

**ПОПЕРЕЧНАЯ ПРЫЖКОВАЯ ПРОВОДИМОСТЬ
АМОРФНЫХ ПЛЕНОК
В СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ**

Левин Е. И., Рузин И. М., Шкловский Б. И.

Построена теория неомического прыжкового транспорта через тонкую аморфную пленку, основанная на представлениях об определяющей роли редких цепочек локализованных состояний, обладающих аномально большой проводимостью. Показано, что вольтамперные характеристики тонкой пленки существенно отличаются от объемных.

1. Введение. Основным механизмом низкотемпературной проводимости аморфных полупроводников является прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка (variable range hopping). Она связана с прыжками электронов по локализованным состояниям (для краткости будем называть их просто узлами) с энергиями, близкими к уровню Ферми, который расположен вблизи середины квазизапрещенной зоны. С понижением температуры T энергетическая полоса участвующих в проводимости состояний вокруг уровня Ферми сужается, а длины прыжков растут, в результате омическая проводимость субывает по закону Мотта

$$\sigma = \sigma_0 \exp[-(T_0/T)^{1/4}], \quad T_0 = \beta/k g_0 a^3. \quad (1)$$

Здесь g_0 — плотность состояний на уровне Ферми, a — радиус локализации этих состояний, $\beta = 23$ [1].

В экспериментальных работах часто исследуются тонкие аморфные пленки, заключенные между двумя плоскими металлическими контактами (см. [2] и ссылки в [3]). Поллак и Хаусер [2] показали, что при достаточно малой толщине пленки L ее проводимость должна экспоненциально возрастать с уменьшением L , становясь при этом существенно большей, чем в (1). Это связано с выделенной ролью пересекающих пленку редких цепочек, в которых узлы находятся аномально близко друг от друга. Такие цепочки обладают настолько большой проводимостью, что, несмотря на их малое число, полностью определяют транспорт поперек достаточно тонкой пленки.

Количественная теория поперечной проводимости была построена в работе [3]. Авторы [3] показали, что определяющие проводимость пленки оптимальные цепочки узлов практически прямолинейны и эквидистантны. Для проводимости $\sigma(L)$ они получили

$$\sigma(L) = \sigma_0 \exp(-2\sqrt{2\lambda_T L/a}), \quad (2)$$

где λ_T — решение уравнения

$$\lambda_T = \ln \left(\frac{\nu_T i_{\tau}}{g_0 k T a L^2} \right), \quad (3)$$

$\nu_T = 0.270$, а σ_0 — предэкспоненциальный множитель. Зависимость (2) отличается от полученной в [2] наличием нового логарифмического множителя $8\lambda_T$. Формула (2) справедлива, пока $L \ll a (T_0/T)^{1/4}$, т. е. когда $\sigma(L) \gg \sigma_0$ и $\lambda_T \gg 1$.

Настоящая работа посвящена развитию идей [2, 3] на случай неомического прыжкового транспорта поперек аморфной пленки. Как показано в [4], в очень сильных электрических полях $E > kT/e\alpha$ вольтамперная характеристика (ВАХ) объемного полупроводника имеет вид [4]

$$j(E) = j_0 \exp[-(E_0/E)^{1/4}], \quad E_0 = \alpha k T_0 / e a, \quad (4)$$

где α — численный коэффициент, e — абсолютная величина заряда электрона. Формула (4) описывает прыжки электронов в окрестности квазиуровня Ферми, сопровождающиеся постоянным излучением фононов (рис. 1, а). В разделе 2 мы покажем, что ток поперек достаточно тонкой пленки $L \ll L_c \equiv a(E_0/E)^{1/2}$ много больше приведенного в (4) и описывается формулой, аналогичной (2),

$$j(E) = j_0 \exp(-2\sqrt{2L\lambda_E/a}), \quad (5)$$

где

$$\lambda_E = \ln\left(\frac{\nu_E}{g_0(eEL)La^2}\right) = \ln\left(\frac{\nu_E}{g_0eULa^2}\right), \quad (6)$$

$\nu_E = 2/\pi e$ и $U = EL$ — напряжение на пленке. При $L = L_c$ величина λ_E становится порядка единицы и (5) переходит в (4). В тонких пленках формула (5) работает в области полей $E \gg kT/e\alpha_T$, когда показатель экспоненты в (5) по модулю много меньше, чем в (2). В то же время поправки к омической формуле (2) становятся порядка 100 % уже при $eEL = kT$. Теория ВАХ в промежуточной области $kT \ll eU \ll kTL/\alpha_T$ построена в разделе 3. Показано, что в таких полях

$$j(U) \approx \frac{kT}{eL} \cdot (L) \exp\left(\eta \sqrt{\frac{eU}{kT}}\right), \quad (7)$$

где $\eta = 1.263$. Подобная зависимость была получена ранее в работе [5] при изуче-

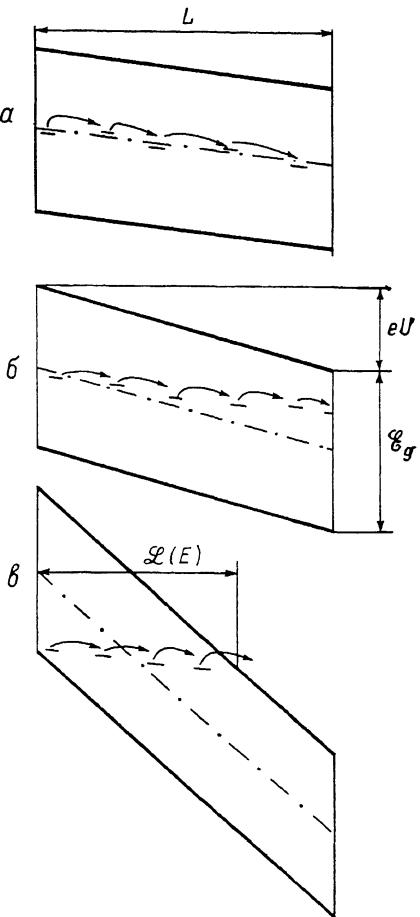


Рис. 1.

Наклонные жирные линии — дно зоны проводимости и потолок валентной зоны, штрихпунктирные — середина кванзапрещенной зоны. Стрелки показывают характер оптимальных цепочек при различных напряжениях на пленке U .

ния ВАХ одножильных участков переколяционного кластера, однако коэффициент η остался тогда не вычисленным. Геометрия проводящих цепочек в тонкой пленке гораздо проще, и поэтому здесь коэффициент η удается вычислить точно.

