ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1980, т. 21, № 1

УДК 593.293.011.2

В. Л. БОНЧ-БРУЕВИЧ

К ВОПРОСУ О ВЫЧИСЛЕНИИ ПРОВОДИМОСТИ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ В СИЛЬНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ ПРИ НАЛИЧИИ СЛУЧАЙНОГО ПОЛЯ

§ 1. Введение. Как неоднократно отмечалось разными авторами, обычный нагрев газа свободных носителей заряда в большинстве неупорядоченных полупроводников вряд ли возможен в силу малой длины свободного пробега. При этом указывались три возможных механизма, ответственных за отклонения от закона Ома в указанных материалах:

1. Делокализация части носителей заряда, занимавших (в отсутствие напряжения) не слишком глубокие дискретные уровни *.

2. Непосредственное влияние электрического поля на вероятность прыжка.

3. Перераспределение электронов по локальным уровням под действием поля (об этом иногда говорят как о нагреве локализованных носителей заряда).

Мы будем рассматривать первый из этих механизмов, хотя общие качественные соображения о роли случайного поля остаются в силе и в применении ко второму.

При интерпретации экспериментальных данных обычно вычисляют вероятность делокализации, обусловленной изменением формы флуктуационной потенциальной ямы в однородном поле, отождествляя затем его напряженность с величиной

$$\mathbf{E} = \frac{V}{L}\boldsymbol{\nu}. \tag{1}$$

Здесь V — напряжение на образце, L — длина его в направлении тока, $\boldsymbol{\nu}$ — единичный вектор в том же направлении.

В применении к достаточно большим образцам без случайного поля такая процедура, по-видимому, оправдана, так как возможная неоднородность электрического поля в таких образцах связана лишь с граничными эффектами. Однако при наличии случайного поля в материале, как известно, может возникнуть случайное искривление зон, т. е. образец может быть внутренне неоднородным [5]. Пространственный масштаб этой неоднородности велик по сравнению с характерным радиусом локализации (что оправдывает прием, используемый при решении квантовомеханической части задачи), но мал по сравнению с размерами образца (образец макроскопически однороден). Кроме того, случайное поле, само по себе, разумеется, не создавая результирующего тока (плотность которого пропорциональна градиенту электрохимического потенциала ∇F), все же фигурирует в гамильтониане

* Под делокализацией здесь и в дальнейшем понимается переход носителей заряда в состояния, лежащие выше истинного (не обязательно совпадающего с классическим) уровня протекания.

задачи. Это означает, что вероятность делокализации носителей заряда надо вычислять в эффективном поле.

$$\mathbf{E} = \frac{1}{e} \nabla U - \nabla \delta\varphi. \tag{2}$$

Здесь e — абсолютная величина заряда электрона, принимаемая в дальнейшем равной единице; $U(\mathbf{x})$ — потенциальная энергия электрона в случайном поле (нормированная так, что среднее ее значение равно нулю); $\delta\varphi(\mathbf{x})$ — изменение потенциала, связанное с напряжением V. Функция $U(\mathbf{x})$ может иметь и «неэлектростатическую» часть, $U_1(\mathbf{x})$, обусловленную, например, деформационным взаимодействием носителей заряда со случайными вариациями плотности *:

$$U(\mathbf{x}) = -\varphi_0(\mathbf{x}) + U_1(\mathbf{x}). \tag{3}$$

Здесь $\varphi_0(\mathbf{x})$ — случайный электрический потенциал в образце при $V=0$; полный потенциал есть

$$\varphi = \varphi_0 + \delta\varphi. \tag{4}$$

Пользуясь выражением (2), следует иметь в виду два обстоятельства.

Во-первых, под $U(\mathbf{x})$ здесь следует понимать лишь плавную (в указанном выше смысле) часть случайного поля, не создающую флуктуационных уровней интересующего нас типа.

Во-вторых, плавные флуктуации случайного поля сами по себе, в отсутствие внешнего поля, делокализацию носителей заряда вызвать, разумеется, не могут. Мы учтем это обстоятельство, вводя соответствующий нормирующий множитель N в выражение для наблюдаемой на опыте плотности тока. Именно, имея в виду опыты, в которых непосредственно измеряются напряжение на образце и сила тока, мы должны записать плотность тока в виде

$$\mathbf{j} = N \langle \sigma (F + \delta\varphi - U, \quad \nabla \delta\varphi - \nabla U) \nabla F \rangle. \tag{5}$$

Здесь угловые скобки обозначают усреднение по случайному полю, а σ есть локальная проводимость; в отсутствие случайной части ∇F среднее значение σ определяло бы проводимость, наблюдаемую на опыте. Зависимость σ от первого и второго аргументов обусловлена соответственно статистическими и динамическими факторами. Явный вид множителя N удобно специализировать в дальнейшем.

