Смена механизма переноса в области перехода от сублинейности к суперлинейности частотной зависимости проводимости неупорядоченных полупроводников

© М.А. Ормонт[¶]

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (физический факультет),
119991 Москва, Россия

(Получена 3 марта 2015 г. Принята к печати 9 марта 2015 г.)

Исследован переход частотной зависимости проводимости неупорядоченных полупроводников от сублинейного к суперлинейному поведению с ростом частоты; такой переход наблюдается для многих неупорядоченных систем. Показано, что стандартный подход к расчету суперлинейности частотной зависимости прыжковой проводимости вида $\mathrm{Re}\,\sigma(\omega) \sim \frac{\omega}{\ln(\omega_{\mathrm{c,ph}}/\omega)}$ ($\omega_{\mathrm{c,ph}}$ — характерная частота), основанный на использовании одночастичной плотности состояний с кулоновской щелью, вообще говоря, не применим при расчете высокочастотной проводимости. Суперлинейность экспериментально измеренных частотных зависимостей проводимости $\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)$ в переходной области частот указывает на независимость оптимальной длины прыжка от частоты и на определяющую роль резонансного механизма проводимости. Резонансный механизм обусловливает и аномально большие измеряемые значения $\mathrm{ctg}(\gamma) = \mathrm{Im}\,\sigma/\mathrm{Re}\,\sigma$ (γ — угол диэлектрических потерь) в переходной области частот.

1. Введение

Для многих неупорядоченных материалов (аморфные и легированные полупроводники, полупроводниковые стекла, проводящие полимеры, гранулированные проводники и т.п.) частотная зависимость вещественной части проводимости имеет степенной вид

$$\sigma_1(\omega) = C\omega^s, \tag{1}$$

где C, s — постоянные. В низкочастотной области, как правило, $0 < s < 1$ [1–5]; в области высоких частот $s > 1$ [6–11]. Смена характера частотной зависимости проводимости (1) с ростом частоты наблюдается для многих неупорядоченных систем [6–11]. Как правило, переход от сублинейного ($s < 1$) к суперлинейному ($s > 1$) поведению $\sigma_1(\omega)$ осуществляется в два этапа: сначала с ростом частоты происходит плавный переход от $s < 1$ к $s \gtrsim 1$; затем достаточно резкий с „изломом“ на кривых $\ln\sigma_1$ от $\ln\omega$ переход от почти линейной частотной зависимости проводимости (с $s \gtrsim 1$) к зависимости, близкой к квадратичной (с $s \approx 2$). Универсальность вида (1) затрудняет получение информации о конкретных особенностях механизма переноса в неупорядоченных материалах. По этой причине исследования отклонений от универсальности и нахождение их связи со структурными особенностями материала и с особенностями переноса играют важную роль.

Степенная частотная зависимость (1) указывает на прыжковый характер транспорта, причем такая зависимость обычно связывается с прыжками электронов по локализованным состояниям с участием фононов (релаксационная проводимость) [12–14]. Частотная зависимость вещественной части проводимости, близкая к линейной, получается при низких частотах и в теории низкотемпературной бесфононной (резонансной) прыжковой проводимости при учете кулоновских корреляций локализованных носителей [15]. Теория бесфононной проводимости предсказывает переход (кроссовер) от линейной частотной зависимости (с $s \approx 1$) к зависимости, близкой к квадратичной (с $s \approx 2$ [16]) в области частот порядка ω_{cr}, при которых $\hbar\omega$ становится порядка энергии кулоновского взаимодействия между электронами внутри резонансных пар. При низких частотах вещественная часть проводимости определяется фононным механизмом, а с ростом частоты бесфононная проводимость начинает преобладать над релаксационной.

Низкотемпературные измерения ($T \sim 1\,\mathrm{K}$) частотной зависимости проводимости $\sigma_1(\omega)$ в легированном кремнии (Si : P) на изоляторной стороне перехода металл–диэлектрик показали, что переход от линейной к квадратичной частотной зависимости происходит при $\omega_{\mathrm{cr}} \sim 1\,\text{ТГц}$ [7–9].