Со стороны больших U область применимости (5) ограничена благодаря тому, что плотность состояний g и радиус локализации a , вообще говоря, зависят от энергии, отсчитанной от энергии Ферми. Если уровень Ферми находится в середине запрещенной зоны, то естественно предположить, что плотность состояний имеет на нем минимум и растет при удалении от него по закону типа $g(\epsilon) = g_0 \exp(\epsilon/\epsilon_1)$, где $\epsilon_1 \ll \xi_g$, а ξ_g — ширина запрещенной зоны. Тогда формула (5) работает лишь при $eU \ll \epsilon_1$. При $eU \gg \epsilon_1$ оптимальными оказываются цепочки, вдоль которых электрон теряет энергию медленнее, чем падает его потенциальная энергия во внешнем поле E , и благодаря этому использует участки спектра локализованных состояний с $\epsilon \approx eU$, для которых $g(\epsilon) \gg g_0$ (рис. 1, б). В результате $j(U)$ растет быстрее, чем по формуле (5). Радиус локализации a

также обычно возрастает с ростом ϵ , что приводит к качественно тем же следствиям, что и рост $g(\epsilon)$.

При $eU \gg \mathcal{E}_g$ картина транспорта через пленку меняется еще сильнее. Оптимальными оказываются цепочки узлов с длиной порядка $\mathcal{L}(E) = \mathcal{E}_g/eE = L\mathcal{E}_g/eU$, много меньшей толщины пленки L . По этим цепочкам электрон выходит в зону проводимости, где быстро релаксирует по энергии (рис. 1, в). В результате ВАХ может быть получена подстановкой $\mathcal{L}(E)$ вместо L в формулу (5) с одновременной заменой a и g_0 на некоторые средние по запрещенной зоне величины \bar{a} и \bar{g} , т. е.

$$j = j_0 \exp \left[-2 \sqrt{\frac{2L\mathcal{E}_g}{\bar{a}eU} \ln \left(\frac{1}{\bar{g}\mathcal{E}_g/L\bar{a}^2} \right)} \right].$$

Таким образом, при $eU \gg \mathcal{E}_g$ зависимость $j(U)$ значительно усиливается по сравнению с формулой (5). Здесь мы ограничимся лишь этими замечаниями

о сверхсильных полях, отложив подробное рассмотрение этой области до следующей работы.

2. Область безактивационной проводимости. Приведем сначала качественный вывод (5). Будем, следяя [3], считать, что основная часть тока через пленку переносится почти эквидистантными цепочками, т. е. цепочками, узлы которых находятся в малых областях с центрами, эквидистанто расположеными на

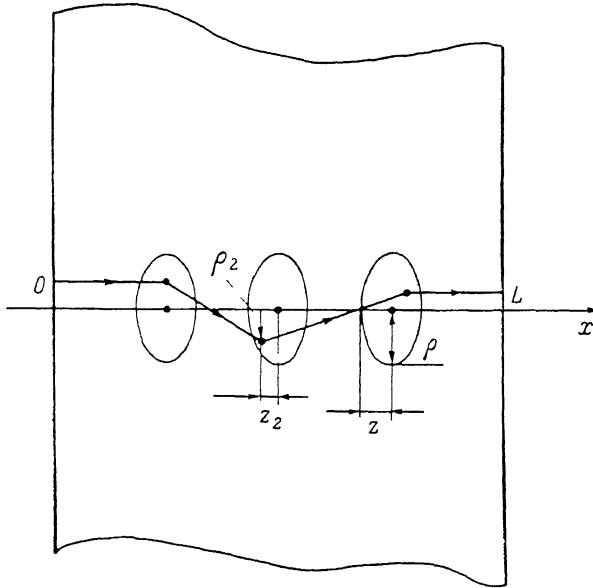


Рис. 2. Цепочка из трех узлов, пересекающая пленку.

Эллипсами показаны области вблизи центров, эквидистантно расположенных на оси x , в которых находятся узлы оптимальных цепочек.

прямой, перпендикулярной поверхности пленки (рис. 2). Пусть поперечный и продольный размеры этих областей равны ρ и z соответственно, а число звеньев цепочки равно N , так что среднее расстояние между узлами L/N . Наша цель — найти $j(E)$ при нулевой температуре. Такой ток может быть связан лишь с процессами излучения, т. е. электрон должен излучать фононы в каждом прыжке, как бы спускаясь по лестнице. На каждом шаге электрон опускается по энергии на величину eEL/N . Поэтому концентрация узлов, на которые электрон может перейти с данного узла, равна $g_0 eEL/N$, а число таких цепочек на единицу площади порядка

$$w_N = \rho^{-2} (g_0 eELz\rho^2/N)^{N-1}. \quad (8)$$

Ток, текущий между двумя последовательными узлами цепочки с координатами r_i и r_{i+1} , равен [1]

$$I = e\gamma_0 \exp(-2|r_{i+1} - r_i|/a) f_i (1 - f_{i+1}), \quad (9)$$

где f_i — среднее число заполнения узла i . Величины f_i зависят от номера узла i таким образом, чтобы, несмотря на разброс величин $|r_{i+1} - r_i|$, ток I был одинаковым для всех пар. Вычисление величин f_i для всех узлов в общем виде затруднительно. Мы не будем к этому стремиться, а воспользуемся тем, что для прыжка $i_m \rightarrow i_m + 1$ максимальной в цепочке длины r_m величина $F = f_i (1 - f_{i+1})$ не слишком отличается от единицы. Чтобы понять это утверждение, рас-

смотрим два частных случая, которые показывают, в каких пределах может меняться величина F . В качестве первого случая рассмотрим строго эквидистантную цепочку. Тогда все $f_i = 1/2$ и $F = 1/4$. В качестве второго случая рассмотрим цепочку, в которой частота $\gamma_0 \exp(-2r_m/a)$ гораздо меньше частот остальных прыжков. В этом случае для постоянства тока должно быть $f_i = 1$ при $i \leq i_m$ и $f_i = 0$ при $i \geq i_m + 1$. Тогда $F = 1$. В остальных цепочках имеет место промежуточная между этими двумя предельными случаями ситуация, поэтому $1 \geq F \geq 1/4$. Далее мы не будем пытаться вычислить численный коэффициент в предэкспоненте (5) и поэтому не будем учитывать отличие F от единицы. Тогда ток через цепочку можно приблизенно записать в виде [3]

$$I_N \approx e\gamma_0 \exp(-2r_m/a) \approx e\gamma_0 \exp\left(-\frac{2L}{Na} - \frac{2z}{a} - \frac{\rho^2 N}{La}\right). \quad (10)$$

Плотность тока через цепочки из N звеньев $j_N = I_N w_N$ имеет острый максимум по N , z и ρ при значениях

$$N = N_m = \sqrt{2L/a\lambda_E}, \quad z = z_m = N_m a/2, \quad \rho = \rho_m = \sqrt{La}.$$

Вычисляя вклад в j таких оптимальных цепочек, получаем (5) с $j_0 = e\gamma_0/aL$ и $\gamma_E = 2e^2$. Видно, что $z_m = L/N\lambda_E \ll L/N$, $\rho_m = L/N\sqrt{\lambda_E} \ll L/N$, так что разложение в ряд в показателе экспоненты в (10) правомерно и оптимальные цепочки действительно практически эквидистантны.

