

ВЫСОКОЧАСТОТНАЯ ПРЫЖКОВАЯ ПРОВОДИМОСТЬ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ В КОМПЕНСИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

*В. Д. Каган**

*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук
194 021, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 6 сентября 1999 г.

В полупроводниках высокочастотная проводимость обусловлена переполаризацией коллективных состояний примесной пары атомов, находящихся под действием хаотических электрических полей всех примесей. Кулоновская корреляция, значительно увеличивающая проводимость, возникает благодаря статистическому распределению частиц по четырем уровням двухатомной системы. Релаксационное поглощение и диэлектрическая проницаемость системы всех пар рассчитаны с учетом этой статистики.

PACS: 72.20.-i, 72.30.+q

При низких температурах полупроводник, содержащий как донорные, так и акцепторные примеси, представляет собой неупорядоченную систему, в которой все электронные состояния локализованы. Уход электронов с основных носителей на неосновные создает пустые места среди основных носителей, на которые прыгают электроны с заполненных основных примесей. Так осуществляется прыжковая проводимость в компенсированных полупроводниках. В постоянном электрическом поле электрон должен передвинуться на макроскопические расстояния, совершив при этом большое число прыжков. Это возможно только тогда, когда в системе образуется огромный кластер связанных между собой состояний. Если же электрическое поле гармонически меняется во времени с большой частотой ω , можно ограничиться рассмотрением единственного прыжка электрона на расстояние, заметно превышающее длину прыжка в статическом поле. На расстоянии такого прыжка возникает дипольный момент, меняющийся в фазе с возбуждающим его переменным электрическим полем. Поляризация всего образца обусловлена аддитивным вкладом всех пар. Учет процессов релаксации приводит к запаздыванию этой поляризации относительно переменного поля, а значит, к поглощению этого поля. Теория такого релаксационного поглощения, развивавшаяся с 60-ых годов, изложена в обзоре Эфроса и Шклов-

ского [1].

На электрон, находящийся в заряженных состояниях на выделенной паре, действуют хаотические электрические поля со стороны других примесей, создавая большой разброс энергий этого электрона. Электрон, находящийся на узле с координатой \mathbf{r}_1 , имеет энергию ϕ_1 , а электрон с координатой \mathbf{r}_2 — энергию ϕ_2 . Величины этих энергий меняются в широких пределах и различаются между собой. Кроме того, имеется энергия перекрытия состояний, которая на больших расстояниях экспоненциально зависит от расстояния между атомами пары $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, $r = |\mathbf{r}|$:

$$J(r) = J \exp(-r/a), \quad (1)$$

где a — радиус локализованного состояния. Если оба узла с координатами \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 заряжены, то мы должны учесть кулоновское отталкивание. Полный гамильтониан системы имеет вид

$$H = \phi_1 a_1^+ a_1 + \phi_2 a_2^+ a_2 + J(r)(a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1) + \frac{e^2}{kr} a_1^+ a_1 a_2^+ a_2, \quad (2)$$

a_1, a_2 — операторы уничтожения электрона в точках 1 и 2, а a_1^+, a_2^+ — операторы рождения электрона в тех же точках, k — диэлектрическая проницаемость полупроводника.

*E-mail: victorkagan@pop.ioffe.rssi.ru

Известно, что гамильтониан без последнего члена диагонализуются линейным преобразованием

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= a_1 \cos \theta + a_2 \sin \theta, \\ \alpha_2 &= -a_1 \sin \theta + a_2 \cos \theta, \\ \operatorname{tg} \theta &= \frac{J(r)}{\sqrt{\left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2}\right)^2 + J^2(r)}}, \end{aligned} \quad (3)$$

при применении которого возникают смешанные энергии одноэлектронных состояний:

$$E_{1,2} = \frac{\phi_1 + \phi_2}{2} \mp \sqrt{\left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2}\right)^2 + J^2(r)}. \quad (4)$$

Применение преобразования (3) к полному гамильтониану (2) показывает, что он тоже диагонализуются и приобретает простой вид:

$$H = E_1 \alpha_1^\dagger \alpha_1 + E_2 \alpha_2^\dagger \alpha_2 + \frac{e^2}{kr} \alpha_1^\dagger \alpha_1 \alpha_2^\dagger \alpha_2. \quad (5)$$

