

УДК 537.333

В. Л. БОНЧ-БРУЕВИЧ, Р. КАЙПЕР<sup>1</sup>

## К ВОПРОСУ О ПРЫЖКОВОЙ ПРОВОДИМОСТИ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Рассмотрены некоторые особенности прыжковой проводимости в неупорядоченных полупроводниках. Указаны условия, при которых наличие большого числа случайных дискретных уровней приводит к безактивационному температурному ходу статической прыжковой проводимости  $\sigma_h$  при низких температурах.

### § 1. Введение и постановка задачи

Одна из основных особенностей неупорядоченного полупроводника состоит в наличии в запрещенной зоне большого числа случайно расположенных дискретных уровней [1—3]. Электроны, локализованные на дискретных уровнях, могут участвовать в переносе постоянного тока только путем перескоков [4]. Естественно ожидать при этом, что указанная особенность энергетического спектра приведет и к известной специфике в кинетике. Соответствующая задача в применении к статической прыжковой проводимости рассматривалась Моттом [5], показавшим, что при определенных условиях температурная зависимость  $\sigma_h$  дается выражением вида  $\exp\{-(T_0/T)^{1/4}\}$ , где  $T_0$  — постоянная,  $T$  — абсолютная температура (в энергетических единицах). Аналогичный результат был получен также в работах [6, 7]).

Вывод Мотта основан на использовании Больцмановской формулы для вероятности прыжка. Это было бы естественно, если бы речь шла о вероятности макроскопической флуктуации (т. е. в данном случае о вероятности многофононного перехода при температуре выше дебаевской). Так же обстоит дело и в случае однофононных прыжков, коль скоро существенные расстояния между уровнями заметно превышают  $T$ . В рассматриваемой системе, однако, могут найтись и уровни, отстоящие от данного на энергию  $\leq T$ . Очевидно, в условиях, когда доминируют переходы между ними, экспоненциальная формула фактически уже не имеет места, и температурная зависимость прыжковой проводимости должна быть еще менее резкой.

Дискретные уровни, близкие по энергии, с большой вероятностью разделены пространственно. Очевидно, вероятность прыжка пропорциональна фактору типа  $\exp\{-R(\gamma_1 + \gamma_2)\}$ , где  $R$  — расстояние между

<sup>1</sup> Прикомандирован к МГУ из университета им. Гумбольдта, Берлин, ГДР.

центрами локализации,  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$  — обратные радиусы локализации электрона, в состояниях между которыми происходит перескок. Интересующие нас однофононные процессы связаны с прыжками на большие расстояния. По этой причине они могут оказаться менее выгодными, чем «активационные» процессы, при которых за счет сравнительно большой энергии перехода оказываются допустимыми небольшие значения  $R$ . В определенной области температур, однако, положение может измениться на обратное, если только плотность состояний вблизи уровня Ферми,  $\rho\{F\}$  достаточно велика<sup>1</sup>.

В настоящей работе рассматривается именно этот случай. Обозначим через  $\hbar\omega_m = T_D$ ,  $F$  и  $\omega$  дебаевскую температуру, уровень Ферми и характерную энергию, определяющую быстроту убывания плотности локализованных состояний по мере удаления от границы непрерывного спектра. Тогда интересующая нас ситуация характеризуется неравенствами

$$\begin{aligned} \exp\{-|F|/T\} \ll 1, \quad |F| \gg \tilde{\omega} \gg T, \quad |F| \gg T_D, \quad T_1 < T < T_2, \\ T_1 = \max\{0,5 \cdot 10^{-4} |F|, 10^{-4} T_0, \sqrt{ms^2 |F|}\}, \\ T_2 = \min\{\tilde{\omega}, T_0 | \ln^4 T_0 | 2s = \sqrt{ms^2 |F|}\}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь  $\text{sum}$  — скорость звука и эффективная масса, определяемая формулой  $|F| = \frac{\hbar^2 \gamma}{2m}$ . Нуль энергии здесь и в дальнейшем совмещен с краем зоны проводимости (дырочной зоны), определяемой как область непрерывного спектра [4];  $F < 0$  (уровень Ферми лежит в запрещенной зоне).

Явное выражение для  $v_h$  зависит от вида двухуровневой функции корреляции  $\psi(R', R'', W', W'')$ . Последняя определяется условно тем, что вблизи точки  $R''$  возникает флуктуационная потенциальная яма, содержащая дискретный уровень  $W''$ , если вблизи точки  $R'$  имеется другая яма с уровнем  $W'$ . Мы ограничимся изучением макроскопически однородных и изотропных систем, в которых функция  $\psi$  зависит только от  $R = |R' - R''|$ .

