Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 5 — 1975

УДК 621.315.592

И. П. ЗВЯГИН, Э. О. МАНУЧАРЯНЦ

К ТЕОРИИ ПРЫЖКОВОЙ ПРОВОДИМОСТИ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ С УЧАСТИЕМ ФОНОНОВ

С помощью процедуры расцепления получено уравнение для двухчастичной функции Грина, отвечающее суммированию бесконечного ряда в разложении прыжковой проводимости по константе электрон-фононного взаимодействия. Необходимость суммирования вызвана возникновением в низкочастотной области расходимостей в высших членах ряда.

Введение и постановка задачи

В теории прыжковой проводимости с участием фононов один из возможных подходов связан с использованием выражений типа формулы Кубо, связывающих проводимость с двухчастичной функцией Грина [1—4]. Поскольку проводимость в отсутствие фононов в рассматриваемой системе обращается в нуль, а константу электрон-фононного взаимодействия g можно считать малой, на первый взгляд естественным представляется подход, связанный с вычислением функции Грина по теории возмущений. Подобные расчеты [1—4] приводят, однако, к результатам, отличающимся от результатов расчета с использованием определенной процедуры расцепления уравнений для матрицы плотности [5—6], а также от результатов основных исходных положений работы [7].

Для выяснения причин названного расхождения в настоящей работе выводится уравнение для двухчастичной функции Грина с должным учетом локализованного характера электронных состояний. Полученное уравнение содержит параметр $g^2\omega^{-1}$. Отсюда следует, что вычисление прыжковой проводимости при $\omega \to 0$ сводится не к формальному разложению функции Грина по константе электрон-фононной связи ω и ограничению первым неисчезающим приближением, а требует суммирования бесконечного ряда теории возмущений.

Мы рассматриваем стандартную модель, обычно используемую при рассмотрении прыжковой проводимости по локализованным состояниям. Именно считая, что уровень Ферми лежит достаточно глубоко в «запрещенной зоне» (понимаемой как щель для подвижности), а температура не слишком высока, можно пренебречь вкладом делокализованных носителей заряда в проводимость.

Полный набор волновых функций включает волновые функции как локализованных, так и делокализованных состояний. Поскольку вкладом делокализованных состояний пренебрегаем, будем считать, что совокупность волновых функций локализованных состояний с координатами центров локализации $\mathbf{R}_m$ и энергиями ε_m образует полную систему.

Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{e-ph} + \hat{H}_F, \tag{1}$$

где

$$\hat{H}_0 = \sum_m \varepsilon_m a_m^+ a_m + \sum_\varkappa \omega_\varkappa b_\varkappa^+ b_{-\varkappa},$$

$$\hat{H}_{e-ph} = \sum_{i,k,\varkappa} V_{ik}^\varkappa a_i^+ a_k (b_\varkappa + b_{-\varkappa}^+),$$

$$\hat{H}_F = -eE \sum_{m,n} x_{mn} e^{-i\omega t}. \tag{2}$$

Здесь ε_m, a_m^+, a_m — энергия и операторы рождения и уничтожения электрона в состоянии m, $\omega_\varkappa$, $b_\varkappa^+$, $b_\varkappa$ — энергия и операторы рождения и уничтожения фононов в состоянии $\varkappa$, $V_{ik}^\varkappa$ — матричный элемент электрон-фононного взаимодействия ($V_{ik}^\varkappa$ — величина порядка g), ex_{mn} — матричный элемент оператора проекции дипольного момента системы на ось x, E — напряженность электрического поля.

Гамильтониан $\hat{H}_F$ записан в пренебрежении различием между внешним и действующим на носитель заряда электрическими полями.

