

# Влияние гибридизации электронных состояний на частотную зависимость прыжковой проводимости неупорядоченных систем

М. А. Ормонт

*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет,  
кафедра физики полупроводников. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.  
E-mail: ormont@phys.msu.ru*

Статья поступила 27.10.2010, подписана в печать 13.12.2010

Обсуждается влияние гибридизации электронных состояний на бесфононную прыжковую проводимость неупорядоченной системы точечных центров локализации в области промежуточных частот, соответствующих переходам электронов на удаленные центры. Показано, что при использовании базиса локализованных функций атомного типа без учета гибридизации волновых функций удаленных центров частотная зависимость бесфононной проводимости является суперлинейной и монотонной в широкой области частот. При этом излом в области перехода (кроссовера) от линейной к квадратичной частотной зависимости проводимости оказывается более резким, чем в стандартной теории.

**Ключевые слова:** бесфононная прыжковая проводимость, кулоновская щель.

УДК: 621.315.592. PACS: 72.20.Ee.

## Введение

Известно, что для случая прыжкового переноса по локализованным состояниям примесной зоны теория предсказывает универсальную частотную зависимость проводимости степенного вида

$$\text{Re}(\sigma) = C\omega^s, \quad (1)$$

где  $C$  и  $s$  — постоянные, как правило,  $0 < s \leq 1$  [1–4].

Степенная зависимость (1) с  $s \approx 1$  обычно связывается с прыжковой проводимостью по локализованным состояниям электронов на примесных центрах с участием фононов [1]. Аналогичная частотная зависимость с  $s \approx 1$  получается при низких частотах и в случае низкотемпературной бесфононной (резонансной) прыжковой проводимости при учете кулоновских корреляций локализованных носителей [3]. В области частот, при которых  $\hbar\omega$  становится порядка энергии кулоновского взаимодействия между электронами резонансных пар, теория бесфононной проводимости предсказывает переход (кроссовер) от линейной частотной зависимости проводимости (с  $s \approx 1$ ) к зависимости, близкой к квадратичной ( $s \approx 2$ ) [2, 3]. Подобный переход наблюдался при возрастании частоты в области около 1 ТГц в легированном кремнии в окрестности перехода металл–изолятор [5, 6] и в металлических нанокомпозитах [7].

Следует, однако, отметить, что наблюдавшийся переход от линейной к квадратичной частотной зависимости низкотемпературной проводимости отличается от предсказываемого теорией бесфононной проводимости [3, 5, 6]. В частности, наблюдаемый переход оказался значительно более резким, чем предсказанный теоретически и описываемый выражением [3]

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{3}\pi^2 e^2 a g_F^2 r_\omega^4 \omega (\hbar\omega + U(r_\omega)), \quad (2)$$

где  $U(r_\omega) = \frac{e^2}{\kappa r_\omega}$  — кулоновская энергия взаимодействующих электронов на резонансной паре центров,

$r_\omega = a \ln(\omega_c/\omega)$  — характерная длина прыжка на частоте  $\omega$ ,  $a$  — радиус локализации состояний,  $\omega_c = 2I_0/\hbar$  — критическая частота,  $I_0$  — предэкспоненциальный множитель в выражении для резонансного интеграла (для водородоподобных центров  $I_0 \sim \frac{e^2}{\kappa a}$ ),  $\kappa$  — диэлектрическая проницаемость среды,  $e$  — заряд электрона,  $a g_F$  — одночастичная плотность состояний на уровне Ферми. Выражение (2) получено при условии  $r_\omega \gg a$ , которое отвечает области низких частот  $\omega_c \gg \omega$ : при  $\omega \sim \omega_c$  характерная длина прыжка  $r_\omega$  становится порядка радиуса локализации состояний (формально при  $\omega = \omega_c$  характерная длина прыжка  $r_\omega$  обращается в нуль).

Из выражения (2) видно, что при малых частотах, когда  $\hbar\omega < U(r_\omega)$ , для проводимости имеем частотную зависимость типа [1]

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{3}\pi^2 e^2 a g_F^2 r_\omega^4 \omega U(r_\omega), \quad (3)$$

которую можно аппроксимировать степенной функцией (1) с показателем  $s < 1$  (сублинейность), а при  $\hbar\omega > U(r_\omega)$  получаем зависимость, близкую к квадратичной:

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{3}\pi^2 e^2 a g_F^2 r_\omega^4 \hbar\omega^2. \quad (4)$$

Поскольку  $r_\omega$  слабо (логарифмически) зависит от частоты, переход от сублинейной зависимости проводимости к квадратичной в (2) происходит при частоте кроссовера  $\omega_{\text{cr}}$ , определяемой равенством  $\hbar\omega_{\text{cr}} = U(r_{\omega_{\text{cr}}})$ .