В работе [4] было использовано факторизованное выражение

$$\psi = [1 - Y_2[(W' - W'')]] \Omega \Phi(R), \quad (2)$$

где  $\Omega$  — объем системы,  $\Phi$  — некоторая функция  $R$  ( $\Phi = \Omega^{-1}$  в пренебрежении корреляцией в пространственном расположении ям),  $Y_2$  — функция Дайсона [10]. Это может быть оправдано при не слишком больших расстояниях между ямами ( $R \lesssim \gamma^{-1}$ ) и достаточно для задачи, поставленной в [4]. С другой стороны, при  $R \rightarrow \infty$  функция  $\psi$  будет стремиться к постоянной. Последовательное вычисление корреляционной функции на промежуточных расстояниях составляет самостоятельную задачу большой сложности. Ограничимся лишь предварительными соображениями, приводящими к простой приближенной формуле для  $\psi$ .

Интересующая нас корреляция связана в конечном счете с эффектом отталкивания уровней (ср. [1]). Будем мысленно сближать ямы, которые на большом расстоянии друг от друга содержали бы одинаковые уровни. При конечных значениях  $R$  эти уровни расщепятся и возникнут два уровня  $W'$  и  $W''$ , причем по порядку величины

<sup>1</sup> В сущности мы имеем ту же ситуацию, что и при безызлучательных переходах в примесных центрах [8]; при высоких температурах происходят многофононные переходы, требующие температурной активации, при низких — туннельные переходы.

$$|W' - W''| \equiv \Delta \sim \sqrt{W'W''} \exp \{-R [\gamma(W') + \gamma(W'')]\}.$$

В рассматриваемом случае  $\Delta$  есть не что иное, как энергия фонона  $\hbar\omega$ . При  $W'$  и  $W''$ , близких к  $F$ , имеет смысл аппроксимация

$$\psi = \theta(R - R_0), \quad (3)$$

где  $\theta$  — ступенчатая функция, а

$$R_0 = \frac{1}{2\gamma(F)} \ln \left( \frac{|F|}{\hbar\omega} \right). \quad (4)$$

Условие  $T > 10^{-4}T_0$  может оказаться довольно жестким.

Заметим, однако, что оно основано на предположении об однофононном характере перескоков. При учете многофононных процессов оно отпадает, а полученный в дальнейшем вывод о температурной зависимости  $\sigma_h$  остается в силе.

## § 2. Формула для электропроводности

При вычислении электропроводности рассматриваемой системы по стандартной формуле Кубо возникает серьезная трудность, связанная с различием между напряженностью приложенного поля  $\tilde{E} = \frac{V}{L}$

( $V$  — напряжение на образце,  $L$  — его длина) и напряженностью действующего поля,  $E^*$  (понимаемой как взятый с обратным знаком градиент электрохимического потенциала [11]). Формула Кубо описывает реакцию системы на последнее, в то время как экспериментально статическая электропроводность определяется по отношению к среднему полю. Разница между  $\tilde{E}$  и  $E^*$  в неупорядоченной системе отнюдь не обязательно мала; при этом напряженность действующего поля даже в макроскопически однородном случае может сложным образом зависеть от координат<sup>1</sup>. Обойти эту трудность [6] можно в сущности при отказе от формулы Кубо и сведении задачи к проблеме перколяции; при этом, однако, возникают иные трудности.

В интересующих нас условиях, видимо, удобен несколько иной подход. В рассматриваемых системах имеются три характерных масштаба длины:  $l_1$ ,  $l_2$  и  $l_3$ . Они определяют размеры «области пространственной дисперсии», «физически бесконечно малого объема» и области, в которой происходит самоусреднение наблюдаемых величин по случайному полю. Величина  $l_1$  — порядка феноменологически определяемой длины свободного порога (если речь идет о движении носителей заряда с непрерывным энергетическим спектром) или порядка существенного радиуса локализации (если спектр дискретный). Далее,  $l_2$  во всяком случае превышает  $\bar{n}^{-1/3}$ , где  $\bar{n}$  — средняя концентрация носителей заряда<sup>2</sup>. Наконец, длина  $l_3$  — макроскопическая. Будем считать, что  $l_1 \ll l_2 \ll l_3$ .

