ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТУННЕЛЬНОГО ДИСПЕРСИОННОГО ТРАНСПОРТА В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ МАТЕРИАЛАХ

Никитенко В. Р.

Получено дифференциальное уравнение для концентрации носителей заряда в режиме туннельного дисперсионного транспорта, содержащее дрейфовый и диффузионный члены, причем соответствующие коэффициенты выражаются через параметры спектра ловушек. При больших временах ($t \gg t_\tau$, где t_τ — характерное время, определяемое энергетическим спектром ловушек и резко возрастающее с понижением температуры), когда большинство прыжков сопровождается термической активацией, данное уравнение фактически совпадает с «дисперсионным» уравнением сильно неравновесного транспорта, полученным в работах В. И. Архипова и А. И. Руденко. В обратном случае ($t \ll t_\tau$) уравнение имеет ту же структуру, однако кинетика диффузии универсальна (не зависит от вида спектра ловушек и температуры), тогда как соотношение между коэффициентом диффузии и подвижностью зависит от спектра ловушек и, вообще говоря, времени и, таким образом, отличается от обычного соотношения Эйнштейна. Например, в случае экспоненциально распределенных по энергии ловушек отношение коэффициента диффузии к подвижности содержит вместо тепловой энергии kT характерную энергию спектра ловушек ε_0.

В последние годы туннельный (прыжковый) транспорт фото- либо радиационно-генерированных носителей заряда в неупорядоченных полупроводниках и диэлектриках интенсивно исследуется теоретиками, так как этот механизм переноса, по-видимому, является основным для большинства неупорядоченных материалов с высокой концентрацией локализованных состояний (ЛС или ловушек) [1]. Однако во всех сделанных ранее работах исследование проводилось либо численными методами (см., например, [2, 3]), либо исследовались характеристики только туннельного дрейфа [4], либо туннельный транспорт рассматривался без анализа координатно-временнóго распределения носителей заряда, т. е. их концентрации $p(x, t)$. Если же проводился анализ $p(x, t)$ с учетом как дрейфа, так и диффузии носителей, то коэффициент диффузии вводился в теорию как внешний параметр, причем считалось, что коэффициент диффузии и подвижность связаны обычным соотношением Эйнштейна [5], хотя это никак не обосновано на начальном после импульса генерации временнóм интервале, когда прыжки происходят преимущественно на более глубокие ЛС, т. е. без термической активации [6–8], при отсутствии термодинамически равновесного энергетического распределения локализованных носителей.

Однако аналитическое описание, по возможности простое, пространственно-временнóго распределения носителей заряда, туннельно диффундирующих при наличии внешнего электрического поля, необходимо как для понимания процесса, так и, например, для теоретического описания близнецовой рекомбинации [3, 5]. В данной работе получено уравнение туннельного дисперсионного транспорта для концентрации носителей $p(x, t)$ с учетом как диффузии, так и дрейфа в приложенном поле, причем соответствующие коэффициенты не являются внешними параметрами, а выражаются через величины, характеризующие спектр ЛС данного материала.

Рассмотрим процесс туннельного переноса фото- либо радиационно-генерированных носителей заряда (для определенности электронов) в однородном электрическом поле E (которое направлено вдоль координатной оси x) с участием

ЛС вблизи края зоны проводимости, причем $g(\varepsilon)$ — энергетическая плотность ЛС, $0<\varepsilon<\infty$ (энергия растет в глубь щели подвижности), $\int\limits_0^\infty d\varepsilon g(\varepsilon) = N_t$ — концентрация ЛС. В начальный ($t=0$) момент времени кратковременный импульс излучения генерирует носители в состояниях вблизи $\varepsilon = 0$, затем через короткое время порядка τ_0 носители захватываются на ЛС, образовав начальное энергетическое распределение. Для простоты примем, что частота переходов между ЛС зависит от длины прыжка r и энергий начальной и конечной ЛС следующим образом:

$$\nu(\varepsilon, \varepsilon', r) = \nu_0 \exp\left[-2\gamma r - \frac{(\varepsilon-\varepsilon')}{kT}\Theta(\varepsilon-\varepsilon')\right], \tag{1}$$

где T — температура, причем частотный фактор ν_0 и обратный радиус локализации ν не зависят от энергий. Ограничимся временны́м интервалом

$$\max(\tau_0\nu_0^{-1}) \ll t \ll \min(t_\text{р}, t_\text{з})$$

($t_\text{р}$, $t_\text{з}$ — времена установления термодинамически равновесной либо предельной заселенности ловушек соответственно).