Сравнение результатов стандартной теории высокочастотной прыжковой проводимости [15,16] с экспериментальными частотными зависимостями проводимости легированных полупроводников в окрестности концентрационного перехода металл–изолятор [6–9] показало наличие ряда особенностей [17–19]. Наблюдавшийся переход от линейной к квадратичной частотной зависимости проводимости [6–9] оказался значительно более резким, чем предсказанный теоретически [15]. Проведенное в работе [17] рассмотрение показало, что квадратичная частотная зависимость в [15] может вообще не проявляться, так как при не слишком высоких частотах кулоновские эффекты существенны и частотная зависимость остается близкой к линейной. С ростом частоты ω переход на спадающий участок кривой $\sigma_1(\omega)$, предшествующий выходу на насыщение, происходит до того, как достигается область квадратичной зависимости [17]. Немонотонность $\sigma_1(\omega)$ обуслов-

[¶] E-mail: ormont@phys.msu.ru

ливается частотной зависимостью оптимальной длины прыжка r_ω, причем вплоть до частоты ω_m, отвечающей максимуму $\sigma_1(\omega)$, кулоновское взаимодействие между электронами „активных“ пар играет основную роль и частотная зависимость $\sigma_1(\omega)$ остается близкой к линейной. Однако предсказываемая теорией [15,16] немонотонность частотной зависимости бесфононной проводимости не была обнаружена (например, в экспериментах на Si : B [6], Si : P [7–9]).

Результаты измерений частотной зависимости мнимой части $\sigma_2(\omega)$ комплексной проводимости $\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + i\sigma_2(\omega)$ или угла потерь γ $(\operatorname{ctg}\gamma(\omega) = \sigma_2(\omega)/\sigma_1(\omega))$ показали, что величина отношения $\sigma_2(\omega)/\sigma_1(\omega)$ в области частот ниже частоты кроссовера ω_{cr} порядка $|\sigma_2|/\sigma_1 \sim 10^2$ и $\gamma(\omega)$ слабо зависит от частоты; при этом измеренное отношение превосходит значение, даваемое теорией релаксационной проводимости, более чем в 30 раз [20].

В работах [8,9] была обнаружена суперлинейность $(s > 1)$ частотной зависимости проводимости в широкой области частот $\omega < \omega_{\mathrm{cr}}$ при низких температурах; это не согласуется с предсказываемой теорией сублинейностью $(s < 1)$ частотной зависимости прыжковой проводимости (релаксационной [12–14] и резонансной [15] компонент) в области промежуточных частот. В работе [19] отмечалось, что суперлинейность и монотонность экспериментально измеренных частотных зависимостей проводимости $\sigma_1(\omega)$ может указывать на режим проводимости с постоянной (не зависящей от частоты) оптимальной длиной прыжка.

В работах [8,9] суперлинейность частотной зависимости низкотемпературной проводимости неупорядоченных полупроводников в области частот $\omega < \omega_{\mathrm{cr}}$ интерпретируется как непосредственное проявление кулоновской щели, возникающей в одночастичной плотности состояний, описывающей распределение самосогласованных энергий взаимодействующих локализованных носителей заряда в основном состоянии системы. Действительно, в области промежуточных частот прыжковая проводимость определяется электронными переходами на далекие расстояния; при этом, вообще говоря, следует учитывать дальнодействующий характер кулоновского взаимодействия, обусловливающий кулоновскую щель в одночастичной плотности состояний $\rho(E)$ в окрестности уровня Ферми μ [21]. Формальное использование одночастичной плотности состояний с кулоновской щелью $\rho(\varepsilon) = \kappa^3(\varepsilon - \mu)^2/e^6$ при расчете прыжковой проводимости в области промежуточных частот, соответствующих неравенствам

$$kT < \hbar\omega \ll U(r_\omega) = e^2/\kappa r_\omega \ll \Delta \quad \text{(резонансная проводимость)}, \tag{2.1}$$

$$kT \ll U(\tilde{r}_\omega) = e^2/\kappa \tilde{r}_\omega \ll \Delta \quad \text{(релаксационная проводимость)}, \tag{2.2}$$

приводит к суперлинейной $(s > 1)$ частотной зависимости резонансной σ_1^{res} и релаксационной σ_1^{rel} компонент проводимости вида

$$\sigma_1^{\mathrm{res}} \approx \frac{\kappa\omega}{\ln(\omega_{\mathrm{c}}/\omega)}\ [15], \tag{3.1}$$

$$\sigma_1^{\mathrm{rel}} \approx \frac{\kappa\omega}{\ln(\omega_{\mathrm{ph}}/\omega)} [22]. \tag{3.2}$$