Можно ввести локальную плотность тока, которая дается выражением

$$j_\alpha(x) = \sigma_{h,\alpha,\beta}(x) E_\beta^*(x). \quad (5)$$

Здесь

$$\vec{E}^* = -\nabla\varphi^*, \quad \varphi^* = \varphi + \mu/e, \quad (6)$$

<sup>1</sup> Видимо, эти соображения в той или иной форме высказывались разными авторами.

<sup>2</sup> Длина, на которой может заметно изменяться напряженность действующего поля, не меньше  $l_2$ .

$\varphi(x)$  — потенциал истинного среднего поля,  $\mu$  — химический потенциал (вычисленный при  $\varphi=0$ ),  $\sigma_{h,\alpha,\beta}$  — тензор статической прыжковой электропроводности (еще не усредненный по случайному полю). В слабом поле

$$E_{\alpha}^*(\vec{x}) = \eta_{\alpha\beta}(x) \tilde{E}_{\beta}, \quad (7)$$

где  $\eta_{\alpha\beta}$  — безразмерный случайный тензор. Направим ось  $ox$  вдоль вектора  $\tilde{E}$ . Запишем наблюдаемое на опыте среднее значение электропроводности  $\sigma_h$  в виде

$$\sigma_h = \langle \sigma_{\alpha\beta} \eta_{\beta\alpha} \rangle. \quad (8)$$

Тензор  $\eta_{\alpha\beta}$  в принципе можно вычислить с помощью уравнения Пуассона. В слабом приложенном поле имеем.

$$\varphi^* = \delta\varphi + \delta \frac{\mu}{e} = \delta\varphi + \frac{1}{e} \frac{d\mu}{dn} \Big|_{\varphi^*=0} \delta n, \quad (9)$$

где  $n(\vec{x})$  — концентрация носителей заряда,  $\delta\varphi$  и  $\delta n$  — вариации  $\varphi(x)$  и  $n(x)$  при наложении поля  $\tilde{E}$ . Очевидно

$$\delta n(x) = 2\pi e \int d\vec{x}' K(x, x') \varphi^*(x'),$$

где ядро  $K$  выражается через двухчастичную функцию Грина:

$$K(\vec{x}, \vec{x}') = \langle\langle \hat{n}(\vec{x}) | \hat{n}(x') \rangle\rangle_{r,\omega=0}^{(-)}$$

Здесь  $\hat{n}$  — оператор плотности числа частиц; нормировка та же, что и в [12].

Таким образом, полагая  $a = 2\pi d\mu/dn|_{\varphi^*=0}$ , имеем

$$\delta\varphi(\vec{x}) = \varphi^*(\vec{x}) - a \int d\vec{x}' K(x, x') \varphi^*(x'). \quad (10)$$

Обозначим через  $\epsilon_{\alpha\beta}(x)$  локальный тензор диэлектрической проницаемости (еще не усредненный по случайному полю). Тогда

$$-\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left( \epsilon_{\alpha\beta} \frac{\partial\varphi}{\partial x_{\beta}} \right) = 4\pi\rho(x), \quad (11)$$

где  $\rho(x)$  — объемная плотность заряда. Варьируя (11), естественно считать, что (в линейном приближении!) под действием приложенного поля изменяется только локальная концентрация носителей заряда. Тогда  $\delta\rho(x) = -e\delta n(\vec{x})$ . Комбинируя это выражение с формулой (10), получим уравнение для  $\varphi^*$ :

$$\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left\{ \epsilon_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left[ \varphi^*(x) - a \int d\vec{x}' K(\vec{x}, \vec{x}') \varphi^*(x') \right] \right\}. \quad (12)$$

Согласно (7)

$$\eta_{\alpha\beta} = -L/V \frac{\partial\varphi^*}{\partial x_{\alpha}}.$$

Граничные условия к уравнению (12) получаются из обычных условий электростатики, накладываемых на потенциал  $\varphi(x)$  и из закона Кирхгофа. В частности, имеем

$$\left[ \varphi^*(x) - a \int_{x=0}^{x=L} dx' K(\vec{x}, \vec{x}') \varphi^*(x') \right]_{x=0}^{x=L}. \quad (13)$$

По условию поверхности  $x=0$  и  $x=L$  — эквипотенциальные.

Значения  $\eta_{\alpha x}$  ограничены. Отсюда, в частности, вытекает, что при наличии в образце изолирующей «прослойки» наблюдаемая на опыте проводимость (8), как и следовало ожидать, будет равна нулю.

