

УДК 621.315.592

©1995

**ФОНОННЫЕ ФЛУКТУАЦИИ И ЭФФЕКТ
ПСЕВДОЛЕГИРОВАНИЯ В НЕОДНОРОДНЫХ
АМОРФНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ.
II. КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ ВЕРОЯТНОСТИ
СОСТОЯНИЙ МНОГОФОНОННОЙ СИСТЕМЫ**

В.А. Лизачев

Московский энергетический институт,
111250, Москва, Россия
(Поступила в Редакцию 26 июля 1994 г.
В окончательной редакции 4 мая 1995 г.)

Рассматриваются зависимости чисел микросостояний, соответствующих в одночастичном и многочастичном фазовом пространстве заданному значению энергии фононов. Получено количественное соотношение, определяющее зависимость вероятности обнаружения состояния фононной системы от ее полной энергии и размеров области пространственной когерентности фононов.

В первой части данной статьи (в дальнейшем ссылки на ее текст и формулы будут сопровождаться обозначением Ч. I) достаточно подробно рассмотрена модель Скеттрапа, учитывающая влияние фононных флуктуаций в материале на вероятность оптических переходов между электронными уровнями. Показано, что модель Скеттрапа пригодна лишь для анализа проблемы на качественном уровне, а для количественного описания взаимосвязи между размерами областей пространственной когерентности фононных мод, их числами заполнения и вероятностью оптических электронных переходов необходимо учитывать взаимодействие со всеми фононными модами, находящимися в пределах выделенной ячейки (области пространственной когерентности фононных мод). Поскольку число фононов N в пределах ячейки может меняться, вероятность обнаружения W_ν в рассматриваемой ячейке, находящейся в состоянии термодинамического равновесия с остальным объемом материала, N фононов с суммарной энергией E_ν будет определяться большим каноническим распределением Гиббса (формулы (7) и (8) в Ч. I). Для определения вида зависимости $W_\nu(E_\nu)$ необходимо просуммировать соотношения (8) в Ч. I как по числу микросостояний $S(E_\nu)$, отвечающих в фазовом пространстве системы заданному значению E_ν , так и по всем N , позволяющим обеспечить суммарную энергию фононов E_ν в пределах ячейки (области пространственной когерентности). Рассмотрим вначале особенности распределения равновесных одночастичных микросостояний в шестимерном фазовом пространстве одного фонона, находящегося в трехмерном координатном пространстве в пределах выделенной ячейки объемом v .

Наиболее простое (однородное) распределение микросостояний в фазовом пространстве системы соответствует случаю, когда все характерные размеры ячейки значительно превышают межатомные расстояния материала [1]. Однако ранее мы условились считать объем ячейки малым по сравнению с объемом всей пленки, поэтому нельзя игнорировать возможность возникновения ситуации, когда один или несколько характерных размеров неоднородностей окажутся сопоставимыми с межатомным расстоянием в материале. С другой стороны, анализ всех мыслимых форм ячеек и соответствующих им распределений микросостояний в таком пространстве явно не укладывается в рамки журнальной статьи. Представляется целесообразным в рамках достаточно простой модели рассмотреть лишь наиболее существенные особенности распределений микросостояний в ячейке с различным соотношением характерных размеров.

Предположим, что рассматриваемая нами ячейка имеет форму параллелепипеда со сторонами L_x , L_y и L_z ($L_x L_y L_z = v$). Зависимость полного числа микросостояний U , попадающих в фазовый объем одного фонона, с квазиимпульсом k удобно представить формулой

$$U(k) = \int_0^{k_x^m} \int_0^{k_y^m} \int_0^{k_z^m} dk_x dk_y dk_z \sum \delta(k_x - hn_x/L_x) \sum \delta(k_y - hn_y/L_y) \sum \delta(k_z - hn_z/L_z), \quad (1)$$