Между тем в работах [8, 9] наблюдалась суперлинейность ( $s > 1$ ) частотной зависимости проводимости в широкой области частот; это не согласуется с предсказываемой теорией сублинейностью частотной зависимости бесфононной проводимости (3).

Цель настоящей работы состояла в выяснении причин, обусловливающих как указанную суперлинейность, так и более резкий по сравнению с теоретически предсказанным [3], переход от линейной к квадратич-

ной частотной зависимости низкотемпературной бесфононной проводимости.

### Кулоновская щель и суперлинейность частотной зависимости проводимости

В работах [3, 8, 9] суперлинейность частотной зависимости проводимости интерпретировалась как непосредственное проявление кулоновской щели, возникающей в одночастичной плотности состояний, описывающей распределение самосогласованных энергий взаимодействующих локализованных носителей заряда в основном состоянии системы. Однако сама возможность формального использования одночастичной плотности состояний с кулоновской щелью при расчете высокочастотной проводимости не очевидна. Это связано с тем, что при переходах на близкие центры энергии конечных состояний, вообще говоря, отличны от самосогласованных энергий в основном состоянии системы из-за появления дырки в конечном состоянии. В работе [10] было показано, что стандартный подход к расчету суперлинейности частотной зависимости проводимости, основанный на использовании одночастичной плотности состояний с кулоновской щелью, вообще говоря, неприменим при расчете высокочастотной бесфононной проводимости (при переходах на близкие центры). В области частот, меньших частоты кроссовера  $\omega_{cr}$ , подход, учитывающий корреляцию между самосогласованными энергиями, предсказывает сублинейную частотную зависимость бесфононной прыжковой проводимости [10].

Проведенное в работе [11] рассмотрение показывает, что важная особенность частотной зависимости низкотемпературной бесфононной проводимости состоит в появлении на кривой  $\sigma(\omega)$  максимума и падающего участка, предшествующего выходу проводимости на насыщение при повышении частоты. Согласно проведенной оценке, частота  $\omega_m$ , отвечающая максимуму частотной зависимости бесфононной проводимости  $\sigma(\omega)$ , определяется критической частотой  $\omega_c = 2I_0/\hbar \sim \frac{e^2}{ka\hbar}$  и имеет порядок величины  $\omega_m \approx \omega_c e^{-3} \approx 0.05\omega_c$ . Характерная длина прыжка носителя заряда на частоте  $\omega_m$  составляет  $r_\omega \sim 3a$ ; при этом, согласно теории, основной вклад в бесфононную проводимость вносят пары с межцентровыми расстояниями  $r_{if}$ , такими, что  $r_\omega \leq r_{if} \leq r_\omega + a$  (в нашем случае  $3a \leq r_{if} \leq 4a$ ). Оценка  $\omega_m \cong \omega_c e^{-3}$  согласуется с результатами численных расчетов  $\omega_m \approx 0.065\omega_c$ , приведенными в работе [11].

Немонотонное поведение частотной зависимости низкотемпературной бесфононной проводимости (2) связано с двумя противоположными тенденциями. Рост вещественной части проводимости  $\text{Re}(\sigma(\omega))$  с частотой определяется увеличением энергии поглощаемого кванта электромагнитного поля  $\hbar\omega$ , а также ростом числа исходных центров локализации  $V_0 g_F (\hbar\omega + \frac{e^2}{kr_\omega})$  ( $V_0$  – объем системы), вносящих вклад в бесфононную проводимость; при этом энергии состояний исходных центров локализации соответствуют интервалу  $[\mu - \hbar\omega - \frac{e^2}{kr_\omega}, \mu]$  ( $\mu$  – уровень Ферми).

Убывание вещественной части проводимости с частотой определяется как уменьшением количества участвующих в проводимости конечных центров (чис-

лом порядка  $g_F S_\omega a$ , где  $S_\omega \sim r_\omega^2$  – площадь сферы радиуса  $r_\omega$ ), так и уменьшением квадрата изменения дипольного момента системы при переходе носителя заряда  $(er_\omega)^2$ .

Отметим, что предсказываемая теорией [2, 3] немонотонность частотной зависимости низкотемпературной бесфононной проводимости в случае легированного кремния (в экспериментах на Si:B [5], Si:P [6, 8, 9], Si:As [12]) до настоящего времени не обнаружена.