Здесь $\Delta = \frac{\rho_0^{1/2} e^3}{\kappa^{3/2}}$ — ширина кулоновской щели, κ — диэлектрическая проницаемость среды, ρ_0 — затравочная плотность состояний (принимаемая постоянной). Межцентровые расстояния r_ω, $\tilde{r}_\omega$ в парах, дающих основной вклад в резонансную и релаксационную проводимость, соответственно равны

$$r_\omega = a \ln(\omega_{\mathrm{c}}/\omega), \tag{4.1}$$

$$\tilde{r}_\omega = (a/2) \ln(\omega_{\mathrm{ph}}/\omega), \tag{4.2}$$

где a — радиус локализации состояний, ω_{ph} — характерная фононная частота, $\omega_{\mathrm{ph}} \sim 10^{12}{-}10^{13}\ \mathrm{c}^{-1}$, $\omega_{\mathrm{c}} = 2I_0/\hbar$, $I(r_{if}) = I_0 \exp(-r_{if}/a)$ — резонансный интеграл, $I_0 \approx e^2/\kappa a$ — предэкспоненциальный фактор, r_{if} — расстояние между центрами пары.

Характерная фононная частота ω_{ph} представляет собой частоту попыток перехода электрона при релаксационной прыжковой проводимости. Критическая частота $\omega_{\mathrm{c}} = 2I_0/\hbar$ ограничивает область частот, в которой применима теория резонансной проводимости, сверху. При частоте $\omega \sim \omega_{\mathrm{c}}$ характерная длина прыжка r_ω становится порядка радиуса локализации состояний; например, для Si : P при $a \approx 30$ Å, $\kappa \approx 12$ имеем $\omega_{\mathrm{c}} \sim 10^{13}\ \mathrm{c}^{-1}$. В переходной области частот имеем r_ω, $\tilde{r}_\omega \gg a$.

Таким образом, согласно [8,9], в области частот $\omega < \omega_{\mathrm{cr}}$ проводимость определяется электронными переходами внутри кулоновской щели. В этом случае частотная зависимость проводимости $\sigma_1(\omega) = \sigma_1^{\mathrm{rel}}(\omega) + \sigma_1^{\mathrm{res}}(\omega)$ суперлинейна $(s > 1)$; при этом выражения для вещественной части резонансной (3.1) и релаксационной (3.2) компонент проводимости отличаются лишь характерными частотами ω_{c} и ω_{ph} [15, 22]. Соответственно остается вопрос о причинах перехода от сублинейности $(s < 1)$ к суперлинейности $(s \gtrsim 1)$ частотной зависимости вещественной части проводимости с ростом частоты и о роли различных механизмов электронного переноса в формировании частотной зависимости проводимости в переходной области частот.

Таким образом, цель настоящей работы состояла в выяснении причин, обусловливающих переход от сублинейного к суперлинейному поведению частотной зависимости вещественной части проводимости с ростом частоты, а также установление причин аномально больших значений отношения $|\sigma_2(\omega)|/\sigma_1(\omega)$ в области частот $\omega < \omega_{\mathrm{cr}}$.

2. Особенности расчета суперлинейности частотной зависимости прыжковой проводимости в переходной области частот

Следует отметить, что сама возможность формального использования одночастичной плотности состояний с кулоновской щелью при расчете высокочастотной проводимости не очевидна. Действительно, кулоновская щель возникает в перенормированной плотности состояний $\rho(\varepsilon)$, энергии ε_i которых определяются как изменение энергии системы при добавлении электрона на центр i в основное состояние системы. С другой стороны, спектр возбуждений, возникающий при переходах электронов из состояний на центрах с энергией ε_i ниже уровня Ферми μ в состояния на центрах с энергией ε_f выше уровня Ферми, не связан непосредственно с плотностью $\rho(\varepsilon)$ состояний, энергии которых соответствуют добавлению электрона в основное состояние системы. 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 наличия дырки в конечном состоянии.

Соотношения для проводимости (3.1), (3.2) отвечают плотности состояний, взятой в факторизованном виде. Обычно такой подход применим в условиях, когда основной вклад в проводимость вносят переходы вне кулоновской щели; при этом одночастичная плотность состояний близка к затравочной $\rho(\varepsilon) = \rho_0$.