Для точного вычисления γ_E мы откажемся от грубых характеристик цепочек ρ , z и будем описывать каждую цепочку из $N-1$ узлов координатами r_i и энергиями ε_i , всех ее узлов.

Плотность связанных с такими цепочками тока запишем в виде

$$j_N = e\gamma_0 \int_0^\infty \exp(-2r_m/a) dw_N(r_m), \quad (11)$$

где $w_N(r_m)$ — количество на единицу площади цепочек, в которых нет ни одной пары с $|r_{i+1} - r_i| > r_m$ и в которых в данном электрическом поле E все энергии ε_i расположены в порядке убывания, причем полная потеря энергии электроном при спуске равна eEL :

$$w_N(r_m) = g_0^{N-1} S^{-1} \left[\int d^3 r_1 \dots d^3 r_{N-1} \prod_{i=0}^{N-1} \Theta(r_m - |r_{i+1} - r_i|) \right] \left[\int_0^{eEL} d\varepsilon_1 \dots \int_0^{e\varepsilon_{N-2}} d\varepsilon_{N-1} \right], \quad (12)$$

где S — площадь пленки. При помощи разложения

$$|r_{i+1} - r_i| \simeq x_{i+1} - x_i + (\rho_{i+1} - \rho_i)^2 N/2L, \quad (13)$$

учитывающего, что оптимальные цепочки сильно вытянуты и почти эквидистантны (x_i и ρ_i — цилиндрические координаты узла i), интеграл по координатам в (12) преобразуется к виду

$$\int_0^L dx_1 \dots dx_{N-1} \int d^3 \rho_1 \dots d^3 \rho_{N-1} \prod_{i=0}^{N-1} \Theta[r_m - x_{i+1} + x_i - (\rho_{i+1} - \rho_i)^2 N/2L],$$

$x_0 = 0$, $x_N = L$, $\rho_0 = \rho_1$, $\rho_N = \rho_{N-1}$ (рис. 2). Интегрируя по $d^3 \rho_i$, а затем последовательно по dx_{N-1} , dx_{N-2} и т. д., несложно получить, что последний интеграл равен

$$S \left(\frac{2\pi L}{N} \right)^{N-2} = (Nr_m - L)^{2N-3} \Theta(Nr_m - L)/(2N - 3)!$$

Вычисление интеграла по энергиям в (12) дает $(eEL)^{N-1}/(N-1)!$ В результате, подставляя полученные выражения в (12), а (12) в (11) и вычисляя интеграл по r_m методом перевала, получаем

$$j_N = \frac{e\gamma_0}{L^2} \left(\frac{\pi e}{2} g_0 a^2 L^2 c E \right)^{N-1} \exp\left(-\frac{2L}{Na}\right). \quad (14)$$

Оптимизация (14) по N и дает формулу (5) со значением v_E , приведенным во Введении.

Отметим, что точность разложения (13) не позволяет вычислить предэкспоненту в (5) и (14). Действительно, погрешность разложения (13) порядка $\rho^4(N/L)^3 \approx \sqrt{La/\lambda_E^3}$, что приводит к погрешности порядка $\sqrt{L/a\lambda_E^3}$ в показателе экспоненты (5). Эта величина много меньше показателя экспоненты, но может быть велика по сравнению с единицей.

3. Область промежуточных полей. Обратимся теперь к области полей $kT \ll eEL \ll kTL/\lambda_E$, в которых, как мы покажем в этом разделе, зависимость $j(U)$ описывается формулой (7). Интересующие нас поля не столь велики, чтобы обеспечить электронам путь от края до края пленки с постоянным понижением энергии, поэтому вместо формулы (9) мы должны использовать следующее выражение для тока через пару узлов i и $i+1$:

$$I = -e [f_i(1-f_{i+1})\gamma_{i,i+1} - f_{i+1}(1-f_i)\gamma_{i+1,i}], \quad (15)$$

где

$$\gamma_{ij} = \gamma_0 \exp\left(-\frac{2|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}{a}\right) \times \begin{cases} \mathcal{N}(\Omega_{ij}), & \Omega_{ij} > 0, \\ \mathcal{N}(-\Omega_{ij}) + 1, & \Omega_{ij} < 0, \end{cases}$$

$$\Omega_{ij} = \epsilon_j - \epsilon_i + eE(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i),$$

а $\mathcal{N}(\Omega)$ — функция Планка [1]. Если значения f_i выразить через квазиуровень Ферми μ_i , $f_i = \{1 + \exp[(\epsilon_i - \mu_i)/kT]\}^{-1}$, то для достаточно низких температур ($kT \ll |\epsilon_i - \mu_i|, |\epsilon_i - \epsilon_j|$) формула (15) преобразуется к виду

$$I = -2e\gamma_0 \exp\left(-\frac{2|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|}{a} - \frac{|\epsilon_i - \mu_i| + |\epsilon_{i+1} - \mu_{i+1}| + |\Omega_{i,i+1}|}{2kT}\right) \operatorname{sh}\left(\frac{u_i - u_{i+1}}{2kT}\right), \quad (16)$$

где $u_i = \mu_i + eE\mathbf{r}_i$ — электрохимический потенциал [6]. Договоримся отсчитывать все энергии от равновесного положения уровня Ферми (тогда в отсутствие внешнего поля все μ_i равны нулю). В омических полях, когда все $u_i \ll kT$, (16) можно разложить по $u_i/kT, u_{i+1}/kT$ и получить аналог известного выражения Миллера и Абрахамса

$$I = -e\gamma_0 \exp\left(-\frac{2L}{Na} - \xi_i\right) \frac{u_i - u_{i+1}}{kT},$$

$$\xi_i = \frac{2}{a} (|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1}| - L/N) + (|\epsilon_i| + |\epsilon_{i+1}| + |\epsilon_i - \epsilon_{i+1}|)/2kT.$$

