

УДК 539.293; 537.311

К ТЕОРИИ ЧАСТОТНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ПРОВОДИМОСТИ СИЛЬНО ЛЕГИРОВАННОГО КОМПЕНСИРОВАННОГО ПОЛУПРОВОДНИКА

В. Ф. Шитиков

(кафедра физики полупроводников)

Установлено, что в широкой области частот вещественная часть проводимости сильно легированного компенсированного полупроводника описывается законом $\text{Re } \sigma(\omega) \sim \omega^s$, где $s < 1$. Обсуждена частотная и температурная зависимость показателя степени s .

1. Многие неупорядоченные полупроводники обнаруживают степенную зависимость вещественной части проводимости от частоты: $\text{Re } \sigma(\omega) = A\omega^s$, где A — константа, а показатель степени s обычно не много меньше единицы. Зависимость такого вида возникает, если в системе имеется широкий разброс времен релаксации. В теории прыжковой проводимости такой разброс является следствием экспоненциальной зависимости темпа перехода носителя заряда от пространственного положения и/или от энергий локализованных состояний [1].

Для интерпретации ряда экспериментальных данных по аморфным и компенсированным полупроводникам было предположено, что существенный вклад в проводимость на переменном токе могут давать зонные носители, находящиеся в ямах крупномасштабного потенциального рельефа [2, 3]. В настоящей работе исследуется частотная зависимость омической проводимости сильно легированного компенсированного полупроводника (СЛКП) с крупномасштабным потенциалом при учете специфики структуры потенциального рельефа (для определенности будем говорить о полупроводнике n -типа).

Как известно, хаотичность распределения примесей в СЛКП приводит к флуктуациям потенциала и электронной плотности, максимальный размер которых определяется электронным экранированием и по порядку величины равен $r_s = N^{1/3}/n^{2/3}$, где N и n — концентрации примесей и электронов соответственно [4]. На крупномасштабные флуктуации накладываются более мелкие; при низких температурах электроны собираются в капли, находящиеся в наиболее глубоких ямах потенциального рельефа — там, где потенциальная энергия понижается флуктуациями всех масштабов. В условиях сильной компенсации капли занимают малую часть объема кристалла и протекание по ним невозможно.

2. Электронная плотность может перераспределяться во внешнем поле путем переходов электронов через энергетические барьеры между каплями. Переходы могут быть обусловлены как надбарьерной активацией, так и подбарьерным туннелированием. Влияние туннелирования проявляется в понижении энергии активации: электрон туннелирует под верхушку потенциального барьера, так что энергия активации уменьшается на величину [5]

$$\Delta \varepsilon(T) = E_0^{5/3} (Na^3)^{2/3} T^{-2/3},$$

где $a = \hbar^2 \kappa / (me^2)$ — боровский радиус примесного центра, m — эффек-

тивная масса, κ — диэлектрическая проницаемость, $E_0 = e^2/(\kappa a)$ — энергия связи водородоподобного примесного атома.

Поправка $\Delta \epsilon$ к энергии активации убывает с температурой. При

$$T > T_{\text{act}} \equiv E_0 (Na^3)^{2/5} \quad (1)$$

она становится меньше T , поэтому переходы можно считать чисто активационными. В настоящей работе рассматривается случай, когда неравенство (1) выполнено.

Вероятность активационного перехода через барьер высотой W в единицу времени есть

$$\omega(W) = \omega_0 \exp \left\{ -\frac{W}{T} \right\}, \quad (2)$$

где ω_0 слабо зависит от W . Величина $\omega^{-1}(W)$ есть характерное время перехода.

Среднеквадратичная флуктуация потенциальной энергии равна по порядку величины [4]

$$\gamma(r_s) = \frac{e^2 N^{2/3}}{\kappa r_s^{1/3}}. \quad (3)$$

Высота барьера может меняться в интервале $\sim \gamma(r_s)$. Мы рассматриваем случай, когда $\gamma(r_s) \gg T$, так что область изменения вероятности перехода (2) оказывается широкой.

