Равновесное энергетическое распределение локализованных носителей заряда в неупорядоченных полупроводниках при низких температурах в присутствии внешнего электрического поля

© Д.В. Николаенков, В.И. Архипов, В.Р. Никитенко

Московский инженерно-физический институт,
115409 Москва, Россия

(Получена 23 декабря 1999 г. Принята к печати 28 декабря 1999 г.)

Показано, что в неупорядоченных полупроводниках, характеризующихся достаточно быстро убывающей энергетической плотностью локализованных состояний, при низких температурах, когда можно пренебречь вкладом термоактивированных прыжков носителей заряда в процесс прыжкового транспорта, в трехмерном случае может существовать равновесное энергетическое распределение носителей заряда. Асимптотика этого распределения является больцмановской экспонентой с некоторой эффективной температурой, зависящей от напряженности электрического поля.

Процессы транспорта носителей в аморфных полупроводниках, в которых проводимость осуществляется по делокализованным состояниям, были успешно описаны моделью многократного захвата [1–3], которая предполагала существование в материале двух фракций носителей, находящихся в данный момент времени на делокализованных и локализованных состояниях соответственно. Однако в тех материалах, в которых все энергетические состояния носителей заряда локализованы, например в большинстве полимеров, процесс переноса носителей является прыжковым. Много интересных и важных черт прыжкового транспорта неупорядоченных полупроводников было экспериментально обнаружено в достаточно сильных электрических полях [4–6]. Как аналитически [7–10], так и моделированием по методу Монте-Карло [11,12], было показано, что распределение локализованных носителей по энергии и подвижность носителей в неупорядоченном полупроводнике могут быть описаны как обычной температурой T, так и некоторой эффективной температурой $T_F(F)$, зависящей от величины приложенного внешнего электрического поля F. Аналитические вычисления этой эффективной температуры [7,9] дают

$$T_F = \frac{eF}{2\gamma k}, \qquad (1)$$

в то время как численное моделирование приводит к

$$T_F = 0.67\frac{eF}{\gamma k}$$

(см. [11]) или

$$T_F = (0.69 \pm 0.03)\frac{eF}{\gamma k}$$

(см. [12]), где e — элементарный заряд, γ — обратный радиус локализации, k — постоянная Больцмана. В работе [9] в одномерном случае, что в действительности соответствует сильным электрическим полям, было найдено равновесное энергетическое распределение инжектированных носителей заряда в аморфном полупроводнике, находящемся во внешнем электрическом поле, при низких температурах, когда вклад термоактивированных прыжков в процесс транспорта носителей заряда пренебрежимо мал. В данной же статье мы показываем, что и в трехмерном случае в области низких температур во внешнем электрическом поле может существовать равновесное энергетическое распределение локализованных носителей заряда и что такое распределение описывается больцмановской экспонентой с эффективной температурой (1).

В качестве уравнения, описывающего кинетику прыжкового транспорта, использовано хорошо известное уравнение баланса,

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \sum_{j\neq j} \nu_{ji} f_j - f_i \sum_{j\neq j} \nu_{ij}, \qquad (2)$$

написанное для случая слабой заселенности локализованных состояний, $f_i \ll 1$. Здесь f_i — среднее число заполнения состояния i, ν_{ij} — вероятность перехода из состояния i в состояние j. Сделаем предположение, что в квазиравновесном режиме переноса, при котором функция плотности состояний не зависит от времени, большое число носителей может избежать маловероятных прыжков с очень большим временем ожидания $t_R \gg \hbar/\Delta E$ ($\hbar$ — постоянная Планка, ΔE — характерное изменение энергии при переходе носителя с одного локализованного состояния на другое), т. е. избежать тех прыжков, которые не дают существенного вклада в процесс транспорта [13]. Такое допущение дает нам возможность воспользоваться понятием усредненной функции распределения $f(\mathbf{r}, E, t)$ относительно непрерывных переменных: энергии E (более "глубокие" состояния имеют бóльшее значение энергии E) и радиус-вектора $\mathbf{r}$. Используем выражение для частоты переходов в форме Миллера–Абрахамса

$$\nu(|\Delta\mathbf{r}|, R) = \nu_0 \exp\left[-2\gamma|\Delta\mathbf{r}| - H(\mathcal{E})\frac{\mathcal{E}}{kT}\right], \qquad (3)$$