Рассмотрим пока чисто туннельный перенос (без учета зоны делокализованных состояний), что справедливо при достаточно низких температурах. Конкретное условие на температуру и влияние зоны будут обсуждены далее. Следуя методу работы [4], выделим среди всех ловушек те ЛС, вероятность освобождения с которых первоначально захваченного носителя пренебрежимо мала к моменту t, — глубокие ЛС, а также мелкие ловушки, которые к моменту t захватывали и освобождали электроны несколько раз. Кроме того, выделим группу пограничных ЛС, первое освобождение с которых происходит в момент времени, близкий к t. Энергетические плотности глубоких ЛС $g_d(\varepsilon, t)$, мелких ЛС $g_{sh}(\varepsilon, t)$ и пограничных ЛС $g_b(\varepsilon, t)$ определим следующим образом:

$$g_d(\varepsilon, t) = [g(\varepsilon) - g_b(\varepsilon, t)]\,\Theta\,[\varepsilon - \varepsilon_d(t)], \tag{2а}$$

$$g_{sh}(\varepsilon, t) = [g(\varepsilon) - g_b(\varepsilon, t)]\,\Theta\,[\varepsilon_d(t) - \varepsilon], \tag{2б}$$

$$g_b(\varepsilon, t) = g(\varepsilon)\left\{[1 - W_d(\varepsilon, t)]\,\Theta(\varepsilon - \varepsilon_d) + W_d(\varepsilon, t)\,\Theta(\varepsilon_d - \varepsilon)\right., \tag{2в}$$

где Θ — ступенчатая функция, $W_d(\varepsilon, t) = \exp[-N(\varepsilon, t)]$, причем

$$N(\varepsilon, t) = \frac{4\pi}{3}\int\limits_{\varepsilon - kT\ln(\nu_0 t)}^{\infty} d\varepsilon' g(\varepsilon')\, r_d^3(\varepsilon, \varepsilon', t), \tag{3}$$

$$r_d(\varepsilon, \varepsilon', t) = (2\gamma)^{-1}\left[\ln(\nu_0 t) - \frac{(\varepsilon-\varepsilon')}{kT}\Theta(\varepsilon-\varepsilon')\right], \tag{4}$$

а демаркационная энергия $\varepsilon_d(t)$ определяется условием

$$N[\varepsilon_d(t), t] = 1. \tag{5}$$

Функция $N(\varepsilon, t)$ есть число ловушек, доступных для прыжка с данной ЛС к моменту t; $r_d(\varepsilon, \varepsilon', t)$ — характерная длина прыжка с ЛС энергии ε на ЛС энергии ε' в момент t, которая определяется из условия $\nu(\varepsilon, \varepsilon', r_d)\, t = 1$ [4]. Энергия ε_d разделяет энергетические области глубоких и мелких ЛС. Заметим, что функции $g_d(\varepsilon, t)$ и $g_{sh}(\varepsilon, t)$, определенные формулами (2), совпадают с аналогичными функциями из работы [4] в энергетических областях $\varepsilon > \varepsilon_d(t)$ и $\varepsilon < \varepsilon_d(t)$ соответственно. Функция $g_b(\varepsilon, t)$ быстро возрастает по мере приближения к $\varepsilon_d(t)$ со стороны как малых, так и больших энергий. Эта функция по сути дела представляет собой «хвосты» распределений $g_d(\varepsilon, t)$ и $g_{sh}(\varepsilon, t)$ из работы [4], уходящие в сторону малых ($\varepsilon < \varepsilon_d$) и больших ($\varepsilon > \varepsilon_d$) энергий соответственно. Понятно, что для таких ловушек время первой делокализации близко к t, т. е. они не являются ни «чисто мелкими», ни «чисто глубокими», что и позволило выделить их в отдельную группу.