Будем говорить, что пара узлов i и $i+1$ работает в «неомическом режиме», если $\mu_i - \mu_{i+1} > kT$. Как мы покажем далее, в интересующем нас интервале полей в неомическом режиме работает лишь малая часть пар в цепочке, поэтому общая картина зависимости I и μ от координаты x вдоль цепочки выглядит так, как показано на рис. 3. В этой ситуации для неомических пар всегда выполняется условие $\mu_i - \mu_{i+1} \geq eE(\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i)$, поэтому в (16) можно положить $u_i - u_{i+1} \simeq \mu_i - \mu_{i+1}$ и $\Omega_{i,i+1} \simeq \epsilon_{i+1} - \epsilon_i$. Выражение для тока через пару, работающую в неомическом режиме, можно получить, заменив в формуле (16) гиперболический синус на экспоненту. Вид этого выражения будет зависеть от

α	Конфигурация пары	$-\xi_I$	Условие работы в неомическом режиме	Название	n_α^0
1	$\epsilon_i > 0, \epsilon_{i+1} < 0$	$-\xi_i + \frac{\mu_i - \mu_{i+1}}{kT}$	$\xi_i > \xi_I$	Мягкая	0.209
2	$\epsilon_i > 0, \epsilon_{i+1} > 0$	$-\xi_i + \frac{\mu_i}{kT}$	$\xi_i > \xi_I + \frac{\mu_{i+1}}{kT}$	Верхняя	0.291
3	$\epsilon_i < 0, \epsilon_{i+1} < 0$	$-\xi_i - \frac{\mu_{i+1}}{kT}$	$\xi_i > \xi_I - \frac{\mu_i}{kT}$	Нижняя	0.291
4	$\epsilon_i < 0, \epsilon_{i+1} > 0$	$-\xi_i$	$\xi_i > \xi_I$	Жесткая	0.209

знаков энергий ε_i и ε_{i+1} . Зависимости $\xi_i = -\ln(I/e\gamma_0)$ от μ_i и μ_{i+1} для четырех возможных конфигураций пары узлов приведены в таблице. Там же даны условные названия конфигураций, которыми мы будем пользоваться далее.

Если попытаться заменить последовательность пар узлов на цепочку эквивалентных сопротивлений (аналогично теории Миллера и Абрахамса для омического случая), то мягкие и жесткие пары будут эквивалентны прямо и обратно включенным диодам соответственно, но с верхними и нижними парами никаких нелинейных сопротивлений сопоставить нельзя, так как ток через них не выражается через разность каких-либо потенциалов. В цепочках, определяющих омическую проводимость, встречаются пары всех четырех типов. Поскольку ток через жесткие пары, находящиеся в неомическом режиме, не возрастает при увеличении разности потенциалов на паре, возрастание с напряжением полного тока через пленку может происходить только за счет цепочек, не содержащих жестких пар. Для пар остальных типов ток экспоненциально за-

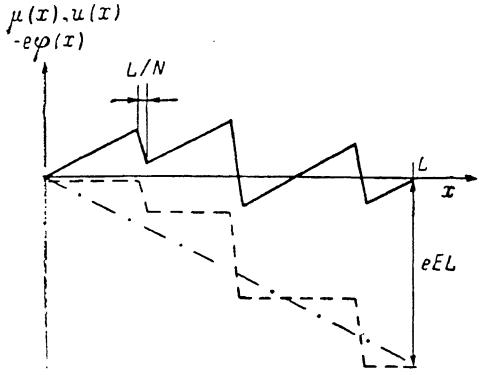


Рис. 3. Изменение вдоль цепочки потенциальной энергии электрона $-e\varphi(x)$ (штрих-пунктирная линия), химического потенциала $\mu(x)$ (сплошная линия) и электрохимического потенциала $u(x)$ (штриховая линия).

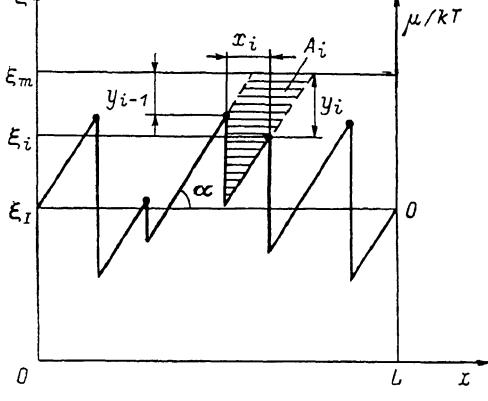


Рис. 4. Зависимость $\mu(x)$ (сплошная линия) для цепочки, в которой в неомическом режиме работают только верхние пары. (В отличие от рис. 3 мы пренебрели здесь размером пары L/N).

Черными точками обозначены величины ξ_i для неомических пар.

висит от значений потенциала и параметров пары, поэтому полный ток через пленку можно вычислять при помощи метода оптимальной флюктуации.

Расчет будет производиться по следующей схеме. Сначала мы найдем оптимальные (в смысле вклада в проводимость) цепочки, у которых в неомическом режиме работают только мягкие пары, затем — оптимальные цепочки, содержащие только верхние (или нижние) неомические пары, а затем покажем, как на основе этих двух решений построить оптимальную цепочку общего вида.

Перед тем как приступить к вычислению неомического тока, изучим сначала несколько подробнее, как устроены цепочки, обеспечивающие омическую проводимость пленки. Рассмотрим все цепочки из N звеньев, состоящие только из пар узлов с $\xi_i \leq \xi_m$. Узлы таких цепочек должны отстоять от узлов эквидистантной цепочки на $z \leq 2a\xi_m$, $\rho \leq (La\xi_m/N)^{1/2}$ и иметь энергии $|\varepsilon_i| \leq \xi_m kT$, поэтому их полное число на единицу площади

$$w_N(\xi_m) \simeq (La)^{-1} [\mathcal{A}(ga^2LkT/N)\xi_m^3]^{N-1}, \quad (17)$$

где \mathcal{A} — численный коэффициент [строгий вывод (17) приведен в *Приложении 1*]. Проводимость каждой такой цепочки порядка $\sigma(\xi_m) = (e^2\gamma_0/kT) \exp(-\xi_m)$. Общая проводимость цепочек, содержащих N звеньев, $\sigma_N = \int \sigma(\xi_m) d\xi_m$ определяется цепочками с $\xi_m \equiv \xi_{\text{om}} = 3N$. [Несложно проверить, что оптимизация σ_N по N дает формулу (2), приведенную во *Введении*].