§ 2. Основные уравнения. Аппроксимация «якобы нейтральности». Для определения вида функций $\varphi(\mathbf{x})$ и $F(\mathbf{x})$ следует написать стандартные уравнения:

$$\operatorname{div} \mathbf{j} = 0; \tag{6}$$

$$\nabla^2 \varphi_0 = \frac{4\pi}{\varepsilon} [n_0 - n(F_0 + \varphi_0 - U_1)]; \tag{7}$$

$$\nabla^2 \varphi = \frac{4\pi}{\varepsilon} [n_0 - n(F + \varphi - U_1)]. \tag{8}$$

Здесь ε — диэлектрическая проницаемость образца; через F_0 обозначен (постоянный в пространстве) электрохимический потенциал при

* В дальнейшем считается, что U_1 не зависит от V. В принципе возможная такая зависимость привела бы — в рамках принятого ниже подхода — лишь к некоторому усложнению обозначений.

$V=0$, а $n_0=<n(F_0+\varphi_0-U_1)>$. По условию макроскопической однородности n_0 не зависит от координат. Граничные условия к уравнениям (6)—(8) стандартны и потому здесь не выписываются. Комбинируя уравнения (7) и (8), мы получаем с учетом (4):

$$\nabla^2 \delta\varphi = \frac{4\pi}{\varepsilon}\left[n_0(F_0+\varphi_0-U_1)-n(F+\varphi-U_1)\right]. \tag{9}$$

Уравнения (6—9) резко упрощаются в случае однородных образцов ($\varphi_0=0$), размеры которых велики по сравнению с длиной экранирования. Тогда, как известно, в подавляющей части образца выполняется условие локальной нейтральности, $n=n_0$, откуда и вытекает выражение (1) *. В рассматриваемых нами материалах условие локальной нейтральности, разумеется, не имеет места (даже при $V=0$). Можно думать, однако, что и здесь в объеме образца при наложении не будет иметь места заметное перераспределение заряда. Мы будем называть это предположение аппроксимацией «якобы нейтральности». Действительно, уравнение (9) имеет решение, удовлетворяющее должным граничным условиям:

$$\delta\varphi = -\delta F = \frac{V}{L}x \tag{10}$$

(ось x выбрана в направлении тока).

Уравнение (6) при этом также удовлетворяется, так как в макроскопически однородном образце $<\sigma>=\mathrm{const}$. Заметим, однако, что выполнение более общего равенства вида (6), содержащего неусредненное выражение для плотности тока, в каждой точке образца при этом, вообще говоря, не гарантировано. Именно по этой причине мы и говорим об аппроксимации, а не о точном решении.

В условиях (10) мы имеем согласно (2) (при $e=1$):

$$\mathbf{E} = -\frac{V}{L}\boldsymbol{\nu} + \nabla U. \tag{11}$$

Последнее слагаемое в правой части (11) вычислять не нужно: согласно принятой выше постановке задачи это есть случайная функция, статистические характеристики которой считаются известными.

§ 3. Выражение для плотности тока. Рассматривая первый из указанных в § 1 механизмов неомичности, будем считать, что в переносе тока участвуют только свободные носители заряда, возникающие в результате делокализации (уровень F_0 лежит достаточно далеко от границ щели для подвижности). При этом выражение для локальной проводимости в формуле (5) следует записать в виде

$$\sigma = n_{\text{своб}}\mu_0 = \mu_0 n(F_0-U)W(|E|). \tag{12}$$

Здесь $n_{\text{своб}}$ и μ_0 — концентрация и подвижность свободных носителей заряда, n — концентрация локализованных носителей, W — вероятность делокализации **. Для определенности положим (эта зависимость навязывается видом W)

$$\sigma \sim \exp\left\{\frac{|E|}{E_0}\right\}, \tag{13}$$

* Автор признателен М. И. Каганову за обсуждение этого пункта.