Используя формулу Кубо, запишем зависящую от частоты проводимость в виде

$$\sigma_{xx}(\omega) = \frac{re^2\omega}{\Omega} \sum_{i,k,l,m} x_{ik} x_{lm} G_{ik,lm}(\omega). \tag{3}$$

Здесь

$$G_{ik,lm}(\omega) = -i \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t) e^{i\omega t} \langle [a_i^+(t) a_k(t), \quad a_l^+ a_m] \rangle \, dt. \tag{4}$$

Фурье-образ запаздывающей двухчастичной функции Грина, Ω — объем системы. В силу локализованного характера волновых функций электронных состояний недиагональные элементы в сумме (4) экспоненциально малы. Поэтому ограничимся диагональной аппроксимацией:

$$\sigma_{xx}(\omega) = \frac{ie^2\omega}{\Omega} \sum_{i,l} x_{ii} x_{ll} G_{ii,ll}(\omega). \tag{5}$$

В дальнейшем везде $\hbar = 1$.

Уравнения для функции Грина

Запишем цепочку уравнений для функции $G_{ii,ll}(t)$:

$$i \frac{\partial G_{ii,ll}}{\partial t} = \sum_{\varkappa,k} [V_{ik}^\varkappa (G_{ik\varkappa,ll}^- + G_{ik\varkappa,ll}^+) - V_{ki}^\varkappa (G_{ki\varkappa,ll}^- + G_{ki\varkappa,ll}^+)], \tag{6}$$

$$i\frac{\partial G^{\mp}_{ik\varkappa,ll}}{\partial t}+(\omega_{ik}\mp\omega_\varkappa)G^{\mp}_{ik\varkappa,ll}=\delta(t)\,(h^{\mp}_{il\varkappa}-h^{\mp}_{lk\varkappa})-$$

$$-\sum_{m,\varkappa'}V^{\varkappa'}_{mi}\ll\tilde a^{+}_m\tilde a_k\tilde b_\varkappa(\tilde b_{\varkappa'}+\tilde b^{+}_{-\varkappa'})\,|\,a^{+}_l a_l\gg-\sum_{n,\varkappa'}V^{\varkappa'}_{kn}\ll\tilde a^{+}_i\tilde a_n\tilde b_\varkappa(\tilde b_{\varkappa'}+$$

$$+\tilde b^{\pm}_{-\varkappa'})\,|\,a^{+}_l a_l\gg\mp\sum_{m,n}V^{-\varkappa}_{mn}\ll\tilde a^{+}_m\tilde a_n\,\tilde a^{+}_i\tilde a_k\,|\,a^{+}_l a_l\gg. \tag{7}$$

Здесь

$$G^{\mp}_{ik\varkappa,ll}=-i\theta(t)\langle[a^{+}_i(t)\,a_k(t)\,\beta^{\mp}_\varkappa(t),\ a^{+}_l a_l]\rangle\equiv\langle\tilde a^{+}_i\tilde a_k\tilde\beta^{\mp}_\varkappa\,|\,a^{+}_l a_l\gg,$$

$$h^{\mp}_{il\varkappa}=\langle a^{+}_i a_l\beta^{\mp}_\varkappa\rangle,$$

$$\beta^{-}_\varkappa\equiv b_\varkappa,\qquad \beta^{+}_\varkappa\equiv b^{+}_{-\varkappa}. \tag{8}$$

Проведем обычное расцепление по малости как электрон-фононного, так и электрон-электронного взаимодействий:

$$\ll\tilde a^{+}_m\tilde a_k(\tilde b_\varkappa+\tilde b^{+}_{-\varkappa})\,\beta^{\pm}_{\varkappa'}\,|\,a^{+}_l a_l\gg\cong\left(N_\varkappa+\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\right)G_{mk}\delta_{-\varkappa'\varkappa};$$

$$\ll\tilde a^{+}_m\tilde a_n\tilde a^{+}_i\tilde a_k\,|\,a^{+}_l a_l\gg\cong n_k G_{in,ll}\,\delta_{mk}+(1-n_i)\,G_{mk,ll}\,\delta_{ni}. \tag{9}$$

Здесь n_k — функция Ферми, $N_\varkappa$ — функция Планка.