где $\mathcal{E} \equiv E - e\mathbf{F}\Delta\mathbf{r} - E'$, $H(\mathcal{E})$ — функция Хевисайда, ν_0 — характерная частота туннельных прыжков носителей, а $\Delta\mathbf{r} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$. В результате мы из уравнения (2) получаем следующее кинетическое уравнение для функции распределения f:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r},E,t)}{\partial t} = \nu_0 \int d\mathbf{r}' \exp(-2\gamma|\Delta\mathbf{r}|)\Bigg[\int\limits_{-\infty}^{E-e\mathbf{F}\Delta\mathbf{r}} dE' f(\mathbf{r},E',t)$$
$$+ \int\limits_{E-e\mathbf{F}\Delta\mathbf{r}}^{\infty} dE' \exp\left(\frac{E-e\mathbf{F}\Delta\mathbf{r}-E'}{kT}\right) f(\mathbf{r}',E',t)\Bigg] g(E)$$
$$-\nu_0 \int d\mathbf{r}' \exp(-2\gamma|\Delta\mathbf{r}|)\Bigg\{\int\limits_{E-e\mathbf{F}\Delta\mathbf{r}}^{\infty} dE' g(E')$$
$$+ \int\limits_{-\infty}^{E-e\mathbf{F}\Delta\mathbf{r}} dE' \exp\left[\frac{-(E-e\mathbf{F}\Delta\mathbf{r}-E')}{kT}\right] g(E')\Bigg\} f(\mathbf{r},E,t), \tag{4}$$

которая нормирована условием

$$\int d\mathbf{r} \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{r},E,t)dE = 1, \tag{5}$$

где t — время, $g(E)$ — функция распределения локализованных состояний по энергии, нормированная условием

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} g(E)dE = 1. \tag{6}$$

Начало отсчета энергии $E = 0$ соответствует максимуму функции $g(E)$. Уравнение (4) написано в предположении, что местоположение и энергия локализованных состояний не коррелируют, что соответствует полностью неупорядоченным материалам.

Кинетическое уравнение (4) для усредненной по пространственным координатам равновесной функции распределения

$$f_{\text{eq}}(E) = \int f(\mathbf{r},E,\infty)d\mathbf{r} \tag{7}$$

при низких температурах, когда можно пренебречь вкладом термоактивированных прыжков при условии гипотетического равновесия, принимает вид

$$0 = \nu_0 \int d\mathbf{r}' \exp(-2\gamma|\Delta\mathbf{r}|) \int\limits_{-\infty}^{E-e\mathbf{F}\Delta\mathbf{r}} dE' f_{\text{eq}}(E') g(E)$$
$$-\nu_0 \int d\mathbf{r}' \exp(-2\gamma|\Delta\mathbf{r}|) \int\limits_{E-e\mathbf{F}\Delta\mathbf{r}}^{\infty} dE' g(E') f_{\text{eq}}(E). \tag{8}$$

Из уравнения (8) с учетом (5) и (6) получаем следующее интегральное уравнение:

$$f_{\text{eq}}(\varepsilon) = \frac{g(\varepsilon)\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' A(\varepsilon,\varepsilon') f_{\text{eq}}(\varepsilon')}{4 - \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' A(\varepsilon,\varepsilon') g(\varepsilon')}. \tag{9}$$

Здесь введено интегральное ядро

$$A(\varepsilon,\varepsilon') = 4H(\varepsilon-\varepsilon') - (2+|\varepsilon-\varepsilon'|)e^{-|\varepsilon-\varepsilon'|} \tag{10}$$

и безразмерные переменные $\varepsilon = E/kT_F$ и $\varepsilon' = E'/kT_F$, где T_F — эффективная температура, определяемая формулой (1). Появление этой эффективной температуры связано с тем, что в ходе переноса электрическое поле "забрасывает" носители в состояния, лежащие выше по энергии, подобно термодинамическим эффектам, описываемым обычной температурой T.

Это уравнение решается методом итераций и в качестве первого приближения используем функцию плотности локализованных состояний

$$f_{\text{eq}}^{(0)}(E) = g(E). \tag{11}$$

Подставляя (11) в (9), получаем, что

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' A(\varepsilon,\varepsilon') g(\varepsilon')$$
$$\approx \begin{cases} \exp(E/kT_F)/E, & E \gg E_0 + E_m(T_F); \\ 1, & E \ll -E_0 - E_m(T_F). \end{cases} \tag{12}$$

Здесь величина $E_m(T_F)$ зависит от конкретного вида функции плотности состояний $g(E)$. В частности, в случае гауссовского распределения

$$g(E) = g_0 \exp\left[-(E/E_0)^2\right]$$

имеем $E_m(T_F) = E_0^2/2T_F$, а в случае экспоненциального распределения

$$g(E) = g_0 \exp(-|E/E_0|)$$

получаем $E_m(T_F) = E_0^2/(T_F - E_0)$. Таким образом,

$$f_{\text{eq}}^{(1)} \approx |E|^{-\text{sign}(E)} g(E) \exp\left(\frac{E}{kT_F}\right),$$
$$|E| \gg E_0 + E_m(T_F). \tag{13}$$

Итак, в первом приближении мы получили, что равновесное энергетическое распределение описывается больцмановской функцией.