### Расчет низкотемпературной бесфононной проводимости

При решении задачи о бесфононной проводимости неупорядоченной системы обычно используют полный ортонормированный набор одноэлектронных функций  $\{\psi_\lambda\}$ , соответствующих эффективному одночастичному гамильтониану  $\hat{H}_e$ , учитывающему случайное поле ( $\lambda$ -представление) [13]. Этот базис удобно использовать при решении поставленной задачи в рамках одноэлектронного приближения. Поскольку уровень Ферми находится ниже уровня протекания, т. е. попадает в область энергий, отвечающую локализованным состояниям, приближенно оказывается возможным использовать усеченный базис из локализованных функций, взятых из указанного набора  $\{\psi_\lambda\}$ . В рассматриваемом случае сильной локализации полагают, что локализованные функции  $\psi_\lambda$  приближенно равны волновым функциям основных состояний примесей (рассматриваются водородоподобные центры); число  $\lambda$  тогда отвечает номеру центра.

Обычно приближенные базисные функции атомного типа  $\psi_\lambda$  улучшают, учитывая гибридизацию волновых функций локализованных электронных состояний в приближении изолированных пар центров  $\lambda, \lambda'$ . Согласно теории [2, 3], при учете гибридизации основной вклад в бесфононную проводимость вносят пары затравочных уровней, близких к резонансным  $\varepsilon_\lambda^0 \approx \varepsilon_{\lambda'}^0$  и соответствующих центрам локализации, находящимся на расстоянии  $r_\omega \leq r_{\lambda, \lambda'} \leq r_\omega + a$  друг от друга. Пары резонансных уровней  $\varepsilon_\lambda^0 = \varepsilon_{\lambda'}^0$ , в этом случае соответствуют центрам локализации, расположенным на минимально возможном расстоянии  $r_\omega$  друг от друга. При  $r_{\lambda, \lambda'} < r_\omega$  отталкивание уровней  $\Delta E_{\lambda, \lambda'}$  становится большим  $\hbar\omega$ , так что резонансные переходы невозможны.

Следует отметить, что эффекты, связанные с гибридизацией локализованных состояний в неупорядоченной системе, не могут быть полностью описаны в рамках учета лишь парной гибридизации состояний, приводящей к возникновению минимально возможного расстояния  $r_\omega$  между центрами в парах, вносящих свой вклад в проводимость. При частотах  $\omega \ll \omega_c$ , соответствующих переходам носителя заряда в резонансных парах с большим межцентровым расстоянием  $a < (N_d)^{-1/3} < r_\omega \leq r_{\lambda, \lambda'} \leq r_\omega + a$  ( $N_d$  – концентрация легирующей примеси) может происходить гибридизация состояний недалеких центров, принадлежащих различным парам, с близкой затравочной энергией. Иначе говоря, в режиме перехода не на ближайшего соседа (с близкой затравочной энергией) переход от приближенного базиса функций атомного типа  $\{\psi_\lambda\}$  к базису из попарно гибридизованных волновых функций  $\{\psi_{\lambda, \lambda'}^\pm\}$  не улучшает точность вычислений прово-

димости. Подобный переход, в частности, обуславливает немонотонность теоретически предсказанной частотной зависимости проводимости в области частот, соответствующей условию  $(N_d)^{1/3} < r_\omega$ . В дальнейшем для оценки роли и степени влияния учета парной гибридизации локализованных состояний на частотную зависимость низкотемпературной бесфононной проводимости мы пренебрежем парной гибридизацией волновых функций удаленных локализованных электронных состояний, считая  $\{\psi_\lambda\}$  по-прежнему функциями атомного типа.

Выражение для бесфононной проводимости неупорядоченной системы имеет вид (см., например, [4, 13])

$$\text{Re}(\sigma(\omega)) = \frac{\pi e^2 \omega}{V_0} \times \sum_{\{if\}, i \neq f} |\langle i | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | f \rangle|^2 (n_F(\varepsilon_i) - n_F(\varepsilon_f)) \delta(\Delta H_{if} - \hbar\omega), \quad (5)$$

где  $i, f$  — номера центров локализации,  $\mathbf{n}$  — единичный вектор параллельный линии действия внешнего электрического поля,  $n_F(\varepsilon)$  — средние числа заполнения состояний с энергией  $\varepsilon$ ;

$$\Delta H_{if} = \varepsilon_f - \varepsilon_i - \frac{e^2}{\kappa r_{if}} = \varphi_f - \varphi_i \quad (6)$$

— изменение энергии неупорядоченной системы при одноэлектронном переходе из начального  $i$  в конечное  $f$  состояние,  $\varphi_i, \varphi_f$  — энергии электрона в состояниях  $i, f$ ,  $\varepsilon_i, \varepsilon_f$  — самосогласованные энергии электрона, отвечающие состояниям  $i, f$ . Величины  $\varphi_i, \varphi_f, \varepsilon_i, \varepsilon_f$  непосредственно зависят от конфигурации среды.