Величины  $\epsilon_{\alpha\beta}$ ,  $K$  и  $a$ , вообще говоря, зависят от температуры. Однако при достаточно низких температурах, когда  $T \ll |F|$ , а функция  $\epsilon_{\alpha\beta}(T)$  выходит на насыщение, эта зависимость становится слабой и исчезнет. Следовательно, для определения интересующей нас температурной зависимости прыжковой проводимости достаточно исследовать только  $\sigma_{h, \alpha\beta}(x)^1$ .

### § 3. Локальная проводимость

Пусть  $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$  есть вещественная часть локального тензора электропроводности на частоте  $\omega$ , вычисленного в приближении «жесткого материала». Тогда, опуская для краткости тензорные индексы и аргумент  $\vec{x}$ , можем записать (ср. [9])

$$\sigma_h = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega K(\omega) \sigma(\omega), \quad (14)$$

где  $K$  — ядро, которое в рассматриваемой задаче можно вычислять по теории возмущений. Обозначим через  $k$ ,  $\omega_k$ ,  $N_k$  и  $B_k$  квантовые числа, определяющие состояние фонона, соответствующие частоты, функцию Планка и диагональный матричный элемент энергии взаимодействия локализованного электрона с фононами. Как и в (4), будем считать величину  $|B_k|^2$  практически не зависящей от энергии электрона. Это, видимо, оправдано, если существенные длины волн фононов велики по сравнению с  $\gamma^{-1}(F)$ , что мы и будем предполагать в дальнейшем. С другой стороны, при выполнении обратного неравенства матричные элементы  $B_k$  будут малы.

Дабы не вводить лишних ненадежных аппроксимаций, будем просто обрывать суммы по частотам фононов при  $\omega_k = \bar{\omega} \simeq \frac{\sqrt{ms^2|F|}}{\hbar}$ , где  $s$  — скорость звука. Будем считать при этом, что  $\bar{\omega} \ll T$ . Ограничиваясь членами первого порядка по  $|B_k|^2$ , имеем

$$K(\omega) = \sum_k \frac{|B_k|^2}{2\hbar^2\omega_k^2} \{N_k \delta(\omega_k - \omega) + (N_k + 1) \delta(\omega_k + \omega)\}. \quad (15)$$

В неупорядоченной системе совокупность квантовых чисел  $k$  сводится, строго говоря, только к самой частоте  $\omega_k$  (ограничимся лишь одной ветвью фононного спектра). При этом  $\sum_k (\dots) \rightarrow \Omega \int d\omega_k D(\omega_k) (\dots)$ , где точками обозначено суммируемое выражение, а  $D(\omega_k)$  есть плотность фононных состояний.

Для низкочастотных акустических колебаний имеет смысл гидродинамическое описание, и тогда можно с известным основанием говорить

<sup>1</sup> При этом, разумеется, предполагается, что многоуровневые корреляционные функции, которые надо использовать для усреднения в (8), слабо зависят от температуры. Из (3) и (4) следует, что это реально.

о волновом векторе фонона. При этом для плотности состояний продольных акустических фононов справедливо обычное выражение  $D(\omega_k) = \omega_k^2 / 2\pi^2 s^3$ . В этих же условиях оправдано и использование обычного метода потенциала деформации. Тогда

$$|B_k|^2 = \frac{E_1^2 \hbar \omega_k}{2\Omega ds^2},$$

где  $d$  — плотность вещества,  $E_1$  — потенциал деформации.

В общем случае можем положить

$$\Omega D(\omega_k) |B_k|^2 = \frac{\hbar \omega_k^3}{2\pi^2 ds^5} a(\omega_k), \quad (16)$$

где  $a(\omega_k)$  безразмерный поправочный множитель ( $a(\omega_k) \rightarrow 1$  при  $\omega_k \rightarrow 0$ ). Вычисление его есть самостоятельная задача, однако в интересующей нас области низких температур он влияет лишь на величину  $\sigma_h$ , но не на температурную ее зависимость.