Эфрос и Шкловский обратили внимание на то, что у гамильтониана (5) имеются четыре энергетических уровня: к одноэлектронным уровням (4) добавляется нулевой уровень — без электронов — и двухэлектронный уровень с энергией

$$E_3 = E_1 + E_2 + \frac{e^2}{kr} = \phi_1 + \phi_2 + \frac{e^2}{kr}. \quad (6)$$

Для нахождения равновесного статистического распределения двухатомной системы нужны все энергетические уровни. Согласно [2], равновесные числа заполнения n_s^0 равны

$$n_s^{(0)} = A^{-1} \exp[(\mu - E_s)/T]. \quad (7)$$

Здесь μ — химический потенциал системы электронов, T — температура в энергетических единицах. Нормировочный множитель A равен

$$A = 1 + \exp[(\mu - E_1)/T] + \exp[(\mu - E_2)/T] + \exp[(2\mu - E_3)/T]. \quad (8)$$

При увеличении частоты к релаксационному поглощению добавляется другое поглощение — резонансное, вызванное переходом электрона между уровнями с энергиями E_1 и E_2 при условии, что

$$E_2 - E_1 = \hbar\omega. \quad (9)$$

В теории резонансного поглощения, развитой Шкловским и Эфросом [2], возникло понятие кулоновской корреляции. Кулоновская корреляция — статистический эффект, его можно усмотреть в

формулах (7), (8). Так как за счет энергии кулоновского отталкивания увеличивается энергия E_3 , это приводит к уменьшению вероятности заполнения n_3 . Благодаря общему нормировочному множителю числа заполнения $n_{1,2}$ увеличиваются по сравнению с числами заполнения четырехуровневой системы незаряженных частиц. Это и есть кулоновская корреляция. Отметим, что в кулоновской корреляции проявляется косвенное влияние кулоновского отталкивания двух электронов на числа заполнения одноэлектронных состояний, в которых нет прямого кулоновского взаимодействия.

Резонансное поглощение пропорционально разности чисел заполнения $n_1^0 - n_2^0$. При учете (9) эту разность можно считать зависящей только от одной энергии E_1 :

$$n_1^0 = \left\{ \exp\left(\frac{E_1 - \mu}{T}\right) + 1 + \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{T}\right) + \exp\left[\left(\mu - \frac{e^2}{kr} - E_1 - \hbar\omega\right)\frac{1}{T}\right] \right\}^{-1}, \quad (10)$$

$$n_2^0 = n_1^0 \exp(-\hbar\omega/T). \quad (11)$$

При низких температурах $\hbar\omega > T$, $n_2 = 0$, а число заполнения n_1 заметно отличается от одночастичного фермиевского распределения: оно равно единице в интервале энергий E_1 между μ и $\mu - e^2/(kr) - \hbar\omega$ и нулю вне этого интервала. Таким образом, кулоновская корреляция определяет интервал энергий $e^2/(kr)$, который дает вклад в резонансное поглощение, и может значительно превысить интервал энергий порядка $\hbar\omega$, присутствующий в теории, не учитывающей кулоновскую корреляцию [2].

Кулоновская корреляция значительно увеличивает величину и релаксационного поглощения. Однако последовательная теория релаксационного поглощения именно четырехуровневой системы так и не была построена. Целью этой работы является построение такой теории, что позволяет исправить некоторые результаты развивавшейся ранее двухуровневой теории [1], особенно для случая высоких частот. Кроме того, будет представлен расчет вклада мягких пар в диэлектрическую проницаемость.