Рассмотрим реакцию электронов при включении внешнего поля $\vec{\mathcal{E}}(t) = \vec{\mathcal{E}}\theta(t)$, где $\theta(t)$ — ступенчатая функция. К моменту времени t успеют произойти такие переходы, время которых меньше t :

$$\omega^{-1}(W) \leq t. \quad (4)$$

Используя явное выражение (2) для функции $\omega(W)$, перепишем условие (4) в виде

$$W \leq W_t \equiv T \ln(\omega_0 t), \quad (5)$$

т. е. произойдут переходы через барьеры высотой меньше W_t .

Назовем связанными капли, высота барьера между которыми меньше W_t . Группу капель, каждая из которых связана хотя бы с одной другой, назовем кластером.

Так как барьеры между каплями кластера не превышают W_t , то к моменту времени t электронные переходы в нем успеют произойти. Различные же кластеры разделены барьерами высотой больше W_t , и за время t переходы между ними не произойдут. Таким образом, внутри кластера установится квазиравновесное (во внешнем поле) распределение электронной плотности. Характерный размер кластера определится из условия, что флуктуация потенциальной энергии в его объеме не превышает W_t . В области размером r среднеквадратичная флуктуация числа примесных атомов порядка $\sqrt{Nr^3}$. Соответствующая ей флуктуация потенциальной энергии $\gamma(r) = e^2 \sqrt{Nr}/\kappa$. Полагая $\gamma(r) = W_t$, находим размер кластера:

$$r_t = \frac{\kappa^2 W_t^2}{e^4 N} = \frac{\kappa^2 T^2}{e^4 N} \ln^2(\omega_0 t). \quad (6)$$

Избыточный заряд доноров должен быть скомпенсирован электронами. Если в объеме кластера содержится $\sqrt{Nr_t^3}$ избыточных доноров, то в единице объема должно быть порядка

$$v_t = \frac{n}{\sqrt{Nr_t^3}} \quad (7)$$

кластеров.

По определению размер кластера не может быть меньше размера капли. Мы остановимся на случае, когда электронный газ не вырожден: тогда размер капли определяется величиной [6]

$$r_T = \frac{\kappa^2 T^2}{e^2 N}.$$

Условие $r_t > r_T$ теперь означает, что

$$\ln(\omega_0 t) \gg 1,$$

$$t \gg \omega_0^{-1}.$$

Температуру вырождения электронного газа можно представить в виде [2]

$$T_{\text{deg}} = E_0 (Na^3)^{4/9}. \quad (8)$$

Заметим, что T_{deg} (8) больше T_{act} (1), так что при $T > T_{\text{deg}}$ условие (1) выполняется автоматически.

С другой стороны, по мере роста кластеров начинает проявляться электронное экранирование и зависимость r_t от W_t будет отличаться от формулы (6). Максимальный размер флуктуаций, еще не заэкранированных электронами, порядка $r_s = N^{1/3}/n^{2/3}$ [4]. Поэтому выражение (6) применимо при $r_t < r_s$. Отсюда

$$\ln(\omega_0 t) \leq \frac{\gamma(r_s)}{T},$$

$$t \ll \omega_0^{-1} \exp \left\{ \frac{\gamma(r_s)}{T} \right\},$$

где $\gamma(r_s)$ дается выражением (3).

Таким образом, кластерное приближение применимо во временном интервале

$$\omega_0^{-1} \ll t \ll \omega_0^{-1} \exp \left\{ \frac{\gamma(r_s)}{T} \right\}. \quad (9)$$

3. Вычислим изменение дипольного момента кластера во внешнем поле. Обозначим через $n(U(\mathbf{r}))$ равновесную плотность электронов в точке \mathbf{r} . Здесь $U(\mathbf{r})$ есть сумма потенциальных энергий электрона в поле примесей и во внешнем поле:

$$U(\mathbf{r}) = U_0(\mathbf{r}) + e\vec{E}\mathbf{r}.$$

Для невырожденного электронного газа функция $n(U)$ задается бoльцмановской экспонентой

$$n(U(\mathbf{r})) = n_0 \exp \left\{ -\frac{U(\mathbf{r})}{T} \right\},$$

где n_0 не зависит от \mathbf{r} .