Переход от энергий электронов φ_i, φ_f к самосогласованным энергиям электронов ε_i, ε_f можно выполнить при

$$\varphi_i = \varepsilon_i, \quad \varphi_f \approx \varepsilon_f, \tag{5}$$

где

$$\varphi_i = \varphi_i^0 + \sum_{l,l\neq i,l\neq f} \frac{e^2 n_l^0}{\kappa r_{li}}, \quad \varphi_f = \varphi_f^0 + \sum_{k,k\neq f,k\neq i} \frac{e^2 n_k^0}{\kappa r_{kf}},$$

$$\varepsilon_i = \varphi_i^0 + \frac{e^2}{\kappa} \sum_{j,j\neq i} \frac{n_j}{r_{ij}}, \quad \varepsilon_f = \varphi_f^0 + \frac{e^2}{\kappa} \sum_{j,j\neq f} \frac{n_j}{r_{fj}}, \tag{6}$$

числа заполнения $n_j = 0$ и 1 отвечали зарядовому состоянию j центра $e_j = 0$ и $e_j = -|e|$ соответственно, $\{n_k^0\}$ — начальный набор чисел заполнения, φ_i^0 и φ_j^0 — „затравочные“ энергии электронов, соответствующие i и f центрам, φ_i, φ_f — энергии начального состояния (когда занят центр i и свободен центр f пары центров) и конечного состояния с занятым центром f и свободным центром i, ε_i, ε_f — одночастичные самосогласованные энергии взаимодействующих локализованных электронов; в основном состоянии системы все центры с энергиями ε_j ниже уровня Ферми μ заняты, а с энергиями выше уровня Ферми $\varepsilon_j > \mu$ свободны. В случае выполнения равенств (5) можно использовать плотность состояний $\rho(\varepsilon)$ с кулоновской щелью, описывающей распределение самосогласованных одночастичных энергий.

Важно отметить, что при электронном переходе энергия конечного состояния φ_f соответствует добавлению электрона в состояние, отличающееся от основного тем, что центр i пуст, т.е. занят дыркой. Соотношения, связывающие энергии электронов φ_i с самосогласованными энергиями ε_i, имеют вид

$$\varphi_f = \varepsilon_f - \frac{e^2}{\kappa r_{if}}, \quad \varphi_i = \varepsilon_i, \tag{7}$$

где энергии φ_i и ε_i отвечают начальному набору чисел заполнения $\{n_k^0\}$. Таким образом, энергии конечных состояний, вообще говоря, отличны от самосогласованных энергий в основном состоянии системы из-за наличия дырки в конечном состоянии.

При низких температурах в области промежуточных частот, отвечающих условиям (2.2), релаксационная прыжковая проводимость определяется туннельными электронными переходами с участием фононов на далекие расстояния $\tilde{r}_\omega \gg a$, $\tilde{r}_\omega \gg e^2/\kappa\Delta$. В этом случае основной вклад в релаксационную проводимость дают пары центров с межцентровыми расстояниеми $r_{if} \sim \tilde{r}_\omega$, для которых $\varphi_f - \varphi_i \lesssim kT$. С учетом соотношений (7) изменение энергии системы равно

$$\varphi_f - \varphi_i = \varepsilon_f - \varepsilon_i - \frac{e^2}{k r_{if}} \leq kT. \tag{8}$$

Равенства (5) $\varphi_i = \varepsilon_i$, $\varphi_f \approx \varepsilon_f$, выполняются при условии $e^2/k\tilde{r}_\omega \ll kT$; это прямо противоречит неравенству (2.2). Соответственно подход к расчету суперлинейности частотной зависимости прыжковой релаксационной проводимости, основанный на использовании одночастичной плотности состояний с кулоновской щелью, не применим.

Теперь рассмотрим случай резонансной проводимости. Изменение энергии системы при резонансном поглощении кванта поля, вызывающем переход электрона с центра i на центр f, равно

$$\hbar\omega = \Gamma_{if}; \tag{9}$$

$\Gamma_{if} = \sqrt{(\varphi_f - \varphi_i)^2 + 4I_{if}^2}$ — разность энергий гибридизованных состояний пары центров i и f.