Чтобы вычислить функцию распределения $f_{\text{eq}}(E)$ точнее, подставим в правую часть уравнения (9), согласно (13), функцию $g(E)\exp(E/kT_F)$. Полученное решение $f_{\text{eq}}^{(2)}(E)$ имеет такую же асимптотику, что и функция $f_{\text{eq}}^{(1)}(E)$, так как асимптотика (12) функции $\int d\varepsilon' A(\varepsilon,\varepsilon')g(\varepsilon')$, входящей в уравнение (9), не изменилась. Таким образом, если функция плотности локализованных состояний $g(E)$ является достаточно "мелкой", чтобы мог установиться равновесный режим

$$Eg(E)\exp\left(\frac{E}{kT_F}\right) \to 0, \quad |E| \to \infty, \tag{14}$$

то асимптотикой функции заселенности локализованных состояний $\varphi(E) = f(E)/g(E)$ является экспонента $\exp(E/kT_F)$. Величина $E_m(T_F)$, входящая в формулы (12) и (13), является характерным значением энергии максимума функции распределения $f_{\text{eq}}(E)$.

Итак, мы показали, что в трехмерном случае, как и в одномерном [9], пространственно однородное равновесное энергетическое распределение локализованных носителей заряда может, во-первых, иметь место даже в предельном случае $T \to 0$, когда можно полностью пренебречь вкладом термоактивированных прыжков в кинетическое уравнение (4), и, во-вторых, это распределение может быть аппроксимировано больцмановской функцией распределения с эффективной температурой (1) вместо обычной температуры. Заметим, что вид этой эффективной температуры совпадает с предыдущими аналитическими оценками [9,10].

Список литературы

[1] A.I. Rudenko, V.I. Arkhipov. Phil. Mag. B, **45**, 177 (1982).
[2] A.I. Rudenko, V.I. Arkhipov. Phil. Mag. B, **45**, 189 (1982).
[3] В.И. Архипов, А.И. Руденко, А.М. Андриеш, М.С. Иову, С.Д. Шутов. *Нестационарные инжекционные токи в неупорядоченных твердых телах* (Кишинев, Штиинца, 1993).
[4] L.B. Schein. Phil. Mag. B, **65**, 795 (1992).
[5] H. Bässler. Phys. St. Sol. (*b*), **175**, 15 (1993).
[6] C.E. Nebel, R.A. Street. Int. J. Mod. Phys. B, **7**, 1207 (1993).
[7] B.I. Shklovskii, E.I. Levin, H. Fritzsche, S. Baranovskii. *Advances in Disordered Semiconductors*, ed. by H. Fritzsche (World Scientific, Singapore, 1990) v. 1, p. 161.
[8] V.I. Arkhipov, H. Bässler. Phil. Mag. Lett., **67**, 343 (1993).
[9] V.I. Arkhipov, H. Bässler. Phil. Mag. Lett., **69**, 241 (1994).
[10] V.I. Arkhipov, H. Bässler. Phil. Mag. B, **68**, 425 (1993).
[11] S. Marianer, B.I. Shklovskii. Phys. Rev. B, **46**, 13 100 (1992).
[12] S.D. Baranovskii, B. Cleve, R. Hess, R. Schumacher, P. Thomas. J. Non.-Cryst. Sol., **164–166**, 437 (1993).
[13] M. Pollak. Phil. Mag. **36**, 1157 (1977).

Редактор Т.А. Полянская

Field dependent equilibrium energetic distribution of localized charge carriers in disordered semiconductors at low temperatures

D.V. Nikolaenkov, V.I. Arkhipov, V.R. Nikitenko

Moscow Engineering Physics Institute,
115409 Moscow, Russia

Abstract The hopping transport of charge carriers in three dimensional disordered semiconductors is analyzed in this work. It is assumed that the density of localized states in a decreasing function of the energy while the contribution of termoactivated jumps into the transport is negligible. The possibility of equilibrium energetic dictribution for this case is shown. This distribution is characterized by a field dependent effective temperature.