Для изучения неомической проводимости нам потребуется знать, как расположены пары узлов каждого из четырех типов по величинам ξ_i в цепочках, определяющих омическую проводимость. Введем плотность пар в цепочке $n_\alpha(\xi)$ ($\alpha = 1, 2, 3, 4$), где $n_\alpha(\xi) d\xi$ — среднее число пар типа α в одной цепочке, для которых $\xi_i \leq \xi \leq \xi_i + d\xi$ (так что $\sum_{\alpha=1}^4 \int_0^{\xi_m} n_\alpha(\xi) d\xi = N$). Как показано в *Приложении 1*, плотности $n_\alpha(\xi)$, усредненные по всем цепочкам с $\xi_i \leq \xi_{om}$, при $|\xi - \xi_{om}| \ll N$ можно считать не зависящими от ξ и равными n_α^0 (соответствующие значения n_α^0 приведены в таблице; $n_1^0 = n_4^0$, $n_2^0 = n_3^0$, $\sum_\alpha n_\alpha^0 = 1$). Далее мы увидим, что у цепочек, дающих максимальный вклад в неомическую проводимость, плотности $n_\alpha(\xi)$ существенно меняются в характерном интервале $|\xi - \xi_{om}| \approx \sqrt{eU/kT} \ll \xi_{om}$, так что ступеньки $n_\alpha^0 \Theta(\xi_{om} - \xi)$ оказываются размытыми. Поэтому мы будем искать вклад в ток от цепочек с заданными $n_\alpha(\xi)$ общего вида, а затем по $n_\alpha(\xi)$ осуществим оптимизацию.

Рассмотрим сначала цепочки с $\xi_i \leq \xi_m$ и заданным распределением мягких сопротивлений $n_1(\xi)$, у которых в неомическом режиме находятся только мягкие сопротивления. При заданном напряжении U текущий через такую цепочку ток неявно определяется условием $eU = \sum_{i=1}^N (u_i - u_{i+1})$. В случае $eU \gg kT$ в этой сумме можно оставить только слагаемые, соответствующие неомическим сопротивлениям, для которых $u_i - u_{i+1} \approx \mu_i - \mu_{i+1} = kT(\xi_i - \xi_I)$ (см. таблицу), и заменить сумму интегралом

$$eU = kT \int_{\xi_I}^{\xi_m} n_1(\xi) (\xi - \xi_I) d\xi. \quad (18)$$

Число интересующих нас цепочек равно

$$w\{n_1(\xi)\} = w_N(\xi_m) \exp \left\{ - \int_0^{\xi_m} \left[n_1^0 - n_1(\xi) \ln \left(\frac{en_1^0}{n_1(\xi)} \right) \right] d\xi \right\} P, \quad (19)$$

где $w_N(\xi_m)$ определяется (17), второй сомножитель описывает пуассоновскую вероятность реализации данного $n_1(\xi)$ (см., например, § 40 в [1]), а P — вероятность того, что в цепочке не встретилось ни одной жесткой пары с $\xi_i > \xi_I$, ни одной верхней с $\xi_i > \xi_I + \mu_i/kT$ и ни одной нижней с $\xi_i > \xi_I - \mu_i/kT$ (см. таблицу):

$$\begin{aligned} P = \exp \left[-n_1^0 (\xi_m - \xi_I) - \frac{n_2^0}{L} \int_0^L \left(\xi_m - \xi_I - \frac{u(x)}{kT} \right) dx - \frac{n_3^0}{L} \int_0^L \right. \\ \times \left. \left(\xi_m - \xi_I + \frac{\mu(x)}{kT} \right) dx \right] = \exp [-(1 - n_1^0)(\xi_m - \xi_I)] \end{aligned}$$

(здесь мы использовали то, что $n_2^0 = n_3^0$ и $\sum_\alpha n_\alpha^0 = 1$).

Если разложить логарифм выражения (17) в точке $\xi_m \approx \xi_I \approx \xi_{om}$ по малой разнице $\xi_m - \xi_I$ и воспользоваться тем, что $\xi_{om} = 3N$, то выражение для числа цепочек приобретает вид

$$w\{n_1(\xi)\} = w_N(\xi_I) \exp(S_1), \quad (20)$$

$$S_1 = n_1^0 (\xi_m - \xi_I) + \int_0^{\xi_m} \left[-n_1^0 + n_1(\xi) \ln \frac{en_1^0}{n_1(\xi)} \right] d\xi.$$

Полный ток $j\{n_1(\xi)\}$, обеспечиваемый цепочками с данным $n_1(\xi)$, имеет вид

$$j\{n_1(\xi)\} = e\gamma_0 \exp(-\xi_I) w\{n_1(\xi)\} = e\gamma_0 w_N(\xi_I) \exp(-\xi_I + S_1), \quad (21)$$

где ξ_I должно определяться из (18).

Функцию $n_1(\xi)$ следует искать из условия максимума $j\{n_1(\xi)\}$. Очевидно, что при $\xi < \xi_I$ оптимальная $n_1(\xi) = n_1^0$, при этом подынтегральная функция в (20) равна нулю и нижний предел интеграла можно заменить на ξ_I . Поэтому

$$S_1 = \int_{\xi_I}^{\xi_m} n_1(\xi) \ln \left(\frac{e n_1^0}{n_1(\xi)} \right) d\xi. \quad (22)$$

Варьируя выражение (22) при дополнительном условии (18), несложно показать, что максимальное значение S_1 равно

$$S_1^{\max} = 2 \sqrt{\frac{eU}{kT}} \equiv \eta_1 \sqrt{\frac{eU}{kT}}, \quad \eta_1 = 0.914 \quad (23)$$

и достигается при $\xi_m = \infty$ и $n_1(\xi) = n_1^0 \exp[-\sqrt{eU/kT}(\xi - \xi_I)]$. Оптимизация (21) по ξ_I и N дает $\xi_I = \xi_{\text{ок}}$, $N = N_{\text{ок}} = \sqrt{2L/a\lambda_t}$, где λ_t определяется (3), и мы приходим к формуле (7) с коэффициентом $\eta = \eta_1$.