Пусть (для определенности) числа заполнения  $n_j = 0$  и 1 отвечают зарядовым состояниям  $j$  центра  $e_j = 0$  и  $e_j = -|e|$  соответственно. Тогда выражения для полной энергии системы и для энергий  $\varphi_i, \varphi_f$  и  $\varepsilon_i, \varepsilon_f$  имеют вид [14]

$$H = \sum_i \varphi_i^0 n_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j, i \neq j} \frac{e^2 n_i n_j}{\kappa r_{ij}}, \quad (7)$$

$$\varepsilon_i = \varphi_i^0 + \frac{e^2}{\kappa} \sum_{j, j \neq i} \frac{n_j}{r_{ij}}, \quad \varepsilon_f = \varphi_f^0 + \frac{e^2}{\kappa} \sum_{j, j \neq f} \frac{n_j}{r_{fj}}, \quad (8)$$

$$\varphi_i = \varphi_i^0 + \frac{e^2}{\kappa} \sum_{l, l \neq i, l \neq f} \frac{n_l}{r_{il}}, \quad \varphi_f = \varphi_f^0 + \frac{e^2}{\kappa} \sum_{l, l \neq f, l \neq i} \frac{n_l}{r_{fl}}. \quad (9)$$

Запишем соотношения, связывающие энергии электронов  $\varphi_i$  с самосогласованными энергиями  $\varepsilon_i$ , отвечающими начальному набору чисел заполнения  $\{n_k^0\}$ :

$$\varphi_f = \varepsilon_f - \frac{e^2}{\kappa r_{if}}, \quad \varphi_i = \varepsilon_i; \quad (10)$$

энергии конечных состояний, вообще говоря, отличны от самосогласованных энергий в основном состоянии системы из-за наличия дырки в конечном состоянии. В пределе низких температур в качестве начального состояния можно выбрать основное состояние системы, отвечающее набору чисел заполнения  $\{n_i^0\}$  центров локализации с энергиями  $\{\varepsilon_i\}$ . В этом случае все состояния с энергиями  $\varepsilon_j < \mu$  заняты, а с энергиями  $\varepsilon_j > \mu$  свободны.

Важно отметить, что соотношение (2) предполагает выполненным равенство  $\varphi_f \approx \varepsilon_f$ ; при этом расстояние между центрами в парах, вносящих вклад в проводимость, становится функцией частоты. Согласно [2, 3], основной вклад в проводимость дают пары, расстояния между центрами в которых находятся в интервале  $r_\omega \leq r_{if} \leq r_\omega + a$ . Однако, как было показано в работе [11], в широкой области частот  $\omega < \omega_c$  кулоновское взаимодействие между электронами «активных» пар играет основную роль  $\frac{e^2}{\kappa r_\omega} > \hbar\omega$ , и приближенное равенство  $\varphi_f \approx \varepsilon_f$  для вносящих основной вклад в проводимость переходов не выполняется [10].

Переходя в выражении (5) от суммирования по парам центров к интегрированию по энергиям и пространственным координатам, запишем выражение (5) для проводимости в виде

$$\text{Re}(\sigma(\omega)) = \pi e^2 \omega \iiint d\varepsilon_i d\varepsilon_f d\mathbf{r}_{if} \rho(\varepsilon_i) \rho(\varepsilon_f) \times \times |\langle i | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | f \rangle|^2 (n_F(\varepsilon_i) - n_F(\varepsilon_f)) \delta(\Delta H_{if} - \hbar\omega), \quad (11)$$

где  $\rho(\varepsilon)$  — плотность состояний, описывающая распределение самосогласованных одночастичных энергий взаимодействующих локализованных носителей заряда в основном состоянии системы. Плотность состояний в (11) можно записать в факторизованном виде, поскольку основной вклад в бесфононную прыжковую проводимость в широкой области частот, включающей и низкочастотный предел, вносят переходы вне кулоновской щели  $2\Delta < \varepsilon_f - \varepsilon_i$ ; при этом плотность состояний близка к затравочной  $\rho(\varepsilon) = \rho_0$ .

Плотность состояний  $\rho(\varepsilon)$  имеет вид [15]

$$\rho(\varepsilon) = \alpha_3 \frac{\kappa^3 (\varepsilon - \mu)^2}{e^6} \quad \text{при } |\varepsilon - \mu| < \Delta, \quad (12)$$

$$\rho(\varepsilon) = \rho_0 \quad \text{при } |\varepsilon - \mu| > \Delta,$$

где  $\Delta = \frac{\rho_0^{1/2} e^3}{\kappa^{3/2} \alpha_3^{1/2}}$  — ширина кулоновской щели, определяемая соотношением  $\rho(\Delta) = \alpha_3 \frac{\kappa^3 \Delta^2}{e^6} = \rho_0$ ;  $\alpha_3 = \frac{3}{\pi}$  — численный коэффициент. Отметим, что симметричная кулоновская щель, возникающая в плотности состояний  $\rho(\varepsilon)$  (12) в окрестности уровня Ферми, вообще говоря, не зависит от конкретной модели неупорядоченной среды и является следствием учета дальнодействующего кулоновского потенциала [14, 16].