Кинетическое уравнение для функции $\rho(x, t, \varepsilon)$, которая определяется равенством $\int\limits_0^\infty d\varepsilon\rho(x, t, \varepsilon) = p(x, t)$, запишем следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t, \varepsilon) = 2\pi g(\varepsilon)\int\limits_{-1}^{1} d\mu\int\limits_0^\infty drr^2\int\limits_0^\infty d\varepsilon'\omega(\varepsilon', \varepsilon, r, t)\,\rho(x - r\mu, t, \varepsilon' + eEr\mu) - \rho(x, t, \varepsilon)/\tau(\varepsilon, t), \tag{6}$$

где $\mu = \cos v$, v — угол между направлением поля E и направлением прыжка (от ε' к ε). Время жизни носителя на ЛС с энергией ε определяется выражением

$$\tau^{-1}(\varepsilon, t) = 4\pi\int\limits_0^\infty drr^2\int\limits_0^\infty d\varepsilon'\omega(\varepsilon, \varepsilon', r, t)\,g(\varepsilon'), \tag{7}$$

где $\omega(\varepsilon, \varepsilon', r, t)$ — частота прыжков длиной r между ловушками с энергиями ε' и ε, причем в отличие от ν [см. (1)] величина ω учитывает вероятность ухода с исходной ЛС в данный момент времени, а также вероятность ухода на другие (кроме данной) ловушки. Интегрируя (6) по энергии и используя (7), а также допуская, что характерные для большинства прыжков величины r и eEr малы в сравнении с характерными масштабами изменения функции ρ по координате и энергии соответственно, и разложив подынтегральное выражение в формуле (6) по указанным малым параметрам до второго порядка, получаем

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x, t) = \frac{1}{6}\int\limits_0^\infty d\varepsilon'\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x, t, \varepsilon') - 2eE\frac{\partial^2}{\partial x\partial\varepsilon'}\right]\frac{\langle r^2\rangle_\varepsilon(\varepsilon')}{\tau(\varepsilon', t)}. \tag{8}$$

При записи (8) учтено равенство $\rho(x, t) = \int\limits_0^\infty d\varepsilon\rho(x, t, \varepsilon)$. Что касается пограничных и мелких ЛС, то для них величину ω естественно аппроксимировать следующими формулами соответственно:

$$\omega_b(\varepsilon, \varepsilon', r, t) = t^{-1}\Theta\,[r_d(\varepsilon, \varepsilon', t) - r], \tag{9а}$$

$$\omega_{sh}(\varepsilon, \varepsilon', r) = \tau^{-1}(\varepsilon)\,\Theta\,[r_*(\varepsilon, \varepsilon') - r], \tag{9б}$$

где $r_*(\varepsilon, \varepsilon') = r_d(\varepsilon, \varepsilon', \tau(\varepsilon))$. Из (9б) и (7) получаем следующее условие на функцию $\tau(\varepsilon)$:

$$N\,[\varepsilon, \tau, (\varepsilon)] = 1. \tag{10}$$

Из (9а) и (7) следует, что (10) выполняется [с заменой $\tau(\varepsilon)$ на t] для любой «пограничной» ЛС. Выражения (9), (3) и (10) означают, что через время τ после захвата носителя на мелкую ЛС (либо через время t после захвата на пограничную ЛС) появляется в среднем одна ловушка, доступная для прыжка (на нее и происходит прыжок). Длина прыжка при этом, как правило, равна $r_*(\varepsilon, \varepsilon')$ [либо $r_d(\varepsilon, \varepsilon', t)$]. Поэтому в формуле (8) естественно принять $\langle r^2\rangle_\varepsilon =$

$= \langle r_*^2 (\varepsilon', \varepsilon)\rangle_\varepsilon$, если ЛС с энергией ε' мелкая, и $\langle r^2\rangle_\varepsilon = \langle r_d^2 (\varepsilon', \varepsilon, t)\rangle_\varepsilon$, если ЛС с энергией ε' пограничная, причем, как следует из (9), (10),

$$\langle r_*^2 (\varepsilon', \varepsilon)\rangle_\varepsilon = \frac{4\pi}{3} \int\limits_{\varepsilon' - kT \ln \nu_0 \tau(\varepsilon')}^{\infty} d\varepsilon g(\varepsilon)\, r_*^5 (\varepsilon', \varepsilon)\,, \tag{11a}$$

$$\langle r_d^2 (\varepsilon', \varepsilon, t)\rangle_\varepsilon = \frac{4\pi}{3} \int\limits_{\varepsilon' - kT \ln \nu_0 \tau(\varepsilon')}^{\infty} d\varepsilon g(\varepsilon)\, r_d^5 (\varepsilon', \varepsilon, t)\,. \tag{11б}$$