С учетом (7) выражение (9) принимает вид

$$\varepsilon_f - \varepsilon_i - \frac{e^2}{\kappa r_{if}} = \varphi_f - \varphi_i = \sqrt{(\hbar\omega)^2 - 4I_{if}^2}. \tag{10}$$

Равенства энергий $\varphi_i = \varepsilon_i$, $\varphi_f \approx \varepsilon_f$ (5) выполняются при условии [18]

$$\sqrt{(\hbar\omega)^2 - 4I_{if}^2} \gg \frac{e^2}{\kappa r_{if}} \tag{11}$$

или

$$(\hbar\omega)^2 \gg 4I_{if}^2 + \left(\frac{e^2}{\kappa r_{if}}\right)^2.$$

Отметим, что при $r_{if} = r_\omega$ резонансный интеграл равен $I_{if}(r_\omega) = \hbar\omega/2$, т.е. неравенство (11) заведомо не выполняется.

Согласно теории резонансной проводимости [15,16], из-за гибридизации волновых функций изолированной пары центров и соответствующего ей отталкивания уровней, наибольший вклад в бесфононную проводимость вносят пары центров, для которых межцентровое расстояние r_{if} удовлетворяет неравенствам $r_\omega \le r_{if} \le r_\omega + a$; при $r_{if} < r_\omega$ отталкивание уровней становится бо́льшим $\hbar\omega$, так что переходы невозможны. Однако, как было показано в [17], в широкой области частот $\omega < \omega_c$ кулоновское взаимодействие между электронами „активных" (резонансных) пар играет основную роль $\hbar\omega < e^2/kr_\omega$. В этом случае условие (11) во всем интервале $r_\omega < r_{if} < r_\omega + a$ нарушается, поскольку радиус локализации a мал по сравнению с величиной r_ω.

Таким образом, подход к расчету суперлинейности частотной зависимости прыжковой проводимости (3.1), (3.2), основанный на использовании одночастичной плотности состояний с кулоновской щелью, вообще говоря, не применим при расчете высокочастотной проводимости $\sigma_1(\omega) = \sigma_1^{\mathrm{rel}}(\omega) + \sigma_1^{\mathrm{res}}(\omega)$, т.е. при переходах на близкие центры.

Согласно [13], при $U(\tilde r_\omega) = \frac{e^2}{\kappa \tilde r_\omega} < kT$ частотная зависимость вещественной части релаксационной проводимости имеет вид

$$\sigma_1^{\mathrm{rel}} = \frac{\pi^4 e^2 \rho_0^2}{24\tilde\gamma}\,\omega kT \tilde r_\omega^{\,4}, \tag{12.1}$$

а при $U(\tilde r_\omega) = \frac{e^2}{\kappa \tilde r_\omega} > kT$ имеем [14]

$$\sigma_1^{\mathrm{rel}} = \frac{\pi^2 e^4 \rho_0^2}{6\kappa\tilde\gamma}\,\omega \tilde r_\omega^{\,3}. \tag{12.2}$$

где $\tilde\gamma = a^{-1}$ — обратный радиус локализации состояний.

Частотные зависимости релаксационной проводимости (12.1), (12.2) в переходной области частот могут быть аппроксимированы степенной частотной зависимостью вида (1) с показателем степени $s < 1$.

С ростом частоты бесфононная проводимость начинает преобладать над релаксационной. Согласно [19], суперлинейный характер частотной зависимости вещественной части проводимости при высоких частотах связан с переходом от режима проводимости с переменной, зависящей от частоты, длиной прыжка к режиму с не зависящей от частоты оптимальной длиной прыжка; смена механизма переноса также обусловливает и существенно более резкий переход от почти линейной к почти квадратичной частотной зависимости проводимости (излом на кривых $\ln\sigma_1$ от $\ln\omega$) в окрестности частоты кроссовера.

Эффекты гибридизации волновых функций приводят к сдвигам энергий уровней, и учет этих эффектов заметно сказывается на частотной зависимости прыжковой проводимости $\sigma(\omega)$. Для заданной пары центров i, f гибридизация характеризуется частотой Раби $\omega_{\mathrm{R}} = 2I(r_{if})/\hbar$; здесь $\omega_c = 2I_0/\hbar$ имеет смысл частота попыток перехода электрона при резонансной проводимости. Для пар центров с межцентровым расстоянием $r_{if} = r_\omega$ частота осцилляций Раби равна частоте внешнего поля $\omega_{\mathrm{R}}(r_\omega) = \omega$. Вместе с тем для пар с межцентровыми расстояниями $r_{if} > r_\omega$ имеем $\omega > \omega_{\mathrm{R}}$; при этом эффекты, связанные с гибридизацией локализованных состояний, становятся несущественны.