Чтобы проверить справедливость сделанных выше предположений, найдем число мягких пар в одной цепочке, работающих в неомическом режиме: $M = \int_{\xi_I}^{\xi_m} n_1(\xi) d\xi = \sqrt{n_1^0 e U / k T}$. Видно, что в интересующем нас диапазоне напряжения $kT \ll eU \ll kTL/a\lambda_t = N^2 kT$ для величины M выполняется условие $1 \ll M \ll N$, как и предполагалось выше.

Таким образом, мы вычислили вклад в неомический ток от цепочек, у которых в неомическом режиме работают только мягкие пары. Переходим теперь к вычислению вклада в проводимость от цепочек, содержащих только верхние неомические пары. В этом случае зависимость химпотенциала μ от координаты x представляет собой пилообразную ломаную, изображенную на рис. 4. Ординаты вершин пилы равны $\xi_i - \xi_I$, так как, согласно таблице, этой величине равен химпотенциал слева от верхней неомической пары, справа он может быть произвольным, но меньшим, чем слева (значение потенциала справа определяется величиной ξ_i , следующей неомической пары). При этом тангенс угла наклона отрезков ломаной определяется приложенным напряжением $tg \alpha = eU/kT$, а величина ξ_I — условием $\mu(0) = \mu(L) = 0$.

Как и при вычислении вклада от мягких цепочек, будем предполагать, что плотность распределения величин ξ_i есть заданная функция $n_2(\xi)$. Количество цепочек с такой плотностью, у которых в неомическом режиме работают только верхние пары (т. е. отсутствуют мягкие и жесткие пары с $\xi_i > \xi_I$ и нижние с $\xi_i > \xi_I - \mu_i/kT$), вычисляется аналогично (20):

$$w\{n_2(\xi)\} = w_N(\xi_I) \exp(S_2),$$

$$S_2 = \int_0^{\xi_m} d\xi \left[-n_2^0 + n_2(\xi) \ln \left(\frac{e n_2^0}{n_2(\xi)} \right) \right] + \frac{n_2^0}{L} \int_0^L dx \left[\xi_m - \xi_I - \frac{\mu(x)}{kT} \right]. \quad (24)$$

Функция $\mu(x)$ определяется конкретными значениями ξ_i неомических пар и их расположением в цепочке, однако при интегрировании по x химпотенциал самоусредняется, поэтому S_2 в результате определяется только плотностью $n_2(\xi)$. Вычисление оптимального $n_2(\xi)$ вынесено в *Приложение 2*, где показано, что максимальное значение

$$S_2^{\max} = \eta_2 \sqrt{eU/kT}, \quad \eta_2 = 0.872. \quad (25)$$

В результате после оптимизации полного тока по ξ_I получаем, что вклад в ток от данного класса цепочек также имеет вид (7) с коэффициентом $\eta = \eta_2$. Очевидно,

видно, такой же вклад в полный ток дают цепочки, содержащие только нижние неомические пары.

Исследование более широкого класса цепочек, у которых в неомическом режиме работают и верхние, и нижние пары, не приводит к новым по сравнению с (25) результатам. Дело в том, что такая цепочка может состоять не более чем из двух блоков, причем левый должен состоять только из нижних неомических пар, а правый — из верхних. Попытка составить цепочку из большего числа блоков приводит к появлению более чем одного уравнения, связывающего U и ξ_i , которые в случайной цепочке не могут быть разрешены совместно.

В обоих рассмотренных выше случаях увеличение тока через пленку при приложении напряжения $U \gg kT/e$ можно интерпретировать как экспоненциальное увеличение числа цепочек, проводящих заданный ток I с $\xi_i = \xi_{\text{om}}$. Число таких цепочек для первого из рассмотренных типов цепочек было равно $w_N(\xi_i) \exp(S_1)$, а для второго — $w_N(\xi_i) \exp(S_2)$, что после замены ξ_i на ξ_{om} и приводило к полученным ответам. Сейчас мы покажем, как, пользуясь формулами (23) и (25) для S_1 и S_2 , найти число цепочек с данным ξ_i , не ограничивая себя рассмотрением цепочек, принадлежащих какому-либо выделенному классу.

Для этого мы из всех цепочек, на которых падает напряжение U , выделим класс цепочек, у которых сумма падений напряжения на мягких парах равна U_1 , а на всех остальных — $U_2 = U - U_1$. Сначала мы построим оптимальную цепочку при данных U_1 и U_2 , а потом проведем оптимизацию по отношению U_1/U_2 . Рассмотрим сперва цепочки с $\xi_i = \xi_{\text{om}}$, содержащие только мягкие неомические сопротивления, на которых падает суммарное напряжение U_1 : число таких цепочек определяется цепочками с плотностью $n_1(\xi)$, оптимальной при напряжении U_1 и найденной выше. Это число равно $w_N(\xi_i) \exp(\eta_1 \sqrt{eU/kT})$. Теперь добавим к каждой из таких цепочек, характеризующихся конкретной реализацией химпотенциала $\mu(x)$, верхние пары с $\xi_i > \xi_i + \mu(x)/kT$, которые до этого отсутствовали, так, чтобы на них падало суммарное напряжение U_2 . При вычислении числа образовавшихся цепочек мы оказываемся в ситуации, полностью аналогичной ситуации с цепочками, содержащими только верхние неомические пары: надо лишь в каждой точке x заменить ξ_i на $\xi_i + \mu(x)/kT$ и U на U_2 . Выигрыш в вероятности образования цепочки, очевидно, не может зависеть от того, в какой области значений ξ_i мы добавляем или убираем пары, поэтому увеличение числа цепочек за счет этого добавления определяется цепочками с таким же оптимальным распределением верхних пар, что и для «чисто верхних» цепочек, только это распределение в каждой точке x окажется сдвинутым на $\mu(x)/kT$. В результате мы получаем выигрыш в вероятности образования цепочки в $\exp(\eta_2 \sqrt{eU_2/kT})$ раз, так что полное число интересующих нас цепочек есть

$$w_N(\xi_i) \exp(\eta_1 \sqrt{eU_1/kT} + \eta_2 \sqrt{eU_2/kT}). \quad (26)$$

Оптимизация (26) по U_1/U_2 дает $U_1/U_2 = (\eta_1/\eta_2)^2$, что после подстановки в (26) приводит нас к формуле (7) с $\eta = \sqrt{\eta_1^2 + \eta_2^2} = 1.263$, что и является окончательным ответом.

Авторы благодарны А. С. Кюргяну за ценные замечания.