где $\delta(n_{x,y,z}, k_{x,y,z}, L_{x,y,z})$ — дельта-функция Дирака [2], h — постоянная Планка, n_x , n_y и n_z — натуральные числа (1, 2, 3, ...), k_x , k_y , k_z — декартовы составляющие вектора квазиимпульса в соответствующем трехмерном пространстве. Величины k_x , k_y и k_z рассматриваются как непрерывно изменяющиеся параметры, а k_x^m , k_y^m и k_z^m — как их максимально возможные значения для рассматриваемой системы. В конечном счете нас интересует зависимость числа микросостояний фононов от их энергии, поэтому в дальнейшем вместо фазового пространства системы Γ будем пользоваться ее пространством «координаты-энергия», которое будет обозначаться символом X . Правило соответствия между энергией фонона $\hbar\omega$ и его квазиимпульсом k определяется так называемым дисперсионным соотношением [1]. Наиболее простым правилом соответствия между величинами k и $\hbar\omega$ оказывается в случае, если дисперсионное соотношение является линейным (классическим):

$$E_x = c_s k_x, \quad E_y = c_s k_y, \quad E_z = c_s k_z. \quad (2)$$

где c_s — эффективное значение скорости звука в материале, а E_x , E_y и E_z удовлетворяют равенству

$$E_x^2 + E_y^2 + E_z^2 = (\hbar\omega)^2. \quad (3)$$

Обычно выбор линейного дисперсионного соотношения связан с использованием континуального приближения [1] для расчета спектра плотности состояний фононных мод. В данном случае оно не может быть применено в стандартном виде из-за сопоставимости размеров ячеек со средним межатомным расстоянием в материале. С другой

стороны, материал ячейки мы считаем аморфным, что исключает и возможность применения аппарата теории кристаллических твердых тел к анализу вида дисперсионного соотношения. Поэтому в дальнейшем дисперсионное соотношение мы условимся считать линейным, а при анализе характера распределения микросостояний в пространстве X^1 фонона попытаемся учесть эффекты, связанные с сопоставимостью среднего межатомного расстояния материала с размерами ячейки. С учетом равенств (2) формула (1) принимает вид

$$U(k) = \int_0^{E_x^m} \int_0^{E_y^m} \int_0^{E_z^m} dE_x dE_y dE_z \sum \delta(E_x - hc_s n_x / L_x) \times \\ \times \sum \delta(E_y - hc_s n_y / L_y) \sum \delta(E_z - hc_s n_z / L_z). \quad (4)$$

Для детального анализа зависимости числа микросостояний фонона $S(\hbar\omega)$ от его энергии $\hbar\omega$ необходимо совместно решить уравнения (3), (4). Из-за сложного характера зависимости $U(\hbar\omega)$ в (4) аналитически сделать это не представляется возможным, поэтому воспользуемся геометрическими соображениями. Уравнение (3) задает в подпространстве энергий одночастичного пространства X^1 сферу с центром в начале координат и радиусом $\hbar\omega$. Объем, занимаемый микросостояниями в пространстве энергий, можно представить [1] в виде прилегающих друг к другу без зазоров одинаковых параллелепипедов, каждый из которых соответствует одному микросостоянию. Длины ребер параллелепипедов выражаются из соотношения неопределенности Гейзенберга

$$\Delta E_x = \hbar\omega / L_x, \quad \Delta E_y = \hbar\omega / L_y, \quad \Delta E_z = \hbar\omega / L_z. \quad (5)$$

Количество микросостояний $S(\hbar\omega)$, отвечающих энергии фонона $\hbar\omega$, будет равно количеству параллелепипедов, рассекаемых поверхностью сферы соответствующего радиуса. В общем случае значения длин ребер ΔE_x , ΔE_y и ΔE_z не одинаковы. Однако линейным преобразованием (растяжением или сжатием) координатных осей подпространства энергий мы всегда можем добиться равенства отрезков, соответствующих в геометрическом представлении значениям ΔE_x , ΔE_y и ΔE_z . При таком преобразовании координатных осей (в дальнейшем они будут обозначаться символами E'_x , E'_y и E'_z , причем $E'_x = E_x / \Delta E_x$, $E'_y = E_y / \Delta E_y$ и $E'_z = E_z / \Delta E_z$) определяемая уравнением (3) поверхность сферы становится поверхностью эллипсоида с длинами полуосей $\hbar\omega / \Delta E_x$, $\hbar\omega / \Delta E_y$ и $\hbar\omega / \Delta E_z$ (которые становятся безразмерными), а параллелепипеды превращаются в кубы с ребром единичной длины. Поскольку допустимыми являются лишь неотрицательные значения квантовых чисел системы n_x , n_y и n_z (см. пояснения к формуле (1)), то численное значение $S(\hbar\omega)$ определяется восьмой частью площади поверхности полученного эллипсоида, измеренной в длинах ребра куба, отвечающего теперь одному микросостоянию фононной системы. В преобразованной системе координат уравнение поверхности

