5**, L27, L127 (1972).
45. A. Baldereshi and K. Mashke, *Solid State Communications* **16**, 99 (1975).
46. J. E. Bernard and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **36**, 3199 (1991).
47. S.-H. Wei, L. G. Ferreira, J. E. Bernard, and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **42**, 9622 (1990).
48. S.-H. Wei and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **43**, 1662 (1991).
49. S.-H. Wei and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **39**, 3279 (1991).
50. A. Naumov, S. Permogorov, A. Reznitsky, S. Verbin, and A. Klochikhin, *J. of Crystal Growth* **101**, 713 (1990).
51. B. Segal and D. T. F. Marple, in *Physics and Chemistry of II-VI Semiconducting Compounds*, ed. by M. Aven and J. S. Prener, North-Holland, Amsterdam, (1967), p. 319, пер. *Физика и химия соединений А<sup>II</sup>В<sup>VI</sup>*, Мир, Москва (1970).
52. А. Ю. Наумов, С. А. Пермогоров, Т. Б. Попова, А. Н. Резницкий, В. Я. Жулай, В. А. Новожилов, Н. Н. Спендиаров, *ФТП* **21**, 350 (1987).
53. А. Ю. Наумов, С. А. Пермогоров, А. Н. Резницкий, В. Я. Жулай, В. А. Новожилов, Г. Т. Петровский, *ФТТ* **29**, 377 (1987).
54. A. G. Abdukadyrov, S. D. Baranovskii, S. Yu. Verbin, E. L. Ivchenko, A. Yu. Naumov, and A. Reznitsky, *Sov. Phys. JETP* **71**, 1155 (1990).
55. A. Reznitsky, S. D. Baranovskii, A. Tsekoun, and C. Klingshirn, *Phys. Stat. Sol. (b)* **184**, 159 (1994).
56. E. Cohen and M. Sturge, *Phys. Rev. B* **25**, 3828 (1982).
57. А. И. Ансельм, Ю. А. Фирсов, *ЖЭТФ* **28**, 151 (1955).
58. *Физика и химия соединений А<sup>II</sup>В<sup>VI</sup>*, Мир, Москва (1970).