С ростом частоты характерная длина прыжка r_ω уменьшается, и в области высоких частот происходит переход к режиму проводимости с постоянной длиной прыжка, когда основной вклад в проводимость вносят электронные переходы внутри пар с оптимальными межцентровыми расстояниями r_{opt}, слабо зависящими от частоты. Переход к режиму проводимости с постоянной длиной прыжка r_{opt} происходит в области частот $\omega > 0.05\omega_c$, когда $r_{\mathrm{opt}} > r_\omega$; в этом случае основной вклад в проводимость вносят электронные переходы внутри пар с межцентровым расстоянием $r_{if} \sim r_{\mathrm{opt}}$ [19].

Существование оптимального расстояния r_{opt} 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. Соответственно оптимальная длина прыжка $r_{\mathrm{opt}} \approx 3a$ определяется параметрами системы и слабо зависит от частоты.

3. Особенности частотной зависимости тангенса угла потерь в переходной области частот

Отметим, что стандартная теория релаксационной проводимости $\sigma^{\mathrm{rel}} = \sigma_1^{\mathrm{rel}} + i\sigma_2^{\mathrm{rel}}$ неупорядоченных полупроводников дает величину отношения $\sigma_2^{\mathrm{rel}}/\sigma_1^{\mathrm{rel}}$, не согласующуюся с измеряемой величиной σ_2/σ_1 в переходной области частот. Получим в трехмерном случае выражение для тангенса угла диэлектрических потерь $\mathrm{tg}(\gamma) = \sigma_1^{\mathrm{rel}}/\sigma_2^{\mathrm{rel}}$; в двумерном случае $\mathrm{tg}(\gamma) = \sigma_1^{\mathrm{rel}}/\sigma_2^{\mathrm{rel}}$ был найден в [20]. Расчет проводимости обычно проводят с использованием методов теории прыжкового переноса по локализованным состояниям, развитой для неупорядоченных систем; в основе этих методов лежит решение кинетического уравнения — уравнения баланса электронных переходов между локализованными состояниями [23].

Компоненты комплексной проводимости, найденные путем решения уравнения баланса, имеют вид

$$\sigma_1^{\mathrm{rel}} = \frac{\pi^4 e^2 \rho_0^2}{24\tilde\gamma}\,\omega kT \tilde r_\omega^{\,4},$$

$$\sigma_2^{\mathrm{rel}} = -\frac{\pi^3 e^2 \rho_0^2}{30}\,\omega kT \tilde r_\omega^{\,5} \tag{13}$$

при $U(\tilde r_\omega) = \frac{e^2}{\kappa \tilde r_\omega} < kT$. Отметим, что выражение для σ_1^{rel} представляет собой соотношение Остина–

Мотта (12.1) [13]. С учетом (13) тангенс угла потерь равен

$$\mathrm{tg}(\gamma) = \frac{\sigma_1^{\mathrm{rel}}}{\sigma_2^{\mathrm{rel}}} = -\frac{5\pi}{2}\,\ln^{-1}\left(\frac{\omega_{\mathrm{ph}}}{\omega}\right). \qquad (14)$$

При низких температурах $U(\tilde r_\omega) = \frac{e^2}{\kappa \tilde r_\omega} \gg kT$ компоненты комплексной проводимости имеют вид

$$\sigma_1^{\mathrm{rel}} = \frac{\pi^2 e^4 \rho_0^2}{6\kappa\tilde\gamma}\,\omega \tilde r_\omega^{\,3},$$

$$\sigma_2^{\mathrm{rel}} = -\frac{\pi e^4 \rho_0^2}{6\kappa}\,\omega \tilde r_\omega^{\,4}. \qquad (15)$$

Здесь выражение для σ_1^{rel} совпадает с результатом (12.2), полученным в [14]. В этом случае тангенс угла потерь с точностью до численного множителя совпадает с (14)

$$\mathrm{tg}(\gamma) = \frac{\sigma_1^{\mathrm{rel}}}{\sigma_2^{\mathrm{rel}}} = -2\pi\ln^{-1}\left(\frac{\omega_{\mathrm{ph}}}{\omega}\right). \qquad (16)$$

Согласно (13), (15), мнимая часть проводимости σ_2^{rel} имеет емкостной характер (отрицательна).