** В аналогичном виде можно представить и локальную проводимость поликристаллического полупроводника, протекание тока в котором лимитируется, например, случайными барьерами на границах межкристаллитов. При этом функция W будет определять вероятность проникновения сквозь барьер.

где E_0 — постоянная. Зависимость такого типа использовалась в ряде работ (см., например, [1]); согласно [2] она действительно получается из рассеяния квантовомеханической задачи для электрона в дебаевской потенциальной яме в определенном интервале полей. При этом $E_0 = \frac{3}{2} T r_0^{-1}$, где T — температура в энергетических единицах; r_0 — радиус экранирования. Заметим, однако, что для дальнейшего причины возникновения зависимости (13) не играют роли, и она рассматривается как иллюстративная. Величина E_0, строго говоря, тоже случайная. Однако, чтобы не усложнять задачу, вводя в нее дополнительные произвольные элементы, мы будем рассматривать ее просто как параметр. Далее, в указанных выше условиях система локализованных носителей заряда вырождена и, следовательно, зависимость n от $F_0—U$ не носит экспоненциального характера. Таким образом, с экспоненциальной точностью получаем, комбинируя формулы (5) и (11)—(13):

$$j \sim \left\langle \exp\left\{ \frac{\sqrt{V^2/L^2 - 2V/L \frac{\partial U}{\partial x} + (\nabla U)^2}}{E_0} \right\} \right\rangle \cdot \left\langle \exp \frac{|\nabla U|}{E_0} \right\rangle^{-1}. \tag{14}$$

Последний сомножитель в правой части (14) есть не что иное, как нормирующий множитель N, написанный для данного конкретного случая. Впредь для краткости мы не будем явно его выписывать, лишь подразумевая его присутствие.

§ 4. Усреднение по случайному полю. Чтобы выполнить усреднение в правой части (14), удобно произвести преобразование Лапласа, полагая

$$V^2/L^2 - 2V/L \frac{\partial U}{\partial x} + (\nabla U)^2 = t; \tag{15}$$

$$f(p) = \int_0^\infty e^{-pt + t^{1/2}/E_0}\, dt, \tag{16}$$

где $\mathrm{Re}\, p > 0$. Тогда

$$j \sim \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma - i\infty}^{\sigma + i\infty} f(p) \exp(pV^2/L^2)\, B(p)\, dp, \tag{17}$$

где

$$B(p) = \left\langle \exp\left\{ -2 \frac{V}{L} p \frac{\partial U}{\partial x} + p (\nabla U)^2 \right\} \right\rangle. \tag{18}$$

Фигурирующее здесь среднее значение экспоненты как раз и представляет собой интересующую нас характеристику случайного поля. Для иллюстрации сути дела достаточно рассмотреть гауссово поле (которое, кстати, нередко реализуется в экспериментально интересных ситуациях). Тогда функция распределения $\mathcal{P}(\nabla U)$ векторов ∇U дается выражением [3]:

$$\mathcal{P}(\mathbf{E}) = \left(\frac{3}{4\pi\psi_2} \right)^{3/2} \exp\left[-\frac{3(\nabla U)^2}{4\psi_2} \right],$$

где

$$\psi_2 = \frac{1}{2} \langle (\nabla U)^2 \rangle \tag{19}$$

есть один из основных параметров, характеризующих данное поле*. При этом

$$B(p)=\frac{\exp\left(\frac{4\psi_2}{3}p^2\frac{V^2}{L^2}\right)}{\left(1-\frac{4}{3}\psi_2 p\right)^{3/2}}. \tag{20}$$

Введем безразмерные параметры β, λ, c и безразмерные переменные интегрирования z и τ, полагая

$$\beta=V/LE_0,\quad \lambda=\frac{4\psi_2 L^2}{3V^2}=c\beta^{-2};$$
$$p=i\frac{V^2}{L^2}z+\sigma,\quad t=\tau\frac{V^2}{L^2}. \tag{21}$$

Получим

$$j\sim\int_0^\infty d\tau J(\tau)\,e^{\beta\sqrt{\tau}}, \tag{22}$$

где

$$J(\tau)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}dz\,\frac{\exp[-\lambda z^2+iz(1-\tau)]}{(1-i\lambda z)^{3/2}}. \tag{23}$$