Заметим, что из формул (5) и (10) следует, что $\tau\,[\varepsilon_d (t)] = t$ и, следовательно, $r_*\,[\varepsilon_d(t), \varepsilon] = r_d\,[\varepsilon_d(t), \varepsilon, t]$. Здесь и далее под $\tau\,(\varepsilon)$ понимается величина, определяемая формулой (10). Вводя обозначения $g_t\,(\varepsilon, t) = g_b\,(\varepsilon, t) + g_{sh}\,(\varepsilon, t)$ и $\rho_t\,(x, t, \varepsilon)$ (энергетическая плотность носителей, локализованных на этих «транспортных» ЛС), используя формулы (2), (4), (10), а также следующую «квазифермиевскую» аппроксимацию для функции $\rho\,(x, t, \varepsilon)$, которая следует из принципа детального равновесия и формулы (1)

$$\rho\,(x, t, \varepsilon) = f\,(x, t)\, g\,(\varepsilon) \Big/ \left\{1 + \exp\left[-\frac{\varepsilon - \varepsilon_d(t)}{kT}\right]\right\}, \tag{12}$$

уравнение (8) приводим к следующему виду, проинтегрировав его по времени в пределах от 0 до t:

$$p\,(x, t) - p\,(x, 0) = \frac{1}{6}\,\langle\langle r_t^2\,(\varepsilon', \varepsilon, t)\rangle_\varepsilon\rangle_{\varepsilon'} \frac{\partial^2}{\partial x_2}\, R\,(x, t) - \frac{eE}{3}\,\langle\langle r_t^2\,(\varepsilon', \varepsilon, t)\rangle_\varepsilon \times$$

$$\times \left[\frac{1}{2}\frac{g\,(\varepsilon_d)\,\Theta\,(\varepsilon' - \varepsilon_d)}{\int\limits_{\varepsilon_d(t)}^{\infty} d\varepsilon g\,(\varepsilon)} - \tau_t^{-1}\,(\varepsilon', t)\,\frac{\partial}{\partial \varepsilon'}\,\tau_t^{-1}\,(\varepsilon', t)\right]\rangle_{\varepsilon'}\,\frac{\partial}{\partial x}\,R\,(x, t)\,, \tag{13}$$

где

$$\langle r_t^2\,(\varepsilon', \varepsilon, t)\rangle_\varepsilon = [g_{sh}\,(\varepsilon', t)\,\langle r_*^2\,(\varepsilon', \varepsilon\,)\rangle_\varepsilon + g_b\,(\varepsilon', t)\,\langle r_d^2 (\varepsilon', \varepsilon, t)\rangle_\varepsilon]\,/\,g_t\,(\varepsilon', t)\,, \tag{14}$$

$$\tau_t^{-1}\,(\varepsilon, t) = [g_{sh}\,(\varepsilon, t)\,\tau^{-1}\,(\varepsilon) + g_b\,(\varepsilon, t)\,t^{-1}]\,/\,g_t\,(\varepsilon, t)\,, \tag{15}$$

$$R\,(x, t) = \int\limits_{t}^{t} dt' \int\limits_{0}^{\infty} d\varepsilon' \rho_t\,(x, t, \varepsilon')\,\tau_t^{-1}\,(\varepsilon', t)\,. \tag{16}$$

Индексы при угловых скобках в (13) означают усреднение по соответствующей величине, причем усреднение по ε' выполнено следующим образом:

$$\langle y\rangle_{\varepsilon'} = \int\limits_0^\infty d\varepsilon' y\,(\varepsilon')\,\rho_t\,(x, t, \varepsilon')\,\tau_t^{-1}\,(\varepsilon', t) \Big/ \int\limits_0^\infty d\varepsilon' \rho_t\,(x, t, \varepsilon')\,\tau_t^{-1}\,(\varepsilon', t)\,. \tag{17}$$