Интерполяционное выражение для вещественной части релаксационной прыжковой проводимости на переменном токе соответственно имеет вид [23]

$$\sigma_1^{\mathrm{rel}} = \frac{\pi^4 e^2 \rho_0^2}{24\tilde\gamma}\,\omega \tilde r_\omega^{\,4}\left(kT + \frac{4}{\pi^2}\,U(\tilde r_\omega)\right); \qquad (17)$$

мнимой части проводимости можно сопоставить аналогичное (17) интерполяционное выражение

$$\sigma_2^{\mathrm{rel}} = -\frac{\pi^3 e^2 \rho_0^2}{30}\,\omega \tilde r_\omega^{\,5}\left(kT + \frac{5}{\pi^2}\,U(\tilde r_\omega)\right). \qquad (18)$$

Таким образом, в случае релаксационной прыжковой проводимости выражение для тангенса угла потерь $\mathrm{tg}(\gamma) = \sigma_1/\sigma_2$, полученное в работе [20] для двумерной системы, с точностью до численного множителя оказалось применимым и в трехмерном случае. Согласно (13), (15), компоненты комплексной релаксационной проводимости $\sigma_1(\omega)$ и $\sigma_2(\omega)$ имеют частотные зависимости $\sigma_1(\omega) \sim |\sigma_2(\omega)| \sim \omega^s$ с показателем степени $s < 1$; при этом для характерных значений параметра $\omega_{\mathrm{ph}} \sim 10^{12}-10^{13}$ в рассматриваемой области частот $\omega \sim 10^{10}-10^{12}$ Гц величина отношения компонент комплексной проводимости σ_1, $|\sigma_2|$ порядка единицы. Это не согласуется с аномально большими измеряемыми значениями $\mathrm{ctg}(\gamma)$ в переходной области частот.

Согласно [19], эти расхождения можно объяснить на основе подхода, принимающего во внимание как фононный, так и резонансный вклады в проводимость, а также переход к режиму проводимости с постоянной длиной прыжка. Соответственно

$$\mathrm{ctg}\,\gamma(\omega) = (\sigma_2^{\mathrm{res}}(\omega) + \sigma_2^{\mathrm{rel}}(\omega))/(\sigma_1^{\mathrm{res}}(\omega) + \sigma_1^{\mathrm{rel}}(\omega)). \quad (19)$$

В разных частотных диапазонах соотношение резонансного и релаксационного вкладов может быть различным для вещественной и мнимой частей проводимости, что приводит к наблюдаемым большим значениям $|\mathrm{ctg}\,\gamma|$, значительно превосходящим результат стандартной теории релаксационной проводимости (14), (16). Большая величина отношения $|\sigma_2|/\sigma_1$ при $\omega < \omega_{\mathrm{cr}}$ указывает на то, что в рассматриваемой области частот вещественная часть проводимости определяется суперпозицией вкладов (их конкуренцией) $\sigma_1^{\mathrm{rel}}(\omega) + \sigma_1^{\mathrm{res}}(\omega)$, а мнимая часть определяется бóльшим бесфононным вкладом $\sigma_2^{\mathrm{res}}(\omega)$, существенно превосходящим $\sigma_2^{\mathrm{rel}}(\omega)$. В области частот, превышающих частоту кроссовера ω_{cr}, и вещественная, и мнимая части проводимости определяются бесфононными (резонансными) составляющими.

4. Заключение

Таким образом, подход, основанный на формальном использовании одночастичной плотности состояний с кулоновской щелью, при расчете высокочастотной прыжковой проводимости $\sigma_1(\omega) = \sigma_1^{\mathrm{rel}}(\omega) + \sigma_1^{\mathrm{res}}(\omega)$ неприменим в области промежуточных частот. С ростом частоты происходит переход от релаксационного механизма проводимости, обусловливающего сублинейность ($s < 1$) частотной зависимости $\sigma_1(\omega)$, к резонансному механизму, связанному с суперлинейностью ($s > 1$) частотной зависимости проводимости. При этом суперлинейность экспериментально измеренных частотных зависимостей проводимости $\sigma_1(\omega)$ в переходной области частот $\omega \lesssim \omega_{\mathrm{cr}}$ обусловливается не кулоновской щелью в одночастичной плотности состояний, а постоянной (не зависящей от частоты) оптимальной длиной прыжка и определяющей ролью резонансного механизма проводимости. Оптимальная длина прыжка при этом отвечает переходам вне кулоновской щели.