При $\lambda\to 0$ (случайное поле отсутствует) формулы (22) и (23) дают, как и следовало ожидать,

$$j\sim\exp(V/LE_0). \tag{24}$$

С другой стороны, при $\lambda\gg 1$ (очень слабое внешнее поле) экспоненциальная зависимость от него исчезает и принятая нами постановка задачи становится неинтересной. Впредь мы ограничимся случаем $\lambda\ll 1$. При этом (в отличие от случая $\lambda\gg 1$) особая точка под знаком интеграла в (23) роли не играет, функцию $(1-i\lambda z)^{3/2}$ можно рассматривать как сравнительно медленно меняющуюся, и с экспоненциальной точностью

$$j\sim\int_0^\infty d\tau\exp\left\{\beta\left[\sqrt{\tau}-\beta\frac{(\tau-1)^2}{4c}\right]\right\}\equiv A(\beta). \tag{25}$$

Интеграл, фигурирующий в правой части (25), надо вычислять численно. Без всяких вычислений, однако, видно, что случайное поле ослабляет полевую зависимость плотности тока по сравнению с формулой (24).

В таблицах 1, 2 приведены значения $A(\beta)$, полученные путем численного интегрирования при двух значениях параметра c. Там же отношения величин $A(\beta)$ для разных значений β сопоставлены с тем, что получилось бы при использовании экспоненциальной формулы (24), а также употребляемой иногда (см., например, [4]) эмпирической формулы $j\sim\exp[V/V_0^m)]$, $V_0=\mathrm{const}, 0<m<1$. Видим, что при $\beta\leqslant 2$ и $c=1$ $c=0{,}5$, полевая зависимость $\ln j$ согласно (25) близка к корневой.

* Определение (19) отличается от принятого в [3] множителем 1/2.

Таблица 1

Значения $A(\beta)$ при $c = 1$

β	$A(\beta)$	$\frac{A(\beta)}{A(1)}$	$\exp(\beta - 1)$	$\exp(\beta^{0,8} - 1)$	$\exp(\beta^{0,5} - 1)$
1,00	7,00	1,00	1,00	1,00	1,00
1,10	7,03	1,004	1,11	1,08	1,05
1,25	7,20	1,03	1,28	1,22	1,13
1,50	7,56	1,08	1,65	1,47	1,25
1,75	9,44	1,35	2,12	1,76	1,38
2,00	10,4	1,49	2,72	2,10	1,51

Таблица 2

Значения $A(\beta)$ при $c = 0,5$

β	$A(\beta)$	$\frac{A(\beta)}{A(1)}$	$\exp(\beta - 1)$	$\exp(\beta^{0,8} - 1)$	$\exp(\beta^{0,5} - 1)$
1,00	4,64	1,00	1,00	1,00	1,00
1,25	4,89	1,05	1,28	1,22	1,12
1,50	5,38	1,16	1,65	1,47	1,25
1,75	5,86	1,26	2,18	1,76	1,38
2,00	6,56	1,41	2,72	2,10	1,51
2,50	8,76	1,89	4,48	2,95	1,79
3,00	11,2	2,41	7,39	4,09	2,08

Вероятно, подгоняя значение параметра c, можно было бы получить и значение m, близкое к 0,8 (в соответствии с результатами [4]). Однако ввиду ряда принятых выше предположений модельного характера мы воздержимся от такой подгонки, ограничиваясь лишь сделанным уже выводом немодельного характера. Заметим также, что он остается в силе и для ряда негауссовых случайных полей, например для регулярного случайного поля общего вида [5].

Автор весьма признателен А. Г. Миронову и И. П. Звягину за просмотр рукописи и полезную дискуссию.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Казакова Л. И., Лебедев Э. А., Рогачев Н. А. Труды шестой междунар. конф. по аморфным и жидким полупроводникам. Электронные явления в некристаллических полупроводниках. Л., 1976, с. 240.
2. Губанов А. И. ЖТФ, 1954, **24**, 308.
3. Esser B. Phys. stat. sol., 1972, **51**, 735.
4. Jung M., Teubner W., Haiduk A. Труды шестой междунар. конф. по аморфным и жидким полупроводникам. Электронные явления в некристаллических полупроводниках. Л., 1976, с. 358.
5. Bonch-Bruevich V. L., Mironov A. G., Zviagin I. P. La Rivista del Nuovo Cim., 1973, **3**, N 4, 321.

Поступила в редакцию
28.04.78