Для того чтобы найти связь между концентрацией носителей $p\,(x, t)$ и функцией $R\,(x, t)$, воспользуемся уравнением (6), записанным для того случая, когда ЛС с энергией ε является глубокой, пренебрегая теперь малыми параметрами. Используя (9), (10) и учитывая, что в рассматриваемом случае сильно неравновесного переноса $p(x, t) \simeq \int_0^\infty d\varepsilon\, \rho_d(x, t, \varepsilon)$ [4], нетрудно получить

$$R(x, t) = p(x, t)\, \eta(t), \tag{18}$$

где

$$\eta^{-1}(t) = \frac{4\pi}{3} \langle g_t^{-1}(\varepsilon', t) \left[g_{sh}(\varepsilon', t)\, \tilde{r}_*^3(\varepsilon') + \right.$$

$$\left. + g_b(\varepsilon', t)\, \tilde{r}^3(\varepsilon', t) \right] \rangle_{\varepsilon'} \int_{\varepsilon_d(t)}^\infty d\varepsilon\, g_d(\varepsilon, t). \tag{19}$$

При выводе (18), (19) учтено, что прыжки на глубокие ЛС происходят преимущественно вниз по энергии, поэтому при $\varepsilon > \varepsilon_d$ $r_*(\varepsilon', \varepsilon) = \tilde{r}_*(\varepsilon')$, $r_d(\varepsilon', \varepsilon, t) = \tilde{r}_d(\varepsilon', t)$ [см. (4)]. Подставив (18) в уравнение (13), получаем следующее уравнение для функции $p(x, t)$:

$$p(x, t) - p(x, 0) = \sum(t) \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} p(x, t) - \frac{eE}{\xi(t)} \frac{\partial}{\partial x} p(x, t) \right], \tag{20}$$

которое имеет ту же структуру, что и уравнения предельно неравновесного транспорта, полученные ранее в работах [9] с применением модели множественного захвата и [4], где учитывались туннельные прыжки. В уравнении (20)

$$\sum(t) = \frac{1}{6} \langle\langle r_t^2(\varepsilon', \varepsilon, t) \rangle_\varepsilon \rangle_{\varepsilon'} \eta(t), \tag{21}$$

$$\xi^{-1}(t) = \eta^{-1}(t)\, g\left[\varepsilon_d(t)\right] / \int_{\varepsilon_d(t)}^\infty d\varepsilon\, g(\varepsilon) - \langle \tau_t^{-1}(\varepsilon', t) \frac{\partial}{\partial \varepsilon'} \tau_t^{-1}(\varepsilon', t) \rangle_{\varepsilon'}. \tag{22}$$

Чтобы исследовать асимптотические формы выражений (21), (22) при малых и больших временах, рассмотрим подробнее зависимости $\varepsilon_d(t)$ и $\tau(\varepsilon)$. Как было показано в работе [6], существует энергия ε_τ такая, что при $\varepsilon < \varepsilon_\tau$ носитель, освобождаясь с ЛС энергии ε, с преобладающей вероятностью совершает прыжок на более глубокую ловушку, и наоборот, при $\varepsilon > \varepsilon_\tau$ прыжок является термоактивированным. Эту энергию естественно определить системой уравнений из формулы (10) и следующего условия:

$$\frac{4\pi}{3} \int_{\varepsilon_\tau}^\infty d\varepsilon' g(\varepsilon')\, r_d^3\left[\varepsilon_\tau, \varepsilon', \tau(\varepsilon_\tau)\right] = \frac{1}{2}, \tag{23}$$

которое означает, что вероятность безактивационного прыжка с уровня ε_τ есть 1/2. Используя формулы (3)—(5), (10), (23), находим следующие асимптотические зависимости для функций $\tau(\varepsilon)$, $\varepsilon_d(t)$:

$$\tau(\varepsilon) \approx \nu_0^{-1} \exp\left\{ \left[\left(\frac{6\gamma^3}{\pi} \right) / \int_\varepsilon^\infty d\varepsilon' g(\varepsilon') \right]^{1/3} \right\}, \quad \varepsilon \ll \varepsilon_\tau'; \tag{24a}$$

$$\tau(\varepsilon) \approx \nu_0^{-1} \exp\left[(\varepsilon - \varepsilon_*)/kT\right], \quad \varepsilon \gg \varepsilon_\tau; \tag{24б}$$