Приложение 1

В этом *Приложении* вычисляются коэффициент α_i^j для формулы (17) и величины n_a^i , приведенные в таблице. Введем функцию $f_i(\epsilon, z; \xi_m)$ такую, что $f_i(\epsilon, z; \xi_m) dz$ есть вероятность того, что, начав строить в произвольном месте пленки цепочку узлов от одной грани к другой, мы сумеем сделать i шагов в глубь пленки, ни разу не взяв пару с $\xi > \xi_m$, и что последний выбранный нами узел будет иметь энергию ϵ и координату $(iL/N) + z$.

Если контакт считать нулевым узлом, то $f_0(\epsilon, z, \xi_m) = \delta(\epsilon) \delta(z)$, а f_{i+1} , очевидно, выражается через f_i :

$$f_{i+1}(\varepsilon, z; \xi_m) = g_0 \int d\varepsilon' dz' d^2 \rho f_i(\varepsilon', z'; \xi_m) \Theta\left(\xi_m - \frac{2(z-z')}{a} - \frac{\Delta(\varepsilon, \varepsilon')}{kT} - \frac{N \rho^2}{La}\right) = \\ = \frac{\pi g_0 La}{N} \int d\varepsilon' dz' f_i(\varepsilon', z'; \xi_m) \chi_1\left(\xi_m - \frac{2(z-z')}{a} - \frac{\Delta(\varepsilon, \varepsilon')}{kT}\right), \quad (\text{II1. 1})$$

где ρ — смещение узла $i+1$ относительно узла i поперек пленки, $\Delta(\varepsilon, \varepsilon') \equiv \frac{1}{2}(|\varepsilon| + |\varepsilon'| + |\varepsilon - \varepsilon'|)$, $\chi_n(x) \equiv \frac{1}{n!} x^n \Theta(x)$ и использовано разложение (13). При помощи тождества

$$\int dz_1 \dots dz_i \prod_{j=1}^i \chi_1(b_j - z_j + z_{j+1}) = \chi_{2i+1}\left(\sum_{j=1}^i b_j - z_{i+1}\right), \quad (\text{II1. 2})$$

$$x^{2i+1} \Theta(x) = (2i+1) \int_0^\infty v^{2i} \Theta(x-v) dv$$

(II1. 1) преобразуется к виду

$$f_{i+1}(\varepsilon, z; \xi_m) = \left(\frac{\pi g_0 a^2 kT}{2N}\right)^i \frac{i^i}{(2i)!} \int_0^{i-2z/a} v^{2i} \left(i - \frac{2z}{a} - v\right)^i \varphi_{i+1}\left[\frac{i\varepsilon}{kT\xi_m(i-v)}\right] dv, \quad (\text{II1. 3})$$

где

$$\varphi_{i+1}(x_{i+1}) \equiv \int dx_1 \dots dx_i \Theta\left[i+1 - \sum_{j=1}^i \Delta(x_j, x_{j+1})\right].$$

Функции φ_i удовлетворяют рекуррентному соотношению

$$\varphi_{i+1}(x) = \int dx' \left[\frac{i+1-\Delta(x, x')}{i}\right]^{i+1} \varphi_i\left[x' \left(\frac{i+1-\Delta(x, x')}{i}\right)\right],$$

которое при больших i принимает вид

$$\varphi_{i+1}(x) \simeq \int dx' \exp[1 - \Delta(x, x')] \varphi_i(x'). \quad (\text{II1. 4})$$

Уравнение (II1. 4) было решено в [3], где показано, что

$$\varphi_i(x) = \left(\frac{4e}{\pi^2}\right)^i \Psi(x), \quad \Psi(x) = J_1\left[z \exp\left(-\frac{|x|}{2}\right)\right] \exp\left(-\frac{|x|}{2}\right), \quad (\text{II1. 5})$$

где J_1 — функция Бесселя, а $z = 1.8412$ — наименьший корень уравнения $J'_1(x) = 0$. Подставляя (II1. 5) в (II1. 3) и вычисляя интеграл по v методом перевала, получаем

$$f_i(\varepsilon, z; \xi_m) = \left(\frac{2\pi e^3 g_0 L a^2 kT}{27 \pi^2 N}\right)^i \Psi\left(\frac{\varepsilon}{3kT\xi_m}\right) \left(1 - \frac{2z}{ia\xi_m}\right)^i. \quad (\text{II1. 6})$$

Поскольку «узел» с номером $N+1$ является противоположным контактом и имеет $\varepsilon = 0$ и $z = 0$, то $w_N(\xi_m) \propto f_{N+1}(0, 0; \xi_m)$, откуда, сравнивая (17) и (II1. 6), находим $\mathcal{A} = 2\pi e^3 / 27 \pi^2$.

Рассмотрим теперь цепочку с $\xi_i < \xi_m$, идущую от контакта до контакта. Вероятность того, что находящаяся в середине такой цепочки пара с номером i образована узлами с данными энергиями $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ и имеет данное ξ , пропорциональна произведению вероятностей того, что узел i достичь от левого контакта, узел $i+1$ — от правого, и того, что величина ξ_i лежит в требуемых пределах

$$\rho_i(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \xi) \propto \int dz_1 dz_2 d^2 \rho f_i(\varepsilon_1, z_1; \xi_m) f_{N-i}(\varepsilon_2, -z_2; \xi_m) \times \\ \times \delta\left(\xi - \frac{2(z_2 - z_1)}{a} - \frac{N \rho^2}{La} - \frac{\Delta(\varepsilon_1, \varepsilon_2)}{kT}\right), \quad (\text{II1. 7})$$

(II1. 7) легко вычисляется и нормируется, и мы получаем

$$\rho_i(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \xi) = \rho_\varepsilon(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \rho_\xi(\xi), \quad (\text{II1. 8})$$

$$\rho_{\xi}(\xi) = (3/\xi_m) \exp [3(\xi - \xi_m)/\xi_m], \quad (\text{П1.9})$$

$$\rho_{\epsilon}(\epsilon_1, \epsilon_2) = \frac{9x^2}{8(x^2 - 1)[J_0(x)\xi_m kT]^2} \Psi\left(\frac{3\epsilon_1}{\xi_m kT}\right) \Psi\left(\frac{3\epsilon_2}{\xi_m kT}\right) \exp\left(-\frac{3\Delta(\epsilon_1, \epsilon_2)}{\xi_m kT}\right), \quad (\text{П1.10})$$