эллипсоида можно представить [2] в следующем виде:

$$E'_z(E'_x, E'_y) = \frac{\hbar\omega}{\Delta E_z} \left[1 - \frac{E_x'^2}{(\hbar\omega)^2} \Delta E_x^2 - \frac{E_y'^2}{(\hbar\omega)^2} \Delta E_y^2 \right]^{1/2} \quad (6)$$

Тогда площадь поверхности части эллипсоида, находящейся в первом октанте пространства энергий, определяется [2] соотношением

$$S = \iint_{G'} (1 + p^2 + q^2)^{1/2} dE'_y dE'_x, \quad (7)$$

где G' — область интегрирования, принадлежащая первому квадранту плоскости $E'_x 0 E'_y$; $p = \partial E_z / \partial E_x$, $q = \partial E_z / \partial E_y$. Дифференцируя (6) по E_x и по E_y , получаем

$$p = -\frac{\Delta E_x^2 E'_x}{\Delta E_z R}, \quad q = -\frac{\Delta E_y^2 E'_y}{\Delta E_z R}. \quad (8)$$

Здесь $R = [(\hbar\omega)^2 - (E'_x \Delta E_x)^2 - (E'_y \Delta E_y)^2]^{1/2}$. Подставляя выписанные значения p , q , R в (7), будем иметь

$$S = \iint_{G'} \left[1 + \frac{(E'_x \Delta E_x^2 / \Delta E_z)^2 + (E'_y \Delta E_y^2 / \Delta E_z)^2}{(\hbar\omega)^2 - (E'_x \Delta E_x)^2 - (E'_y \Delta E_y)^2} \right]^{1/2} dE'_y dE'_x. \quad (9)$$

Возвращение к исходной системе координат в пространстве энергий и использование (5) позволяют преобразовать соотношение (9)

$$S = C \iint_G \left\{ \frac{(\hbar\omega)^2 - E_x^2 [1 - (L_z/L_x)^2] + E_y^2 [1 - (L_z/L_y)^2]}{(\hbar\omega)^2 - E_x^2 - E_y^2} \right\}^{1/2} dE_y dE_x, \quad (10)$$

где C — множитель, величина которого определяется правилами замены дифференциалов dE'_y , dE'_x на dE_y , dE_x и оказывается равной $L_x L_y / (hc_s)^2$. При возвращении к исходной системе координат меняется и форма области интегрирования: если область G' в плоскости $E'_x 0 E'_y$ имела форму «четвертинки» эллипса, то новая область интегрирования G принимает в плоскости $E_x 0 E_y$ форму «четвертинки» круга. Это несколько упрощает процедуру явного определения пределов интегрирования в (10)

$$S = \frac{L_x L_y}{(hc_s)^2} \int_0^{\hbar\omega} \left[\int_0^{\sqrt{(\hbar\omega)^2 - E_x^2}} f(E_x, E_y) dE_y \right] dE_x, \quad (11)$$

при этом подынтегральная функция $f(E_x, E_y)$ в (11) тождественна соответствующей функции в (10). Переход к полярной системе координат

$$\rho \cos \psi = \frac{E_x}{\hbar\omega}, \quad \rho \sin \psi = \frac{E_y}{\hbar\omega}, \quad (12)$$