Радиус-вектор \mathbf{r} изменяется в пределах кластера размером r_t (6). В слабых внешних полях, $e\mathcal{E}r_t/T \ll 1$, электронную плотность можно разложить по полю:

$$n(\mathbf{r}) = n_0(\mathbf{r}) + \delta n(\mathbf{r}),$$

где $n_0(\mathbf{r}) = n_0 \exp\{-U_0(\mathbf{r})/T\}$ — плотность электронов в отсутствие внешнего поля,

$$\delta n(\mathbf{r}) = -n_0(\mathbf{r}) \frac{e\vec{\mathcal{E}}\mathbf{r}}{T},$$

а слагаемые высших порядков опущены.

Дипольный момент

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = -e \int_{V_t} d^3\mathbf{r} \mathbf{r} \delta n(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{T} \int_{V_t} d^3\mathbf{r} (\vec{\mathcal{E}}\mathbf{r}) n_0(\mathbf{r}),$$

где интегрирование проводится по объему V_t кластера.

В конечном итоге нас интересует средний макроскопический дипольный момент. В силу макроскопической изотропии задачи он будет направлен вдоль внешнего поля. Направим ось Z вдоль вектора \mathcal{E} , тогда для z -й компоненты дипольного момента получаем

$$\mathcal{D} = \frac{e^2 \mathcal{E}}{T} \int_{V_t} d^3\mathbf{r} z^2 n_0(\mathbf{r}).$$

Вынесем z^2 за знак интеграла в некоторой средней точке. С точностью до численного множителя порядка единицы это будет размер кластера r_t (6):

$$\mathcal{D} = \frac{e^2 \mathcal{E} r_t^2}{T} \int_{V_t} d^3\mathbf{r} n_0(\mathbf{r}). \quad (10)$$

Интеграл по координатам теперь представляет собой число электронов в кластере. Заряд электронов должен быть скомпенсирован зарядом избыточных доноров в объеме кластера, поэтому

$$\int_{V_t} d^3\mathbf{r} n_0(\mathbf{r}) \sim \sqrt{N r_t^3}. \quad (11)$$

Для получения среднего по кристаллу дипольного момента нужно умножить дипольный момент кластера (10) на долю объема, занимаемого кластерами, v_t (7). Тогда, учитывая соотношение (11), получаем

$$\langle \mathcal{D} \rangle \equiv v_t \mathcal{D} = \frac{1}{T} e^2 n r_t^2 \mathcal{E}.$$

Используя явное выражение (6) для r_t , имеем

$$\langle \mathcal{D} \rangle = \left(\frac{T}{\gamma(r_s)} \right)^3 \mathcal{E} \ln^4(\omega_0 t).$$

Плотность тока можно определить через производную дипольного момента по времени:

$$j(t) = \frac{d\langle \mathcal{D} \rangle}{dt} = 4 \left(\frac{T}{\gamma(r_s)} \right)^3 \mathcal{E} \frac{\ln^3(\omega_0 t)}{t}. \quad (12)$$

Чтобы вычислить проводимость, найдем фурье-компоненты внешнего поля и плотности тока:

$$\mathcal{E}_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}\theta(t) \exp\{i\omega t\} dt = \frac{\mathcal{E}}{\varepsilon - i\omega}, \quad \varepsilon \rightarrow +0,$$

$$j_\omega = \int_0^{\infty} j(t) \exp\{i\omega t\} dt.$$

Проводимость $\sigma(\omega)$ определяется формулой

$$j_\omega = \sigma(\omega) \mathcal{E}_\omega,$$

отсюда

$$\sigma(\omega) = -\frac{i\omega}{\mathcal{E}} \int_0^{\infty} j(t) \exp\{i\omega t\} dt. \quad (13)$$

Явный вид плотности тока (12) известен лишь во временном интервале (9), тогда как для вычисления проводимости (13) нужно знать подынтегральную функцию во всей области интегрирования от 0 до ∞ . Заметим, однако, что в области частот

$$\omega_0 \exp\left\{-\frac{\gamma(r_s)}{T}\right\} \ll \omega \ll \omega_0 \quad (14)$$

основной вклад в вещественную часть проводимости (13) дает интегрирование по отрезку (9). В самом деле, при $\omega \ll \omega_0$ часть интеграла от 0 до ω_0^{-1} не зависит от частоты и равна просто константе, дающей вклад лишь в мнимую часть проводимости. Часть интеграла от $\omega_0^{-1} \exp\{\gamma(r_s)/T\}$ до ∞ при $\omega \gg \omega_0 \exp\{-\gamma(r_s)/T\}$ содержит быстро осциллирующую экспоненту, и дает малый вклад в проводимость. Поэтому в интервале частот (14) можно продолжить функцию (12) на всю область интегрирования.