Внешнее переменное электрическое поле $\mathbf{E}(t)$ очень просто может быть включено в гамильтониан (2): для этого заменим в выражении (2) энергии ϕ_i на $\psi_i = \phi_i - e\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r}_i$. Далее мы проведем диагонализацию и получим энергии \bar{E}_i , в которых ϕ_i заменены на ψ_i , что учитывает влияние электрического поля на уровни энергии мягкой пары. Неравновесные числа заполнения определяются кинетически

ми уравнениями, в которых мы учитываем только переходы внутри одной пары:

$$\begin{aligned} \frac{dn_1(t)}{dt} + \frac{1}{\tau_1}n_1(t) - \frac{1}{\tau_2}n_2(t) &= 0, \\ \frac{dn_2(t)}{dt} + \frac{1}{\tau_2}n_2(t) - \frac{1}{\tau_1}n_1(t) &= 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Вероятности переходов определяются взаимодействием локализованных электронов с фононами [3]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_0} &= \nu_{ph} \exp\left(-\frac{2r}{a}\right) \left(\bar{E}_2 - \frac{\bar{E}_1}{T}\right)^s, \\ \frac{1}{\tau_1} &= \frac{1}{\tau_0} N(\bar{E}_2 - \bar{E}_1), \\ \frac{1}{\tau_2} &= \frac{1}{\tau_0} [N(\bar{E}_2 - \bar{E}_1) + 1], \end{aligned} \quad (13)$$

$N(E) = [\exp(E/T) - 1]^{-1}$ — функция распределения Планка, а вероятность ν_{ph} и показатель степени s определяются механизмом электрон-фононной связи ($s = 1$ для деформационного и $s = -1$ для пьезоэлектрического механизмов) [3]. Вероятности перехода обязательно пропорциональны квадрату интеграла перекрытия, из-за которого возникает экспоненциальная зависимость вероятности перехода от координат, явно выписанная нами в формуле (13). Зависимость от времени чисел заполнения $n_i(t)$ определяется зависимостью энергий \bar{E}_i от электрического поля.

Мы будем решать линейную по электрическому полю задачу, поэтому его можно выбрать в комплексном виде $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E} \exp(-i\omega t)$. Линеаризуя уравнения (12), для $\delta n_i = n_i(t) - n_i^0$ получим

$$\begin{aligned} \delta n_1 - \delta n_2 &= \frac{\phi_2 - \phi_1}{\sqrt{(\phi_2 - \phi_1)^2 + 4J^2(r)}} \frac{2/\tau}{(-i\omega + 1/\tau)} \times \\ &\times \frac{(e\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r})}{T} n_1^0, \quad \frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2}. \end{aligned} \quad (14)$$

В знаменателе (14) стоит суммарное время релаксации обоих уровней, которое является характеристикой частотной дисперсии чисел заполнения.

Полный дипольный момент пары \mathbf{d} , нелинеаризованный по электрическому полю, равен

$$\mathbf{d} = \frac{e\mathbf{r}}{2} \frac{(\psi_2 - \psi_1)^2}{(\psi_2 - \psi_1)^2 + 4J^2(r)} [n_2(t) - n_1(t)]. \quad (15)$$

Второй множитель в этой формуле связан с различием узельных состояний и состояний электрона в паре, он равен $\cos^2 \bar{\theta}$ и представляет собой проекцию парных состояний на узельные состояния, где $\bar{\theta}$ — угол (см. формулу (3)), зависящий от полных энергий \bar{E}_i , а тем самым, и от электрического поля.

При линеаризации дипольного момента возникают два слагаемых. Первое — «равновесное» слагаемое — возникает при линеаризации второго множителя в формуле (15), числа заполнения в ней мы оставляем равновесными. Во втором — «неравновесном» — слагаемом мы учитываем электрическое поле только в неравновесных числах заполнения. Чтобы найти электрический ток, надо продифференцировать дипольный момент по времени, что для нас эквивалентно умножению (15) на $-i\omega$. Усредненные выражения для комплексных дипольного момента и электрического тока получаются после умножения индивидуального вклада одной пары на плотности состояний случайных энергий $g(\phi_1)$ и $g(\phi_2)$ и интегрирования по всем значениям случайных энергий и по всем координатам. Действительная часть электрического тока определяет электропроводность, а действительная часть дипольного момента — диэлектрическую восприимчивость и отличающуюся от нее множителем ω мнимую часть электропроводности. «Равновесное» слагаемое дает вклад только в восприимчивость. В простой модели аморфного полупроводника [1] плотность состояний является константой.