В рассматриваемых условиях для  $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$  (в гауссовых единицах, при  $\omega > 0$ ) запишем

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}(\omega) = & \frac{e^2}{\Omega} \omega T \text{th} \left( \frac{\hbar \omega}{2T} \right) \sum_{\lambda', \lambda''} \delta(W_{\lambda'} - F) \times \\ & \times \delta(W_{\lambda''} - W_{\lambda'} - \hbar \omega) (\lambda' | x_\alpha (\lambda'' | \lambda' | x_\beta | \lambda'). \end{aligned} \quad (17)$$

Здесь  $\lambda', \lambda''$  — совокупности квантовых чисел, описывающих электронные состояния с энергиями  $W_{\lambda'}, W_{\lambda''}$ . В отсутствие какой-либо случайной симметрии для локализованных состояний мы имеем (ср. [4]):  $\lambda' = \{W_{\lambda'}, R_{\lambda'}, S_{\lambda'}\}$ , где  $R_{\lambda'}$  и  $S_{\lambda'}$  — радиус-вектор центра локализации и спиновое квантовое число. В силу (1), (3) и (4)  $R_0 \gg 1/2\gamma(F)$ . Следовательно, для оценки матричных элементов координат можно воспользоваться асимптотикой функций дискретного спектра. Тогда, с учетом соображений размерности, имеем в (17):

$$(\lambda' | x | \lambda'') \simeq C \gamma^3(F) \frac{\hbar \omega}{|F|} R^4 \exp\{-R\gamma(F)\}, \quad (18)$$

где  $C$  — численная постоянная.

#### § 4. Температурная зависимость прыжковой проводимости

Замечая, что  $2N_k + 1 = \text{cth} \frac{\hbar \omega_k}{2T}$ , и комбинируя формулы (15), (16), (17), (18) и (8), получаем

$$\sigma_h = AT, \quad (19)$$

где  $A$  — постоянная<sup>1</sup>.

В условиях (1) температурная зависимость статической прыжковой электропроводности оказывается не экспоненциальной, а гораз-

<sup>1</sup> Для иллюстрации укажем значение  $A$ , вычисленное с помощью (3) и (4) в пренебрежении пространственным изменением действующего поля (тогда  $\eta_{\alpha\beta} = 1$ ):

$$A = \frac{4e^2 E_1^2 \rho^3(F) C^2 \hbar \omega^5 \sqrt{s\pi}}{3F^2 ds^5 \gamma^5(F)} \left( \frac{5}{e} \right)^{10} \int_0^1 x^{5a(x\bar{\omega})} dx.$$

до менее резкой — линейной, если  $\eta_{\alpha\beta}$  не зависит от  $T$ . В этих условиях опознать прыжковый механизм проводимости можно, измеряя одновременно температурную зависимость  $\sigma_h$  и частотную зависимость вещественной части электропроводности на переменном токе.

Заметим, что результат (19) связан с неравенствами (1), но не с аппроксимациями типа (3). Более того, как уже отмечалось, самое жесткое из неравенств (1) не обязательно в силу возможных многофононных процессов. Все же вероятность последних, видимо, довольно мала. В связи с этим отметим, что в любой области температур роль фононов при перескоках могут играть и другие элементарные возбуждения. В магнитных полупроводниках интересны перескоки с участием спиновых волн (при этом вместо  $\hbar\omega_m$  появляется величина порядка температуры Кюри). В любых полупроводниках могут оказаться интересными перескоки с испусканием фотонов. Очевидно, этот аналог рекомбинационного излучения следует искать при достаточно низких температурах, когда многофононные процессы мало вероятны и при энергиях квантов, превышающих  $\hbar\omega_m$ . При этом плотность состояний на уровне Ферми должна быть не очень велика. По-видимому, именно так обстоит дело в не слишком узкозонных полупроводниках.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Мотт Н. Ф. Электроны в неупорядоченных структурах. М., 1969.
2. Cohen M. H., Fritzsche H., Ovshinsky S. B. Phys. Rev. Lett., 22, 1065, 1969.
3. Лифшиц И. М. «Успехи физических наук», 83, 627, 1964.
4. Бонч-Бруевич В. Л. ЖЭТФ, 59, 985, 1970.
5. Mott N. F. Phil. Mag., 19, 8351, 1969.
6. Ambegaokar V., Halperin B. J., Langer J. S. Preprint N.13—71. University of Helsinki, 1971<sup>1</sup>.
7. Brenig W., Woelfle P., Dohler G. Phys. Lett., 35A, 77, 1971.
8. Kubo R. Phys. Rev., 86, 929, 1952.
9. Бонч-Бруевич В. Л., Другова А. А. «Физика и техника полупроводников», 1, 43, 1967.
10. Dyson F. I. Math. J. Phys., 4, 713, 1963.
11. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. М., 1957.
12. Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В. Метод функций Грина в статистической механике. М., 1962.

Поступила в редакцию  
15.3 1972 г.

Кафедра  
полупроводников

<sup>1</sup> Авторы весьма признательны проф. Амбегаокару за присылку препринта.