после чего несложно вычислить плотности $n_{\alpha}(\xi)$ [например, $n_2(\xi) = N\rho_{\xi}(\xi) \int d\epsilon_1 \times \times d\epsilon_2 \Theta(\epsilon_1) \Theta(\epsilon_2) \rho_{\epsilon}(\epsilon_1, \epsilon_2)$]. Окончательный ответ при $\xi_m = 3N$ гласит

$$n_{\alpha}(\xi) = n_{\alpha}^0 \exp[(\xi - \xi_m)/N], \quad (\text{П1.11})$$

$$n_1^0 = n_3^0 = [2(x^2 - 1)]^{-1} = 0.209, \quad n_2^0 = n_3^0 = 0.5 - n_1^0 = 0.291. \quad (\text{П1.12})$$

Приложение 2

Целью настоящего Приложения является выражение S_2 [формула (24)] через $n_2(\xi)$ с последующей оптимизацией по $n_2(\xi)$. Отметим прежде всего, что второй член в (24) имеет простой геометрический смысл: с точностью до множителя n_2^0/L это площадь фигуры, ограниченной «пилой» $\xi_i + \mu(x)/kT$ и прямой $\xi = \xi_m$. Пусть x_i — абсцисса вершины i ломаной, отсчитанная от вершины $i-1$, а $y_i = \xi_m - \xi_i$ — ее ордината (рис. 4). Тогда (24) можно переписать в виде

$$S_2 = \left\{ \int_0^{\infty} dy \left[\frac{n_2(y)}{n_2^0} \ln \left(\frac{en_2^0}{n_2(y)} \right) - 1 \right] + \frac{\langle A_i \rangle}{\langle x_i \rangle} \right\} n_2^0, \quad (\text{П2.1})$$

где A_i — площадь, приходящаяся на зубец пилы i (заштриховано на рис. 4) и равная

$$A_i = [(x_i \tan \alpha + y_i)^2 - y_{i-1}^2]/(2 \tan \alpha), \quad (\text{П2.2})$$

а $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по i . Для дальнейших вычислений удобно ввести безразмерные координаты $u_i = x_i(n_2^0 \tan \alpha/L)^{1/2}$, $v_i = y_i(n_2^0 \cot \alpha/L)^{1/2}$ и функцию $\tilde{n}(\cdot) = n_2(\xi)/n_2^0$. В новых обозначениях выражение для A_i принимает вид

$$A_i \equiv A(u_i, v_i | v_{i-1}) = \frac{L}{2n_2^0} [(u_i + v_i)^2 - v_{i-1}^2]. \quad (\text{П2.3})$$

Введем условную плотность распределения координат вершины i $u_i = u$ и $v_i = v$ при заданном значении ординаты вершины $i-1$, равном v' . Эта плотность пропорциональна вероятности того, что в пределах зубца не найдется ни одной точки, и равна

$$\rho(u, v | v') = \tilde{n}(v) \Theta(u + v - v') \exp[-\mathcal{F}(u + v) + \mathcal{F}(v')], \quad (\text{П2.4})$$

$$\mathcal{F}(v) = \int_0^v dv_1 (v - v_1) \tilde{n}(v_1). \quad (\text{П2.5})$$

Плотность распределения ординаты узла i $\psi_i(v_i)$ при больших i не зависит от i , так что мы можем написать для нее следующее уравнение:

$$\psi(v) = \int_0^{\infty} du \int_0^{\infty} dv' \psi(v') \rho(u, v | v'). \quad (\text{П2.6})$$

Легко убедиться, используя непосредственную подстановку, что решением уравнения (П2.6) является

$$\psi(v) = B \tilde{n}(v) \exp[-\mathcal{F}(v)], \quad (\text{П2.7})$$

где B — нормировочная константа. Найденные функции ρ и ψ позволяют произвести усреднение величины A_i (П2.3):

$$\langle A_i \rangle = \int_0^{\infty} du \int_0^{\infty} dv \int_0^{\infty} dv' \rho(u, v | v') \psi(v') A(u, v | v'). \quad (\text{П2.8})$$

Аналогично для среднего значения $x_i = u_i (n_2^0 \operatorname{tg} \alpha / L)^{-1/2}$ имеем

$$\langle x_i \rangle = \sqrt{\frac{n_2 \operatorname{tg} \alpha}{L}} \int_0^\infty du \int_0^\infty dv \int_0^\infty dv' \rho(u, v | v') \psi(v') u. \quad (\text{П2.9})$$

Интеграл в (П2.8) упрощается, а интеграл в (П2.9) берется в общем виде с помощью замены переменных $u_1 = u + v$, $v_1 = v$ и последовательного интегрирования по частям [с использованием соотношения $\mathcal{F}'(v) = \int_0^v \tilde{n}(v_1) dv_1$]. В результате имеем

$$\langle A_i \rangle = \frac{BL}{n_2^0} \int_0^\infty dv \exp[-\mathcal{F}(v)], \quad \langle x_i \rangle = B \sqrt{\frac{L}{n_2^0 \operatorname{tg} \alpha}}. \quad (\text{П2.10})$$

Подставляя (П2.10) в (П2.1) и переписывая (П2.1) в новых обозначениях, для S_2 получаем

$$S_2 = \sqrt{n_2^0 L \operatorname{tg} \alpha} \int_0^\infty dv \left\{ \exp[-\mathcal{F}(v)] + \tilde{n}(v) \ln \left(\frac{e}{\tilde{n}(v)} \right) - 1 \right\}, \quad (\text{П2.11})$$

где $\mathcal{F}(v)$ выражается через $\tilde{n}(v)$ в соответствии с (П2.5). Оптимизация выражения (П2.11) по функции $\tilde{n}(v)$ производилась численно. При этом максимальное значение интеграла в (П2.11) оказывается равным 1.616, что после подстановки выражения для $\operatorname{tg} \alpha$ и значения n_2^0 в (П2.11) приводит нас к формуле (25).

Л и т е р а т у р а

- [1] Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М., 1979. 416 с.
- [2] Pollak M., Hauser J. J. — Phys. Rev. Lett., 1973, v. 31, N 21, p. 1304—1307.
- [3] Тартаковский А. М., Фистуль М. В., Райх М. Э., Рузин И. М. — ФТП, 1987, т. 21, в. 4, с. 603—608.
- [4] Шкловский Б. И. — ФТП, 1972, т. 6, в. 12, с. 2335—2340.
- [5] Шкловский Б. И. — ФТП, 1976, т. 10, в. 8, с. 1440—1448.
- [6] Pollak M., Ries I. — J. Phys. C, 1976, v. 9, N 12, p. 2339—2352.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Получена 18.06.1987
Принята к печати 8.09.1987