Полная электропроводность σ мягких пар равна

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{2e^2 g^2}{dT} \int d^d r r^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\phi_1 \times \\ &\times \int_{\phi_1}^{\infty} d\phi_2 \frac{(\phi_2 - \phi_1)^3}{[(\phi_2 - \phi_1)^2 + 4J^2(r)]^{3/2}} \frac{\omega^2/\tau_1}{(\omega^2 + 1/\tau^2)} n_1^0. \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь d — размерность пространства (2 или 3).

Формула (16) для высокочастотной электропроводности по-разному преобразуется для относительно малых или больших частот, поскольку в каждом случае в интеграле существенны различные расстояния между частицами, составляющими мягкую пару. Для малых частот зависимость от расстояний определяется релаксационным знаменателем, который выделяет характерные расстояния

$$r_\omega = \frac{a}{2} l n \frac{\nu_{ph}}{\omega}.$$

Другой координатной зависимостью подынтегрального выражения, связанной с энергией перекрытия, можно пренебречь. Таким образом, случай малых частот — классический — определяется неравенствами

$$\frac{J}{T} \gg 1, \quad \frac{J}{T} \exp\left(-\frac{r_\omega}{a}\right) = \frac{J}{T} \sqrt{\frac{\omega}{\nu_{ph}}} \ll 1. \quad (17)$$

Переходя от энергий ϕ_i к суммарной и разностной переменным, легко берем интеграл по суммарной переменной. Для $d = 2$ электропроводность равна

$$\sigma = 2\pi e^2 g^2 \int_0^\infty dr r^3 \int_0^\infty d\phi \frac{\omega^2/\tau}{\omega^2 + 1/\tau^2} \times \left[2 \operatorname{ch} \frac{\phi}{2T} \sqrt{\operatorname{ch}^2 \frac{\phi}{2T} - \beta} \right]^{-1} \times \left[\frac{e^2}{2krT} + \ln \left(\operatorname{ch} \frac{\phi}{2T} + \sqrt{\operatorname{ch}^2 \frac{\phi}{2T} - \beta} \right) \right]. \quad (18)$$

Здесь $\beta = \exp[-e^2/krT]$. Теперь с логарифмической точностью берем интеграл по координате:

$$\sigma = \pi^2 e^2 g^2 a r_\omega^3 \omega \int_0^\infty d\phi \left[4 \operatorname{ch} \frac{\phi}{2T} \sqrt{\operatorname{ch}^2 \frac{\phi}{2T} - \beta_\omega} \right]^{-1} \times \left[\frac{e^2}{2kr_\omega T} + \ln \left(\operatorname{ch} \frac{\phi}{2T} + \sqrt{\operatorname{ch}^2 \frac{\phi}{2T} - \beta_\omega} \right) \right]. \quad (19)$$

Здесь $\beta_\omega = \beta(r_\omega)$. При $d = 3$ выражение содержит дополнительный множитель $4r_\omega/3$. Подынтегральная функция в (19) представляет собой функцию распределения по энергии в подсистеме двух одночастичных уровней, принадлежащей четырехуровневой системе. В работах Эфроса [1, 4] эта функция заимствовалась из теории двухуровневых систем с одним электроном, а число таких систем он пытался найти, частично учитывая наличие четырех уровней. В результате было предложено выражение для функции распределения

$$f\left(\frac{\phi}{2T}\right) = \left(16 \operatorname{ch}^2 \frac{\phi}{2T}\right)^{-1} \left(\frac{e^2}{kr_\omega T} + \frac{\phi}{2T}\right), \quad (20)$$

отличающееся от выражения (19). Однако в самом интересном случае сильной кулоновской корреляции,

$$\frac{e^2}{kr_\omega T} \gg 1,$$

эти выражения функционально одинаковы и только различаются в два раза. При этом электропроводность равна

$$\sigma = \frac{\pi^2}{4} \frac{e^4}{k} g^2 a \omega r_\omega^2. \quad (21)$$

При высоких температурах, когда кулоновская корреляция несущественна,

$$\sigma = \frac{\pi^4}{16} e^2 g^2 a \omega T r_\omega^3. \quad (22)$$

Формула (19) описывает постепенное изменение частотной зависимости от (21) к (22).