С учетом (9) после довольно громоздких преобразований получим замкнутое уравнение для двухчастичной функции $G_{ii,ee}(\omega)$:

$$\omega G_{ii,ll}(\omega)=\Delta_{il}(\omega)+\sum_{k,\varkappa}[M^{\varkappa}_{ki}(\omega)\,G_{kk,ll}(\omega)-M^{\varkappa}_{ik}(\omega)\,G_{ii,ll}(\omega)], \tag{10}$$

здесь

$$M^{\varkappa}_{ki}(\omega)=|V^{\varkappa}_{ik}|^2\left(\frac{N_\varkappa+1-n_i}{\omega_{ki}-\omega_\varkappa-\omega}+\frac{N_\varkappa+n_i}{\omega_{ki}+\omega_\varkappa-\omega}-\right.$$

$$\left.-\frac{N_\varkappa+1-n_i}{\omega_{ki}-\omega_\varkappa+\omega}-\frac{N_\varkappa+n_i}{\omega_{ki}+\omega_\varkappa+\omega}\right), \tag{11}$$

$\Delta_{il}(\omega)$ — неоднородный член уравнения, имеющий вид

$$\Delta_{il}(\omega)=\sum_{k,\varkappa}(\delta_{ik}-1)\,(F_{ik\varkappa}(\omega)\,p^{\varkappa}_{ik}(\omega)+F_{ki\varkappa}(\omega)\,p^{\varkappa}_{ki}(\omega)), \tag{12}$$

где

$$F_{ik\varkappa}=\frac{N_\varkappa(n_i-n_k)-n_k(1-n_i)}{\omega_{ik}+\omega_\varkappa}. \tag{13}$$

$$p^{\varkappa}_{ik}=|V^{\varkappa}_{ik}|^2\left(\frac{1}{\omega_{ik}+\omega_\varkappa+\omega}-\frac{1}{\omega_{ik}+\omega_\varkappa-\omega}\right). \tag{14}$$

В дальнейшем будем считать, что частота внешнего поля ω много меньше характерной частоты электронных переходов ω_{ik}.

В этом приближении уравнение (10) примет вид

$$\omega G_{ii,ll}(\omega) = i\beta n_i \sum_k W_{ik}\Big[(1-n_l)\delta_{lk} - (1-n_k)\delta_{il} + \left(\frac{G_{kk,ll}(\omega)}{\beta n_k} - \frac{G_{ii,ll}(\omega)(1-n_k)}{\beta n_i(1-n_i)}\right)\Big], \tag{15}$$

здесь

$$W_{ik} = 2\pi\sum_\varkappa |V_{ik}^\varkappa|^2 [N_\varkappa \delta(\omega_{ik}+\omega_\varkappa) + (N_\varkappa+1)\delta(\omega_{ik}-\omega_\varkappa)] \tag{16}$$

квантовомеханическая вероятность переходов с участием фононов, $\beta = \frac{1}{kT}$. Заметим, что этот случай соответствует «марковскому приближению», обсуждавшемуся в [5, 6].

Введем функции

$$G_i = e\sum_l x_{ll} G_{ii,ll}, \tag{17}$$

которые пропорциональны изменению средних чисел заполнения узлов в электрическом поле.

Действительно, изменение среднего числа заполнения δn_i i-го центра в линейном по электрическому полю приближении описывается соотношением

$$\delta n_i(\omega) = -EG_i(\omega). \tag{18}$$

Для функций $G_i(\omega)$ из (15) получаем

$$\omega G_i(\omega) = i\beta\sum_k n_i(1-n_k) W_{ik}\Big[e(x_{kk}-x_{ii}) + \frac{G_k(\omega)}{\beta n_k(1-n_k)} - \frac{G_i(\omega)}{\beta n_i(1-n_i)}\Big]. \tag{19}$$

Уравнение (19) совпадает с уравнением для определения изменения чисел заполнения узлов, полученным в работе [5].