где $\rho = [(E_x^2 + E_y^2)/(\hbar\omega)^2]^{1/2}$, $\psi = \text{arctg}(E_y/E_x)$ позволяет свести интегралы (10), (11) к одномерному интегралу

$$S = \frac{L_x L_y (\hbar\omega)^2}{(hc_s)^2} \int_0^1 \left\{ \left(\rho^2 \frac{1 - k_1^2 \rho^2}{1 - \rho^2} \right)^{1/2} E \left[\left(\rho^2 \frac{k_2^2 - k_1^2}{1 - k_1^2 \rho^2} \right)^{1/2} \right] \right\} d\rho, \quad (13)$$

где $k_1^2 = 1 - (L_z/L_x)^2$, $k_2^2 = 1 - (L_z/L_y)^2$, $E(k_1, k_2, \rho)$ — полный эллиптический интеграл второго рода [3]. К сожалению, в общем виде выразить зависимость S от геометрических размеров области пространственной когерентности фононов через элементарные функции не удалось, поэтому при расчетах таких зависимостей необходимо использовать численные методы. Однако в некоторых частных случаях правая часть соотношения (13) упрощается настолько, что выражается через размеры ячейки в явном виде.

Практический интерес могут представлять материалы с различными типами неоднородности. Из всех возможных вариантов соотношений размеров ячеек выделим три основных. Первый вариант, который можно условно отнести к «глобулярной» морфологии, реализуется в нашей модели, когда длины ортогональных ребер рассматриваемой нами ячейки приблизительно одинаковы $L_x \approx L_y \approx L_z$. Второй вариант («столбчатая структура») реализуется, если один из размеров ячейки значительно превышает два других, например: $L_x \approx L_y$, а $L_z \gg L_{x,y}$. Наконец, материал с третьим типом неоднородности можно представить как слоистый материал, при этом L_y и $L_z \gg L_x$. Экспериментальные исследования показали [4,5], что одним из наиболее часто встречающихся видов неоднородностей (морфологии) в аморфных полупроводниковых материалах является столбчатая структура, поэтому в дальнейшем материалы с глобулярной и слоистой морфологией рассматривать не будем. Поперечные размеры столбов, как правило, близки. При проведении модельных расчетов это может служить основанием для того, чтобы считать их совершенно одинаковыми. Итак, в качестве модели области пространственной когерентности фононов рассмотрим ячейку в форме «столба» (параллелепипеда с $L_x = L_y = L \ll L_z$). При выполнении этих условий будет иметь место равенство $k_1 = k_2$ (см. пояснение к формуле (13)), аргумент эллиптического интеграла в (13) становится равным нулю, а численное значение самого интеграла $E(0) = \pi/2$ [3]. Таким образом, соотношение (13) существенно упрощается и принимает вид

$$S = \frac{\pi(L\hbar\omega)^2}{2(hc_s)^2} \int_0^1 \left\{ \rho \left(1 + \frac{k^2 \rho^2}{1 - \rho^2} \right)^{1/2} \right\} d\rho, \quad (14)$$

где $k = L_z/L$, причем $k \gg 1$. Подстановка $\sin t = \rho$ после ряда промежуточных преобразований (которые здесь не приведены) позволяет выразить $S(\hbar\omega)$ через элементарные функции параметров материала и геометрических размеров ячейки

$$S(\hbar\omega) = \frac{\pi^2 L_z L (\hbar\omega)^2}{8(hc_s)^2}. \quad (15)$$

При выводе соотношения (15) учтено численное равенство величин S и $S(\hbar\omega)$.

При произвольном значении N пространство X^N представляется декартовым произведением N шестимерных пространств X^1 [6]. Поскольку все N рассматриваемых нами фононов находятся в пределах одной ячейки с пространственным объемом v , то и размеры потенциально доступной каждой частице области и распределение одночастичных микросостояний в ее пространстве X^1 будут одинаковы для любой из частиц в данной ячейке. Следовательно, объем области, доступной системе в $6N$ -мерном пространстве X^N , будет равен алгебраическому произведению объемов соответствующих областей в шестимерных пространствах, а максимально возможное число микросостояний будет определяться $3N$ -мерным аналогом соотношения (4), правую часть которого можно разбить на три группы по N одинаковых сомножителей, соответствующих в (4) взаимно ортогональным пространственным направлениям X , Y и Z . В качестве $6N$ -мерного аналога одночастичной функции $S(\hbar\omega)$ введем функцию $S_\nu(E_\nu)$, равную числу микросостояний системы из N частиц, соответствующих одинаковой энергии системы E_ν . Без учета принципа неразличимости частиц значение $S_\nu(E_\nu)$ будет определяться [6] алгебраическим произведением одночастичных функций

$$S_\nu(E_\nu) = S(\hbar\omega_1)S(\hbar\omega_2)S(\hbar\omega_3) \cdot \dots \quad (16)$$