$$\int\limits_{\varepsilon_d(\varepsilon)}^{\infty} d\varepsilon g(\varepsilon) = \left[\frac{\pi}{6\gamma^3}\ln^3(\nu_0 t)\right]^{-1}, \qquad t \ll t_\tau; \tag{25а}$$

$$\varepsilon_d(t) = \varepsilon_* + kT\ln(\nu_0 t), \tag{25б}$$

где энергия ε_* зависит от спектра ЛС $g(\varepsilon)$ и температуры:

$$\int\limits_{\varepsilon_*}^{\infty} d\varepsilon g(\varepsilon)\left(\frac{\varepsilon-\varepsilon_*}{2\gamma kT}\right)^3 = 1, \tag{26}$$

а характерное время t_τ определяется условием

$$\varepsilon_d(t_\tau) = \varepsilon_\tau. \tag{27}$$

Заметим, что при $t \ll t_\tau$ прыжки происходят преимущественно вниз по энергии (с увеличением ε), и основной вклад в ток вносят ЛС с энергиями $\varepsilon \simeq \varepsilon_d(t)$, имеющие наибольшую заселенность, т. е. преимущественно пограничные ЛС. При $t \gg t_\tau$, когда большинство прыжков сопровождается термической активацией, функция $\rho(x, t, \varepsilon)/\tau(\varepsilon)$ при монотонно убывающей $g(\varepsilon)$ имеет, как следует из (24) и (12), максимум при $\varepsilon \simeq \varepsilon_\tau$, при этом $\varepsilon_d \gg \varepsilon_\tau$. Следовательно, мелкие ЛС с энергиями вблизи ε_τ вносят основной вклад в процесс переноса, так что возникает «уровень протекания» [6], а вклад пограничных ЛС, концентрация которых убывает со временем [параметром малости здесь служит функция $\eta(t)$: при $t \ll t_\tau$ $\eta(t) \simeq 1$, при $t \gg t_\tau$ $\eta(t) \simeq \mathrm{const}\int\limits_{\varepsilon_d}^{\infty} d\varepsilon g_d(\varepsilon, t) \to 0$], становится пренебрежимо малым.

Используя формулы (12), (21)—(26), нетрудно получить следующие асимптотические выражения для функций, входящих в уравнение (20):

$$\sum(t) \simeq \frac{1}{6}(\ln \nu_0 t/2\gamma)^2, \quad t \ll t_\tau; \tag{28а}$$

$$\sum(t) \simeq \frac{1}{4\pi}\left[\langle\langle r_*^2(\varepsilon',\varepsilon)\rangle_\varepsilon\rangle_{\varepsilon'} / \langle\langle r_*^3(\varepsilon',\varepsilon)\rangle_\varepsilon\rangle_{\varepsilon'}\right] \times \left[\int\limits_{\varepsilon_d(t)}^{\infty} d\varepsilon g_d(\varepsilon, t)\right]^{-1}, \quad t \gg t_\tau; \tag{28б}$$

$$\xi(t) = \int\limits_{\varepsilon_d}^{\infty} d\varepsilon g(\varepsilon)/g[\varepsilon_d(t)], \quad t \ll t_\tau; \tag{29а}$$

$$\xi(t) = kT, \quad t \gg t_\tau. \tag{29б}$$

В качестве примера рассмотрим экспоненциальное распределение ЛС по энергии:

$$g(\varepsilon) = (N_t/\varepsilon_0)\exp(-\varepsilon/\varepsilon_0). \tag{30}$$

Используя формулы (24)—(30), получим следующие результаты:

$$\varepsilon_* \simeq 3\varepsilon_0' \ln(\alpha_*/\alpha), \quad \varepsilon_\tau \simeq 3\varepsilon_0\ln(4^{1/3}\alpha_*/\alpha); \tag{31}$$

$$t_\tau \simeq \nu_0^{-1} \exp(2.32/\alpha); \tag{32}$$

$$\sum(t) \approx \alpha\,(\gamma/N_t)\,(\nu_0 t)^{\alpha}, \quad t \gg t_\tau; \tag{33}$$

$$\xi(t) \simeq \varepsilon_0, \quad t \ll t_\tau, \tag{34}$$

где $\alpha = kt/\varepsilon_0$ — дисперсионный параметр, $\alpha_* = (\pi N_t/\gamma^3)^{1/3} \simeq a_L/a_t$ $(r_L = \gamma^{-1}$ — радиус локализации, a_t — среднее расстояние между ЛС).