Как известно, для расчета прыжковой проводимости важно знать асимптотику локализованных волновых функций. Для оценки матричного элемента в выражении для проводимости (5) можно считать, что при  $r \leq a$  волновые функции локализованных состояний равны  $\psi_i(r) \approx C \sim \frac{1}{\sqrt{a^3}}$ , а при  $r > a$  имеем  $\psi_i(r) \approx C \exp(-r/a)$  (начало отсчета совпадает с центром  $i$ ). Тогда в пределе  $r_{if} \gg a$  основной вклад в матричный элемент  $\langle i | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | f \rangle$  дает интегрирование по области в окрестности отрезка  $r_{if}$ , внутри которой произведение волновых функций  $\psi_i \psi_f$  можно считать постоянным и равным  $\psi_i \psi_f \sim C^2 \exp(-r_{if}/a)$ . Выражение для матричного элемента в этом случае принимает приближенный вид

$$\langle i | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | f \rangle = \langle \psi_i | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \psi_f \rangle \approx \frac{r_{if}^3}{a^2} \exp\left(-\frac{r_{if}}{a}\right) \cos \theta, \quad (13)$$

где  $\theta$  угол между векторами  $\mathbf{n}$  и  $\mathbf{r}_{if}$ . В дальнейших вычислениях мы используем полученную приближенную оценку (13), поскольку основной вклад в бесфононную проводимость вносят пары, в которых расстояния между центрами больше радиуса локализации  $a$ .

Существование оптимального расстояния между центрами в парах обусловлено тем, что с уменьшением расстояния между центрами в паре уменьшается и изменение дипольного момента системы при электронном переходе, а с увеличением расстояния между центрами происходит экспоненциальное уменьшение перекрытия волновых функций состояний, отвечающих центрам локализации.

Рассмотрим интегралы по энергии

$$\iint d\varepsilon_i d\varepsilon_{if} \rho(\varepsilon_i) \rho(\varepsilon_{if}) (n_F(\varepsilon_i) - n_F(\varepsilon_{if})) \times \times \delta\left(\varepsilon_{if} - \varepsilon_i - \frac{e^2}{\kappa r_{if}} - \hbar\omega\right), \quad (14)$$

фигурирующие в выражении (11). Разность чисел заполнения отлична от нуля и равна единице  $n_F(\varepsilon_i) - n_F(\varepsilon_{if}) = 1$  при условии  $\varepsilon_i < \mu$ ,  $\varepsilon_{if} = \varepsilon_i + \frac{e^2}{\kappa r_{if}} + \hbar\omega > \mu$ , т. е. при выполнении неравенств

$$\mu - \hbar\omega - \frac{e^2}{\kappa r_{if}} < \varepsilon_i < \mu. \quad (15)$$

Тогда интеграл (14) сводится к виду

$$\int_{-B_{if}}^0 \rho(\varepsilon_i) \rho(\varepsilon_i + B_{if}) d\varepsilon_i, \quad (16)$$

где  $B_{if} \equiv \frac{e^2}{\kappa r_{if}} + \hbar\omega$  (в (16) предполагается, что энергия отсчитывается от уровня Ферми  $\mu = 0$ ). Найдем интеграл (11) с учетом того, что нижний предел интегрирования  $B_{if}$  в (16) есть функция расстояния между центрами  $r_{if}$ .

Учитывая вид плотности состояний  $\rho(\varepsilon)$  (12), для интеграла (16) получаем:

при  $\frac{e^2}{\kappa r_{if}} + \hbar\omega < \Delta$

$$\int_{-B_{if}}^0 \frac{\alpha_3 \kappa^3}{e^6} \varepsilon_i^2 \frac{\alpha_3 \kappa^3}{e^6} (\varepsilon_i + B_{if})^2 d\varepsilon_i; \quad (17.1)$$

при  $\Delta < \frac{e^2}{\kappa r_{if}} + \hbar\omega < 2\Delta$

$$\begin{aligned} \int_{-B_{if}}^{-\Delta} \rho_0 \frac{\alpha_3 \kappa^3}{e^6} (\varepsilon_i + B_{if})^2 d\varepsilon_i + \int_{-\Delta}^{-B_{if} + \Delta} \frac{\alpha_3 \kappa^3}{e^6} \varepsilon_i^2 \frac{\alpha_3 \kappa^3}{e^6} (\varepsilon_i + B_{if})^2 d\varepsilon_i + \\ + \int_{-B_{if} + \Delta}^0 \frac{\alpha_3 \kappa^3}{e^6} \varepsilon_i^2 \rho_0 d\varepsilon_i; \end{aligned} \quad (17.2)$$