Обсуждение

С учетом (17) и (19) выражение для проводимости принимает вид

$$\sigma_{xx}(\omega) = \frac{\beta e}{2\Omega}\sum_{i,k} n_i(1-n_k) W_{ik}(x_{ii}-x_{kk}) \times \times\Big[e(x_{ii}-x_{kk}) + \frac{G_i(\omega)}{\beta n_i(1-n_i)} - \frac{G_k(\omega)}{\beta n_k(1-n_k)}\Big]. \tag{20}$$

Как и следовало ожидать, проводимость пропорциональна W_{ik}, т. е. g^2. Представляет интерес сравнить (19) и (20) с результатами первого неисчезающего приближения в формальном разложении проводимости (или самой функции G_i) в ряд по степеням g^2 [1, 2]. Соответствующие поправки при такой процедуре получаются путем отыскания последовательных приближений по H_{e-ph} в линейном по электрическому полю решений уравнения для матрицы плотности:

$$i\frac{\partial\rho}{\partial t} = [\hat H_0 + \hat H_{e-ph} + \hat H_F, \rho]. \tag{21}$$

Первое неисчезающее приближение (пропорциональное g^2) дает выражения типа (19) и (20), в которых отсутствуют второй и третий члены в квадратных скобках. Пренебречь ими при $\omega \to 0$ нельзя, поскольку при низких частотах формальные итерации уравнения (19) в предположении малости параметра g^2 недопустимы. Действительно, полученное разложение расходится при $\omega \to 0$, ибо содержит параметр $(\omega\tau)^{-1}$, где $\tau \sim g^{-2}$ — некоторое характерное время перескока с участием фононов.

Напротив, в высокочастотном пределе $\omega\tau \gg 1$ вкладом функций G_i в проводимость можно пренебречь, и предельное значение проводимости есть

$$\sigma_{\text{в.ч.}} = \frac{\beta e^2}{2\Omega} \sum n_i (1 - n_k) W_{ik} (x_{ii} - x_{kk})^2. \tag{22}$$

Как видно из (20), выражение для проводимости в общем случае не замкнуто: оно содержит неизвестные функции G_i, для отыскания которых нужно решить систему алгебраических уравнений (1)—(9). В статическом пределе (при $\omega=0$) решение этой системы эквивалентно отысканию сопротивления сложной разветвленной сети случайных сопротивлений (модель Миллера — Абрахамса [8]).

Появление дополнительных членов в правой части выражения (20) связано с эффектом изменения средних чисел заполнения узлов электрическим полем (функция G_i как раз пропорциональна изменению заселенности i-го центра). В рассматриваемой случайной системе названные изменения в статическом случае зависят лишь от конкретных статистических свойств системы центров и не зависят от константы электрон-фононного взаимодействия g. Последняя определяет скорость установления стационарного состояния.

Если для нахождения проводимости в постоянном поле приходится привлекать дополнительные соображения (например, идеи теории перколяции), то в выражении (22) можно прямо выполнить усреднение по независимым парам центров. Это усреднение приводит к степенной зависимости проводимости от температуры $\sigma_{\text{в ч}} \sim T^{\xi}$, где показатель степени ξ оказывается зависящим как от конкретного вида функций $V_{ik}^{\varkappa}$ в (2), так и от деталей хода волновых функций локализованных состояний, а не только от их асимптотической формы, которой оказывается недостаточно.

Выражения (19) и (20) представляются весьма удобными и при изучении частотной зависимости прыжковой проводимости в интервале частот, когда необходимо принимать во внимание эффекты, связанные с изменением заселенностей центров.

Авторы благодарны В. Л. Бонч-Бруевичу и А. Г. Миронову за обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Čápek V. «Czech. J. Phys.», B2, 1122, 1972.
2. Čápek V. «Phys. St. Sol.» (b), 60, K 5, 1973.
3. Костадинов И. З., Покровский В. Л. «Физика твердого тела», 14, 2193, 1972.
4. Scher H., Lax M. «J. Non—Cryst. Sol.», 8—10, 497, 1972.
5. Zvigin I. P., Keiper R. «Wiss. Z. Humbolt Universität», 24, 459, 1972.
6. Bonch-Bruevich V. L., Mironov A. G., Zviagin I. P. «La Rivista del Nuovo Cim.», 3, 321, 1973.
7. Ambegaokar V., Halperin B. I., Langer J. S. «Phys. Rev.», B4, 2612, 1971.
8. Miller A., Abrahams E. «Phys. Rev.», 120, 745, 1960.

Поступила в редакцию
20.2 1974 г.

Кафедра
физики полупроводников