Всего в (16) должно входить N сомножителей, которые можно разбить на группы, содержащие по $n(\hbar\omega)$ одинаковых сомножителей (см. соотношения (5), (6) в Ч. I). Нетрудно показать, что при нулевом значении числа заполнения одной из фононных мод ей будет соответствовать пространство X^0 с равным единице значением $S^0(\hbar\omega)$ при любых допустимых $\hbar\omega$. Поэтому произвольное количество соответствующих незаполненным модам сомножителей $S^0(\hbar\omega)$ может входить в (13) наряду с $S^1(\hbar\omega)$, однако на число микросостояний системы фононов $S_\nu(E_\nu)$ их присутствие не влияет.

Пусть $E_M^N = Nk_B\theta_D$ — максимально возможное значение суммарной энергии системы E_ν (см. соотношение (5) в Ч. I) при N фононах в пределах области когерентности. Из (5) (Ч. I) следует, что при неограниченном росте N величина E_ν также может расти неограниченно, поэтому разумно допустить возможность изменения энергии системы E_ν в пределах от нуля до бесконечности. Если для рассматриваемого N окажется, что $E_\nu > E_M^N$, то при суммировании определяемых формулой (7) из Ч. I значений $W_{\nu,s}$ соответствующее слагаемое должно быть исключено из рассмотрения, поскольку данное значение E_ν недоступно системе из N частиц. Первое учитываемое слагаемое соответствует некоторому минимальному значению числа фононов N_0 ; величина N_0 с учетом сказанного выше выражается из формул (5) (Ч. I) как

$$N_0 = \text{INT} \left[\frac{E_\nu}{k_B\theta_D} \right]. \quad (17)$$

Здесь функция INT соответствует операции определения наименьшего целого числа, превосходящего рациональный аргумент функции.

Пусть мы имеем в пределах области когерентности некоторое состояние фоновой системы из N частиц с энергией E_ν . Точно такое же значение энергии системы E_ν можно получить, однократно меняя местами две любые частицы. Очевидно, что данная перестановка влияет на положение микросостояния системы в $6N$ -мерном пространстве, а число различных вариантов расстановок частиц, дающих постоянное значение E_ν , определяется [2] числом размещений N частиц по N микросостояниям пространства X^N и оказывается равным $N!$, причем для каждого из полученных таким образом размещений определяемые соотношением (16) значения $S_\nu(E_\nu)$ идентичны. Однако в силу принципа неразличимости частиц [6] микросостояния, полученные из исходного перестановкой частиц, должны рассматриваться как эквивалентные исходному, поэтому численное значение внутренней суммы по всем микросостояниям с одинаковой энергией в формуле (8) (Ч. I) будет определяться произведением $(N!)^{-1} S_\nu(E_\nu)$. Теперь полную вероятность обнаружения в выделенной нами ячейке состояния фоновой подсистемы с энергией E_ν можно рассчитать следующим образом:

$$W(E) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_\nu}{k_B T}\right) \sum_{N=N_0}^{\infty} \frac{1}{N!} \int S_\nu(E_\nu) d\nu. \quad (18)$$

Статистическая сумма, по определению, не зависит от E_ν , поэтому ее величину будем считать фиксированной. Для проведения с использованием соотношения (18) количественных расчетов зависимости $W(E_\nu)$ необходимо определить характер функции $S_\nu(E_\nu)$, кратность и пределы интеграла в (18). В соответствии с (16) $S_\nu(E_\nu)$ определяется произведением одночастичных функций $S(\hbar\omega)$, вид которых мы будем считать заданным соотношением (15).