при  $2\Delta < \frac{e^2}{\kappa r_{if}} + \hbar\omega$

$$\int_{-B_{if}}^{-B_{if} + \Delta} \rho_0 \frac{\alpha_3 \kappa^3}{e^6} (\varepsilon_i + B_{if})^2 d\varepsilon_i + \int_{-B_{if} + \Delta}^{-\Delta} \rho_0^2 d\varepsilon_i + \int_{-\Delta}^0 \frac{\alpha_3 \kappa^3}{e^6} \varepsilon_i^2 \rho_0 d\varepsilon_i. \quad (17.3)$$

При частотах, отвечающих неравенству  $\hbar\omega < \Delta$ , трем вышеупомянутым случаям соответствуют следующие расстояния между центрами в парах:

$$\begin{aligned} \frac{e^2}{\kappa r_{if}} + \hbar\omega < \Delta, & \quad \frac{e^2}{\kappa(\Delta - \hbar\omega)} < r_{if}, \\ \Delta < \frac{e^2}{\kappa r_{if}} + \hbar\omega < 2\Delta, & \quad \frac{e^2}{\kappa(2\Delta - \hbar\omega)} < r_{if} < \frac{e^2}{\kappa(\Delta - \hbar\omega)}, \\ 2\Delta < \frac{e^2}{\kappa r_{if}} + \hbar\omega, & \quad r_{if} < \frac{e^2}{\kappa(2\Delta - \hbar\omega)}; \end{aligned} \quad (18.1)$$

при частотах, соответствующих неравенству  $\Delta < \hbar\omega < 2\Delta$ ,

$$\begin{aligned} \frac{e^2}{\kappa r_{if}} + \hbar\omega < \Delta, & \quad \forall r_{if} \text{ не реализуется}, \\ \frac{e^2}{\kappa r_{if}} + \hbar\omega < 2\Delta, & \quad \frac{e^2}{\kappa(2\Delta - \hbar\omega)} < r_{if}, \\ 2\Delta < \frac{e^2}{\kappa r_{if}} + \hbar\omega, & \quad r_{if} < \frac{e^2}{\kappa(2\Delta - \hbar\omega)}; \end{aligned} \quad (18.2)$$

при частотах, соответствующих неравенству  $2\Delta < \hbar\omega$ , для любых значений  $r_{if}$  выполняется неравенство  $2\Delta < \frac{e^2}{\kappa r_{if}} + \hbar\omega$ .

### Низкочастотный предел

Рассмотрим низкочастотный предел, отвечающий неравенству  $\hbar\omega < \Delta$ . С учетом экспоненциального убывания матричного элемента  $\langle i | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | f \rangle$  (13) с расстоянием между центрами основной вклад в проводимость дают переходы, соответствующие неравенству  $2\Delta < \frac{e^2}{\kappa r_{if}} + \hbar\omega = B_{if} = \varepsilon_{if} - \varepsilon_i$  на расстояния  $r_{if} < \frac{e^2}{\kappa(2\Delta - \hbar\omega)}$ . Таким образом, основной вклад в бесфононную прыжковую проводимость в низкочастотном пределе вносят переходы вне кулоновской щели. Интеграл (17.3) равен

$$\int_{-B_{if}}^0 \rho(\varepsilon_i) \rho(\varepsilon_i + B_{if}) d\varepsilon_i = \rho_0^2 B_{if} - \frac{4}{3} \rho_0^2 \Delta \approx \rho_0^2 B_{if}; \quad (19)$$

приближенное равенство отвечает неравенству  $B_{if} = \frac{e^2}{\kappa r_{if}} + \hbar\omega \gg 2\Delta$ . Подставляя выражения (13), (19) с учетом (18.1) в (11) и выполняя переход к сферическим координатам, получаем

$$\text{Re}(\sigma(\omega)) \sim e^2 \omega \int_0^{\frac{e^2}{\kappa(2\Delta - \hbar\omega)}} \rho_0^2 \left( \frac{e^2}{\kappa r_{if}} + \hbar\omega \right) \frac{r_{if}^8}{a^4} \exp\left(-\frac{2r_{if}}{a}\right) dr_{if}. \quad (20)$$

Значение верхнего предела в интеграле (20) удовлетворяет неравенству  $a \ll \frac{e^2}{\kappa(2\Delta - \hbar\omega)}$ , что позволяет использовать приближенное выражение для матричного элемента (13). Действительно, подставив в условие  $a \ll \frac{e^2}{\kappa\Delta}$  ( $\hbar\omega < \Delta$ ) в явном виде выражение для ширины кулоновской щели  $\Delta = \frac{\rho_0^{1/2} e^3}{\kappa^{3/2} \alpha_3^{1/2}}$ , получаем нера-

венство  $\rho_0 \ll \frac{\kappa}{a^2 e^2} \sim 10^{21}$  эВ<sup>-1</sup>·см<sup>-3</sup> (численное значение  $\frac{\kappa}{a^2 e^2}$  соответствует характерным значениям параметров исследуемых экспериментально систем  $\kappa \sim 10$ ,  $a \sim 30\text{Å}$  [17]).