Анализ полученных результатов [см. (20)—(34)] приводит к следующим выводам.

1. Дисперсионная туннельная кинетика концентрации носителей заряда описывается дифференциальным уравнением (20) той же структуры, что и уравнение В. И. Архипова и А. И. Руденко [4, 9].

2. Временна́я зависимость величины $\Sigma(t)$, аналогичной произведению $D_c = \tau(t)$ из работ [4, 9] [где D_c — феноменологический коэффициент диффузии, $\tau(t)$ — переменное время жизни носителей до захвата на глубокие ловушки], при $t \gg t_\tau$ такая же, как и зависимость $\tau(t)$, полученная в указанных работах. Заметим, что развитый здесь подход позволяет выразить D_c через другие параметры материала: γ, $g(\varepsilon)$ и температуру [см. (28), (33)].

3. При $t \ll t_\tau$ кинетика туннельного транспорта универсальна, т. е. не зависит от вида функции $g(\varepsilon)$ [см. (28а)]. Заметим, что этот вывод был сделан в работе [3] при рассмотрении туннельной диффузии при $T=0$; этот же вывод следует и из результатов работы [4], однако в этой работе получена низкотемпературная зависимость $\sum(t) \sim \ln^3(\nu_0 t)$ (при $\nu_0 t \gg 1$), а не $\ln^2(\nu_0 t)$, как здесь. Различие, по-видимому, связано с введением в работе [4] «фактора полевой асимметрии вероятности прыжка» как феноменологической константы. Заметим, что температурная зависимость $\sum(t)$ при $t \ll t_\tau$ также практически отсутствует, т. е. кинетика переноса слабо отличается от случая $T \to 0$, что связано с резким преобладанием вероятности прыжка с энергетическим «заглублением» над вероятностью термоактивированного прыжка. В пояснение временно́й зависимости (28а) для $\Sigma(t)$ заметим, что в соответствии с (4) характерная длина прыжка носителей с уровней вблизи $\varepsilon_d(t)$ есть $(2\gamma)^{-1}\ln(\nu_0 t)$, а диффузионное смещение носителя в низкотемпературном режиме оказывается порядка длины последнего прыжка [3].

4. Соотношение Эйнштейна между коэффициентами дрейфа и диффузии (согласно которому $\xi = kT$) выполняется лишь при $t \gg t_\tau$ [см. (29)]. При малых же временах величина ξ зависит от вида функции $g(\varepsilon)$ и, вообще говоря, времени, но не зависит от температуры. Заметим, что так и должно быть, поскольку сдвиг «центра тяжести» распределения носителей возникает при данных условиях благодаря тому, что в направлении поля оказывается больше ЛС, доступных для прыжка, чем в противоположном направлении, и, следовательно, соотношение между коэффициентом диффузии и подвижностью должно зависеть от спектра ЛС. Интересно, что при $t \gg t_\tau$ $\xi(t) = \mathrm{const}$ только в случае экспоненциального $g(\varepsilon)$ (30) [см. (34)]. Как следует из (29а), $\xi(t)$ уменьшается со временем, если $g(\varepsilon)$ убывает с ростом ε быстрее, чем экспонента, и возрастает в противном случае.

Таким образом, результаты данной модели, описывающей туннельный транспорт, совпадают с картиной дисперсионного транспорта согласно модели множественного захвата и ее туннельной модификации [4, 9] лишь в пределе больших времен $(t \gg t_\tau)$. Заметим, что полученная здесь величина t_τ [см. (32)] достаточно хорошо совпадает с аналогичной величиной $t_s = \nu_0^{-1}\exp(3/\alpha)$, оцененной другим способом в работе [6]. При $\alpha \simeq 1/2$ величина t_τ всего на 2—3 порядка превышает ν_0^{-1}, так что если принять $\nu_0^{-1} \simeq 10^{-12}$ с [3], то времена меньше t_τ должны быть с трудом различимы в обычной экспериментальной методике. Однако t_τ резко растет с понижением температуры, и при $\alpha \ll 1/2$ временнóй интервал $t \ll t_\tau$ весьма заметен [6]. Например, авторами работы [10] обнаружено, что квантовый выход близнецовой рекомбинации $Q(T)$ в a-Si : H перестает убывать с понижением температуры при $T \simeq 30$ K (при этом $Q \simeq 3 \cdot 10^{-3}$), что соответствует $\alpha = 1/10$. Такая зависимость $Q(T)$ может быть в принципе объяснена на основе модели Онзагера при условии, что время t_τ больше характерного времени близнецовой рекомбинации, так что $\xi = \varepsilon_0$. Малая величина Q при низких температурах, по-видимому, обусловлена интенсивной туннельной рекомбинацией [5].