Список литературы

[1] M. Pollak. Phys. Rev., **133**, A564 (1964).
[2] A.K. Jonscher. Nature, **267**, 673 (1977).
[3] M. Hill, A.K. Jonscher. J. Non-Cryst. Sol., **32**, 53 (1979).
[4] J.C. Dyre, T.B. Schroder. Rev. Mod. Phys., **72**, 873 (2000).
[5] I.P. Zvyagin. In: *Charge Transport in Disordered Solids with Applications in Electronics*, ed. S. Baranovski (John Wiley & Sons, Chichester, 2006) p. 339.
[6] M. Lee, M.L. Stutzmann. Phys. Rev. Lett., **87**, 056 402 (2001).
[7] E. Helgren, N.P. Armitage, G. Gruner. Phys. Rev. B, **69**, 014 201 (2004).
[8] M. Hering, M. Scheffler, M. Dressel, H.V. Lohneysen. Phys. Rev. B, **75**, 205 203 (2007).
[9] E. Ritz, M. Dressel. Phys. Status Solidi C, **5**, 703 (2008).
[10] J.A. Reedijk, L.J. Adriaanse, H.B. Brom, L.J. de Jongh, G. Schmid. Phys. Rev. B, **57**, R15 116 (1998).
[11] P. Lunkenheimer, A. Loidl. Phys. Rev. Lett., **91**, 207 601 (2003).
[12] M. Pollak, T.H. Geballe. Phys. Rev., **122**, 1742 (1961).
[13] I.G. Austin, N.F. Mott. Adv. Phys., **18**, 41 (1969).
[14] A.L. Efros. Phil. Mag. B, **43**, 829 (1981).

[15] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. ЖЭТФ, **81**, 406 (1981).
[16] N.F. Mott. Phil. Mag., **22**, 7 (1970).
[17] И.П. Звягин, М.А. Ормонт. Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3: Физика, Астрономия, вып. 4, 44 (2008).
[18] М.А. Ормонт. Вестник Моск. ун-та. Сер. 3: Физика, Астрономия, № 2, 46 (2010).
[19] М.А. Ормонт, И.П. Звягин. ФТП, **49** (4), 449 (2015).
[20] А.Л. Эфрос. ЖЭТФ, **89**, 1834 (1985).
[21] A.L. Efros, B.I. Shklovskii. J. Phys. C: Sol. St. Phys., **8**, L49 (1975).
[22] R.N. Bhatt, T.V. Ramakrishnan. J. Phys. C: Sol. St. Phys., **17**, L639 (1984).
[23] И.П. Звягин. *Кинетические явления в неупорядоченных полупроводниках*. (М., МГУ, 1984.)

Редактор А.Н. Смирнов

Crossover between the transport mechanisms in the region of transition from sublinearity to superlinearity of AC conductivity frequency dependence of disordered semiconductors

M.A. Ormont

M.V. Lomonosov Moscow State University (Physics faculty),
119991 Moscow, Russia

Abstract It is studied the crossover of the frequency dependence of AC conductivity of disordered semiconductors from sublinear to superlinear behavior with increasing frequency; such a crossover is observed for many disordered systems. It is shown that in the existing theory of the high-frequency AC hopping conductivity, the single-particle density of states with Coulomb gap generally cannot be used in the standard approach to superlinearity calculation of AC conductivity frequency dependence of the type $\mathrm{Re}\,\sigma(\omega) \sim \frac{\omega}{\ln(\omega_{\mathrm{c,ph}}/\omega)}$ ($\omega_{\mathrm{c,ph}}$ is the characteristic frequency). Superlinearity of experimentally measured frequency dependence of AC conductivity in the crossover region indicates the transition to the fixed range hopping regime with frequency-independent optimal distances of electron transitions and the decisive role of the resonant mechanism of conductivity. Resonant mechanism causes abnormally large measured values of $\mathrm{ctg}(\gamma) = \mathrm{Im}\,\sigma/\mathrm{Re}\,\sigma$ (γ is the angle of dielectric losses) in the intermediate frequency range.