Из вида подынтегральных функций в выражении (20) следует, что основной вклад в бесфононную проводимость вносят пары, расстояния между центрами которых больше радиуса локализации  $a$ . Действительно, максимумы первого и второго слагаемых в подынтегральном выражении достигаются при значениях  $r_{if}$ , равных  $3.5a$  и  $4a$  соответственно.

Выполняя интегрирование выражения (20), получаем

$$\operatorname{Re}(\sigma(\omega)) = C_1 e^2 \rho_0^2 a^5 \omega \left( C_2 \frac{e^2}{\kappa a} + C_3 \frac{\hbar\omega}{2} \right), \quad (21)$$

где  $C_1, C_2, C_3$  - численные коэффициенты ( $\frac{C_2}{C_3} \approx 0.125$ ).

### Высокочастотный предел

В пределе высоких частот  $2\Delta < \hbar\omega$  неравенство  $2\Delta < \frac{e^2}{\kappa r_{if}} + \hbar\omega = B_{if} = \varepsilon_f - \varepsilon_i$  выполняется для любых значений  $r_{if}$ , так что вывод выражения для бесфононной проводимости аналогичен рассмотренному ранее в случае низких частот  $\hbar\omega < \Delta$ . Получаемое выражение для действительной части проводимости отличается от (20) тем, что интегрирование по  $r_{if}$  ведется до бесконечности; это не сказывается сколько-нибудь существенным образом на численных значениях констант из-за экспоненциальной зависимости подынтегральной функции от межцентрового расстояния в паре:

$$C_2 = \int_0^\infty x^7 \exp(-x) dx, \quad C_3 = \int_0^\infty x^8 \exp(-x) dx, \quad \frac{C_2}{C_3} = 0.125,$$

где  $x \equiv \frac{2r_{if}}{a}$ . В результате при высоких частотах получаем выражение для бесфононной проводимости аналогичное (21).

Запишем выражение (21) в виде

$$\operatorname{Re}(\sigma(\omega)) = C_4 \frac{1}{3} \pi^2 e^2 a^5 g_F^2 \hbar \omega_c^2 f_1 \left( \frac{\omega}{\omega_c} \right), \quad (22)$$

где  $f_1(z) = z \left( \frac{C_2}{C_3} + z \right)$ ,  $C_4 = \frac{C_1 C_3}{2}$  - численный коэффициент.

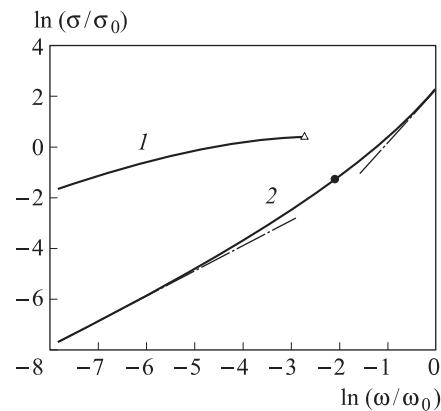
Согласно выражению (22), в высокочастотном пределе  $2\Delta < \hbar\omega$  переход от линейной к квадратичной частотной зависимости бесфононной проводимости происходит в окрестности частоты кроссовера  $\omega_{cr}$ , определяемой равенством энергий  $\frac{\hbar\omega_{cr}}{2} = \frac{C_2}{C_3} \frac{e^2}{\kappa a}$ . Частота кроссовера  $\omega_{cr} = \frac{C_2}{C_3} \frac{2e^2}{\kappa a \hbar} = \frac{C_2}{C_3} \omega_c$  задается критической частотой  $\omega_c = 2I_0/\hbar$  и соответствует области применимости теории бесфононной проводимости  $\frac{\omega}{\omega_c} < 1$ . Используя оценку  $I_0 \sim \frac{e^2}{\kappa a}$  для предэкспоненциального множителя в выражении для резонансного интеграла, получаем характерное значение критической частоты  $\omega_c \sim 10^{13}$  с<sup>-1</sup>  $\approx 10$  ТГц. Тогда, согласно (22), область кроссовера отвечает окрестности частоты  $\omega_{cr} \sim 1$  ТГц; это соответствует области экспериментального наблюдения перехода [5, 6, 8].