Обсудим теперь вопрос о том, при каком условии наличие зоны делокализованных состояний не искажает существенно описанную выше кинетику туннельного транспорта. Заметим, что в записи формулы (3) предполагается, что термической активации носителей в зону практически не происходит. Это допустимо при условии $\varepsilon > \varepsilon_i$, причем энергия ε_i такова, что $\nu_c^{-1} \exp(\varepsilon_i/kT) = \tau(\varepsilon_i)$ (здесь $\nu_c = \nu_0 N_c / N_t$ — частота попыток активации в зону, N_c — эффективное число проводящих состояний). Таким образом, при $0 < \varepsilon < \varepsilon_i$ носители с преобладающей вероятностью активируются в зону вместо прыжков на другие ЛС, т. е. перенос с участием таких ЛС описывается моделью множественного захвата [9]. Понятно, что описанный выше «низкотемпературный» режим $[\sum(t) \sim \ln^2(\nu_0 t)]$ может существовать лишь при условии $\varepsilon_i \ll \varepsilon_\tau$. В случае экспоненциального $g(\varepsilon)$ это требование приводит к условию

$$\frac{\alpha^3}{12}\left[\ln\left(\frac{N_t}{N_c}\right) + \frac{3}{2}\ln\left(\frac{4^{1/3}\alpha_*}{\alpha}\right)\right]^3 \gg 1 . \qquad (35)$$

В том случае, если N_c не слишком значительно превышает N_t [т. е. $g(\varepsilon)$ вблизи края подвижности не испытывает резких скачков], из (35) нетрудно получить, что условие $\varepsilon_i \ll \varepsilon_\tau$ выполняется, если $\alpha \ll \alpha_* \simeq a_L / a_t$. Полагая для a-Si : H $\gamma^{-1} \simeq 10$ Å, $N_t \simeq 10^{20}$ см$^{-3}$, получаем $\alpha_* \approx 1/4$, что соответствует (в случае электронной проводимости) $T \simeq 80$ K. При меньших значениях температуры можно ожидать существования на длительном временнóм интервале режима низкотемпературного транспорта с неэйнштейновским соотношением между коэффициентом диффузии и подвижностью.

В заключение автор приносит благодарность В. И. Архипову за полезное обсуждение результатов данной работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Звягин И. П. Кинетические явления в неупорядоченных полупроводниках. М., 1984. 192 с.
[2] Paurmeier L., Richert R., Bässler H. // Synth. Met. 1990. V. 37. N 1-3. P. 537—545.
[3] Барановский С. Д., Фрицше Х., Левин Е. И., Рузин И. М., Шкловский Б. И. // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. В. 4(10). С. 1362—1379.
[4] Архипов В. И. // ФТП. 1987. Т. 21. В. 8. С. 1450—1453.
[5] Архипов В. И., Никитенко В. Р. // ФТП. 1990. Т. 24. В. 11. С. 1923—1928.
[6] Monroe D. // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 54. N 2. P. 146—149.
[7] Zvyagin I. P. // Phys. St. Sol. (b). 1989. V. 152. N 1. P. 231—238.
[8] Grünewald M., Movaghar B. // J. Non-Cryst. Sol. 1987. V. 97-98. P. 113—116.
[9] Arkhipov V. I., Rudenko A. I. // Phil. Mag. B. 1982. V. 45. N 2. P. 189—207.
[10] Jahn K., Carius R., Fuhs W. // J. Non-Cryst. Sol. 1987. V. 97–98. P. 575—578.

Московский инженерно-физический институт

Получена 10.02.1992
Принята к печати 4.03.1992