Имея расчетное соотношение для $S(\hbar\omega)$, мы можем при произвольном N по формуле (16) вычислить и величину $S_\nu(E_\nu)$ для любого значения суммарной энергии фоновой системы E_ν . Значительно сложнее обстоит дело с вычислением в (18) интеграла от $S_\nu(E_\nu)$ по различным распределениям фононов ν . Проблема заключается в том, что величина произведения сомножителей в (16) зависит от того, каким именно способом получено заданное значение E_ν . В самом деле, даже для рассмотренной в первой части статьи двухчастичной системы некоторое фиксированное значение E_ν достигается набором неповторяющихся сочетаний двух одночастичных слагаемых, соответствующим на рис. 2 (Ч. I) отрезку DF . Точки D и F указанного отрезка соответствуют случаям, когда энергия одной из частиц равна нулю. Мы уже говорили о том, что для частицы с нулевой энергией $S(0) = 1$, поэтому численное значение $S_\nu(E_\nu)$ будет в этих случаях целиком определяться значением функции $S(E_\nu)$ второй частицы. Совершенно другое численное значение $S_\nu(E_\nu)$ будет получено для двухчастичной системы, когда значение E_ν складывается из двух одинаковых одночастичных слагаемых (рис. 1). Конечно, для рассмотренной нами выше двухчастичной системы определение пределов интегрирования и вычисления интеграла по распределениям ν особых проблем не представляет. Однако даже для такой системы необходимо учесть, что значения пределов интегрирования (положения концов отрезка DF на рис. 2 из Ч. I) немонотонно зависят от E_ν . В многомерном же случае задача определения

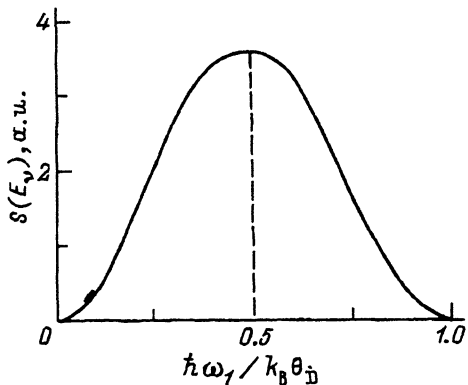


Рис. 1. Зависимость числа микросостояний в системе из двух фононов с постоянной энергией от энергии одной из частиц.

Суммарная энергия системы принята равной дебаевской энергии. Максимальное число микросостояний достигается при равенстве энергий частиц.

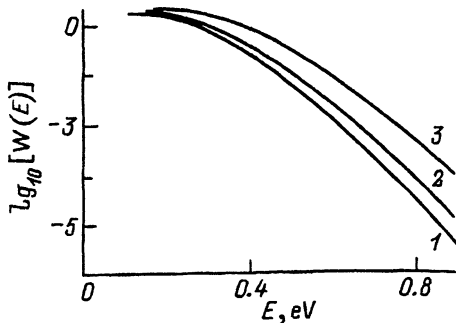


Рис. 2. Рассчитанные в соответствии с (21) зависимости десятичного логарифма $W(E)$ для ячеек с различными размерами.

L (μm): 1 — 0.3, 2 — 0.2, 3 — 0.1. Значения $L_x = 10.0 \mu\text{m}$, $r = 1.600$, $c_s = 5 \cdot 10^5 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$, $D = 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, $\theta_D = 590 \text{ K}$ и $T = 300 \text{ K}$ приняты одинаковыми во всех трех случаях. Энергия системы E и логарифм $W(E)$ даны в расчете на один атом вещества.