### Заключение

Выражения (21), (22) предсказывают суперлинейное ( $s > 1$ ) и монотонное поведение частотной зависимости низкотемпературной проводимости неупорядоченных систем в широкой области частот. В частности, согласно выражению (21), суперлинейный характер частотной зависимости бесфононной проводимости имеет место при частотах, меньших частоты кроссовера и удовлетворяющих неравенствам  $\hbar\omega < \Delta$ ,  $\hbar\omega \ll \frac{C_2}{C_3} \frac{2e^2}{\kappa a} = \hbar\omega_{cr}$ . Указанная особенность поведения проводимости связана с отсутствием частотных зависимостей как изменения дипольного момента системы при одноэлектронных переходах, так и числа участвующих в проводимости конечных центров, окружающих исходные.

В теории [2, 3] уменьшение с частотой изменения дипольного момента системы при одноэлектронных переходах  $\sim er_\omega$ , а также числа участвующих в проводимости конечных центров ( $\sim g_F S_\omega a$ ) обуславливает сублинейность частотной зависимости бесфононной проводимости в области низких частот  $\hbar\omega \ll \frac{e^2}{\kappa r_\omega} < \Delta$  и немонотонность частотной зависимости бесфононной проводимости в области высоких частот.

В отличие от выражения (2) выражение (22) описывает явно выраженный переход от линейной к квадратичной частотной зависимости (рисунок).



Частотные зависимости бесфононной проводимости с учетом (выражение (2), кривая 1) и без учета гибридизации (выражение (22), кривая 2). Пунктирная и штрихпунктирная кривые отвечают линейной и квадратичной частотным зависимостям проводимости соответственно;  $\sigma_0 = \frac{1}{3} \pi^2 e^2 a^5 g_F^2 \hbar \omega_c^2$

Таким образом, по сравнению с существующей теорией выражение (22) лучше описывает наблюдаемые особенности поведения частотной зависимости проводимости, в частности, в области перехода от линейной к квадратичной зависимости.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 09-02-00561а).

### Список литературы

1. Pollak M., Geballe T.H. // Phys. Rev. 1961. **22**. P. 1742.
2. Mott N.F. // Phil. Mag. 1970. **22**. P. 7.
3. Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. // ЖЭТФ. 1981. **81**. С. 406.

4. *Zvyagin I.P.* // Charge Transport in Disordered Solids with Applications in Electronics / Ed. by S. Baranovski. Chichester, 2006. P. 339.
5. *Lee M., Stutzmann M.L.* // Phys. Rev. Lett. 2001. **87**. P. 056402.
6. *Helgren E., Armitage N.P., Gruner G.* // Phys. Rev. B. 2004. **69**. P. 014201.
7. *Reedijk J.A., Adriaanse L.J., Brom H.B. et al.* // Phys. Rev. B. 1998. **57**. P. R15116.
8. *Hering M., Scheffler M., Dressel M. et al.* // Phys. Rev. B. 2007. **75**. P. 205203.
9. *Ritz E., Dressel M.* // Phys. Stat. Sol. C. 2008. **5**. P. 703.
10. *Ормонт М.А.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2010. № 2. С. 46.
11. *Звягин И.П., Ормонт М.А.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2008. № 4. С. 44.
12. *Deri R.J., Castner T.G.* // Phys. Rev. Lett. 1986. **57**. P. 134.
13. *Бонч-Бруевич В.Л., Звягин И.П., Кайпер Р. и др.* Электронная теория неупорядоченных полупроводников. М., 1981.
14. *Efros A.L., Shklovskii B.I.* // Electron-Electron Interactions in Disordered Systems / Ed. by A. L. Efros, M. Pollak. Amsterdam, 1985. P. 409.
15. *Efros A.L.* // J. Phys. C. 1976. **9**. P. 2021.
16. *Efros A.L., Shklovskii B.I.* // J. Phys. C. 1975. **8**. P. L49.
17. *Matulewski J., Baranovskii S.D., Thomas P.* // Phys. Stat. Sol. C. 2006. **3**. P. 279.

## **Effect of hybridization of electron states on the frequency dependence of the hopping conductivity of disordered systems**

**M. A. Ormont**

*Department of Semiconductor Physics, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.  
E-mail: ormont@phys.msu.ru.*

The effect of hybridization of electron states on the phononless conductivity of disordered systems is studied in the intermediate frequency range, corresponding to electron transitions to distant centers. It is shown that, in the absence of hybridization of wave functions corresponding to distant centers, the frequency dependence of the conductivity is superlinear and describes the monotonic behavior over a wide frequency range. Contrary to the standard theory, a sharper kink is obtained in the vicinity of the crossover from linear to quadratic frequency dependence of the conductivity.

*Keywords:* phononless (resonance) hopping AC conductivity, Coulomb gap.

PACS: 72.20.Ee.

Received 27 October 2010.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 2(2011).

### **Сведения об авторе**

Ормонт Михаил Александрович — канд. физ.-мат. наук., доцент; тел.: (495) 939-41-18, e-mail: ormont@phys.msu.ru