Рассмотрим теперь квантовый случай, осуществляющийся при выполнении неравенства противоположного второму из (17). При этом можно пренебречь временем релаксации в знаменателе, так что электропроводность становится не зависящей от частоты. Интеграл по координатам теперь определяется координатной зависимостью энергии перекрытия, которая на расстояниях $r_T = a \ln(2J/T)$ спадает до уровней порядка T . Пары с плечом порядка r_T являются «мягкими», и их вклад в высокочастотную электропроводность суммируется.

Величина электропроводности зависит от механизма электрон-фононного взаимодействия. Рассмотрим случай $d = 2$, для $d = 3$ надо добавить соответствующий множитель $4r_T/3$. При существенной кулоновской корреляции, $e^2/kr_T \gg T$,

$$\sigma = \frac{\pi e^4 g^2 \nu_{ph} a r_T^2 T^3}{16kJ^2} \int_0^\infty dx \frac{x^{2+s}}{\operatorname{sh} x}, \quad (23)$$

а при несущественной кулоновской корреляции

$$\sigma = \frac{\pi e^2 g^2 \nu_{ph} a r_T^3 T^4}{32J^2} \int_0^\infty dx \frac{x^{3+s}}{\operatorname{sh}^2(x/2)}. \quad (24)$$

В двумерном случае мягкие пары слабо взаимодействуют друг с другом, и имеет смысл вычисление их «неравновесного» вклада в диэлектрическую восприимчивость или пропорциональной ему величины мнимой электропроводности. Однако в квантовом случае мнимая электропроводность много меньше действительной, так что такое вычисление проводится лишь в классическом случае. Отметим отличие при вычислении действительной и мнимой частей «неравновесной» электропроводности. Для мнимой электропроводности интеграл по координатам оказывается логарифмически большим. Но так как это интеграл от степени логарифма, то кроме большого логарифмического множителя в знаменателе оказывается число равное степени величины r_ω , входящей в ответ. Это сильно уменьшает окончательное выражение. В статье Эфроса [4] при вычислении мнимой части электропроводности этот множитель пропущен. При существенной кулоновской корреляции

$$-\operatorname{Im} \sigma = \frac{\pi e^4 g^2 \omega r_\omega^3}{3k}. \quad (25)$$

В той же статье [4] была предпринята попытка учесть одновременно и кулоновскую корреляцию, и

кулоновскую щель в плотности одночастичных состояний. По нашему мнению, этого делать не нужно. Использование двухчастичной статистики показывает, что процесс электропроводности является коллективным, и все кулоновское взаимодействие учтено в распределении (7). Одночастичная кулоновская щель не имеет отношения к рассматриваемому процессу.

Наконец, рассмотрим «равновесный» дипольный момент и связанную с ним мнимую часть электропроводности. Этот дипольный момент не связан с релаксацией и не имеет аналога в действительной части электропроводности. Интеграл по координатам в этом случае может определяться энергией перекрытия, а значит, расстоянием r_T . Вычисляется он так же, как в его квантовом случае электропроводности. При существенной кулоновской корреляции эта часть мнимой электропроводности равна

$$-\operatorname{Im} \sigma = \frac{\pi e^4 g^2 \omega r_T^3}{k}, \quad (26)$$

как слагаемое добавляется к мнимой части электропроводности (25) и вполне сравнима с ней по величине.

Данная работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проекты 98-02-18280 и 97-02-18286).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. L. Efros and B. I. Shklovskii, in *Electron-electron interactions in disordered systems*, ed. A. L. Efros and M. A. Pollak, North-Holland, Amsterdam (1985), p. 201.
2. Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, ЖЭТФ **81**, 406 (1981).
3. Yu. M. Galperin, V. L. Gurevich, and D. A. Parshin, in *Hopping transport in solids*, ed. M. A. Pollak and B. I. Shklovskii, North-Holland, Amsterdam (1991), p. 81.
4. А. Л. Эфрос, ЖЭТФ **85**, 1834 (1985).