Вещественная часть проводимости (13) вычислена в приложении:

$$\operatorname{Re} \sigma(\omega) = 4 \left(\frac{T}{\gamma(r_s)}\right)^3 \omega \ln^3 \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right). \quad (15)$$

Выражение (15) можно представить в стандартной форме

$$\operatorname{Re} \sigma(\tilde{\omega}) = A \tilde{\omega}^s,$$

где $\tilde{\omega} = \omega/\omega_0$ — безразмерная частота, $A = 4\kappa\omega_0(T/\gamma(r_s))^3$,

$$s = 1 - \frac{\ln \ln(\tilde{\omega}^{-1})}{\ln(\tilde{\omega}^{-1})}.$$

В области частот (14) показатель степени s возрастает с частотой и изменяется в пределах

$$1 - \frac{T}{T_0} < s < 1,$$

где $T_0 = \gamma(r_s) \ln(\gamma(r_s)/T)$ — величина, слабо (логарифмически) зависящая от температуры. Заметим, что при $T/\gamma(r_s) \ll 1$ значения s всегда близки к единице.

Приложение.

Подставив функцию $j(t)$ (12) в выражение для проводимости (13), найдем ее вещественную часть:

$$\operatorname{Re} \sigma(\omega) = 4\omega \left(\frac{T}{\gamma(r_s)} \right)^2 L(\omega), \quad (16)$$

где

$$L(\omega) = \int_0^{\infty} dt \frac{\sin(\omega t)}{t} \ln^3(\omega_0 t).$$

Сделаем замену переменной $\omega t = \xi$, тогда

$$L(\omega) = \int_0^{\infty} d\xi \frac{\sin \xi}{\xi} \ln^3 \left(\frac{\omega_0}{\omega} \xi \right).$$

Множитель $\sin \xi / \xi$ фактически обрезает подынтегральную функцию на значениях $\xi \sim 1$, поэтому для оценки можно положить

$$L(\omega) \approx \int_0^1 d\xi \ln^3 \left(\frac{\omega_0}{\omega} \xi \right) = \ln^3 \frac{\omega_0}{\omega} - 3 \ln^2 \frac{\omega_0}{\omega} + 6 \ln \frac{\omega_0}{\omega} - 6.$$

Так как $\omega_0/\omega \gg 1$ (см. (14)), то, полагая $\ln(\omega_0/\omega) \gg 1$, получаем

$$L(\omega) \approx \ln^3 \frac{\omega_0}{\omega}. \quad (17)$$

Подставляя (17) в (16), приходим к формуле (15).

ЛИТЕРАТУРА

[1] Звягин И. П. Кинетические явления в неупорядоченных полупроводниках. М., 1984. [2] Pistoulet B., Roche F. M., Abdalla S. // Phys. Rev. 1984. В30, N 10. P. 5987. [3] Long A. R. // Phil. Mag. 1989. 59, N 3. P. 377. [4] Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронная теория легированных полупроводников. М., 1982. [5] Шкловский Б. И. // ФТП. 1973. № 7. С. 112. [6] Гуляев Ю. В., Плесский В. П. // ЖЭТФ. 1972. 62. С. 1156.

Поступила в редакцию
20.09.91

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1992. Т. 33, № 2

УДК 539.1

ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ ПАРАМЕТРОВ МЕЖАТОМНЫХ КОРРЕЛЯЦИИ В СПЛАВАХ С ГПУ СТРУКТУРОЙ

В. М. Силонов, О. В. Крисько, П. А. Каширин, Н. П. Каширина

(кафедра физики твердого тела)

Получен дополнительный член в выражении для интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей для сплавов с близкими радиусами соседних координационных сфер. Предложена методика определения параметров межатомных корреляций, соответствующих этим сферам.

Изучению межатомных корреляций в твердых растворах с использованием метода диффузного рассеяния рентгеновских лучей (ДРРЛ) посвящено большое число исследований [1]. В основном эти исследова-