пределов интегрирования по распределениям ν и зависимости $S_\nu(E_\nu)$ от ν становится исключительно сложной. К сожалению, в рамках настоящей работы получить ее точное решение не удалось. Приблизительно оценить величину интеграла от $S_\nu(E_\nu)$ по ν можно следующим образом. Вначале вычисляем максимальное (при заданных E_ν и N) значения функции $S_\nu(E_\nu)$. Анализируя соотношения (15), (16), можно показать, что при произвольном значении числа частиц N проблема поиска распределения частиц ν , соответствующего максимальному значению $S_\nu(E_\nu)$, эквивалентна задаче нахождения максимального объема N -мерного параллелепипеда с заданным суммарным значением длин ребер. Решение задачи максимизации объема N -мерного параллелепипеда хорошо известно: требуемый результат достигается при равенстве длин всех N ребер [2]. Применительно к нашей задаче это означает, что максимальное значение $S_\nu(E_\nu) = S_M(E_\nu)$ достигается в том случае, когда энергии каждой из N частиц с заданным суммарным значением E_ν одинаковы и равны E_ν/N . Для двухчастичной системы справедливость этого утверждения иллюстрируется графиком на рис. 1. Теперь интегрирование по индексу ν для каждого из слагаемых (18) может быть формально сведено к вычислению суммарного числа микросостояний, находящихся во всех **неодинаковых** N -мерных параллелепипедах с суммарной длиной ребер E_ν и неотрицательной длиной каждого из них, не превосходящей $k_B \theta_D$. Под неодинаковыми здесь следует понимать параллелепипеды, в каждом из которых длина по меньшей мере одного из ребер отличается от соответствующей длины ребра в другом (других) не менее чем на величину

$$\Delta E = \left[\frac{8(hc_s)^2}{\pi^2 L_x L} \right]^{1/2}, \quad (19)$$

соответствующую «расстоянию» между двумя соседними на шкале энергий одночастичными микросостояниями. Ясно, что суммарное

число микросостояний во всех неодинаковых параллелепипедах будет существенно превосходить значение $S_M(E_\nu)$, поэтому приближенное значение для $\int S_\nu(E_\nu)d\nu$ можно определить по формуле

$$\int S_\nu(E_\nu)d\nu = \left[\frac{\pi^2 L_z L(E_\nu)^2}{8(Nhc_s)^r} \right]^N, \quad (20)$$

из которой при $r = 2$ получаем численное значение $S_M(E_\nu)$ (легко убедиться, что при этом значении параметра r формула (20) определяет число микросостояний внутри N -мерного куба), а приемлемые приближения для $\int S_\nu(E_\nu)d\nu$ получаются в случаях, если величина параметра r находится в диапазоне $1.55 < r < 1.65$. Соотношение (18) преобразуется теперь к виду

$$W(E) \approx \exp\left(-\frac{E_\nu}{k_B T}\right) \sum_{N=N_0}^{\infty} \frac{1}{N!} \left[\frac{\pi^2 L_z L(E_\nu)^2}{8(Nhc_s)^r} \right]^N. \quad (21)$$

На рис. 2 приведены результаты выполненных в соответствии с формулой (21) расчетов графиков $W(E)$ для различных значений L . Из этого рисунка видно, что в отличие от графиков $W(n)$ в модели Скеттрапа (соотношение (4) в Ч. I) функции $W(E)$ имеют не только экспоненциальные участки (логарифмический наклон которых увеличивается с ростом L), но и участки с иным характером зависимости. Другими словами, изложенная выше многофононная (точнее, «многомодовая») модель предсказывает более сложный по сравнению с моделью Скеттрапа характер зависимости вероятности обнаружения состояния фононов от их суммарной энергии. Физический смысл этих результатов и их применение для анализа взаимосвязи между различными оптическими характеристиками материала, его оптическими и электрическими параметрами приводятся в третьей (заключительной) части настоящей работы.

Список литературы

- [1] Animalu A.O.E. Intermediate quantum theory of crystalline solids. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey (1977).
- [2] Mathematical handbook / G.A.Korn, T.M.Korn, McGraw Hill (1968).
- [3] Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М. (1971). 990 с.
- [4] Knights J.C. Structural and Chemical Characterization. In: Physics of Hydrogenated Amorphous Silicon / J.D.Joannopoulos and G.Lucovsky. Springer-Verlag (1984). Pt. 1, 287 p.
- [5] Данченков А.А., Лигачев В.А., Попов А.И. ФТП, 27, 8, 1233 (1993).
- [6] Климонов Ю.Л. Статистическая физика. М. (1982). 608 с.