

03,08

Особенности поведения высокочастотной проводимости неупорядоченных полупроводников с ростом температуры

© М.А. Ормонт, Н.В. Валенко

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
Москва, Россия

E-mail: ormont.73@mail.ru

Поступила в Редакцию 2 июня 2023 г.

В окончательной редакции 2 июня 2023 г.

Принята к публикации 3 июня 2023 г.

Исследованы особенности поведения высокочастотной проводимости неупорядоченных полупроводников с ростом температуры, связанные с прыжковым транспортом электронов по примесной зоне. В рамках парного приближения показано, что наблюдаемый при низких температурах ($T \approx 1$ К) в терагерцовом диапазоне частот переход от почти линейной к квадратичной частотной зависимости вещественной части проводимости с ростом температуры может сохраняться и обуславливаться переходом от релаксационной проводимости с переменной (зависящей от частоты) длиной прыжка к бесфононной проводимости с постоянной длиной прыжка с ростом частоты.

Ключевые слова: прыжковая проводимость, универсальность частотной зависимости проводимости, бесфононная проводимость.

DOI: 10.21883/FTT.2023.07.55852.98

1. Введение

Как известно, степенная частотная зависимость проводимости $\sigma(\omega) \propto \omega^s$ (s — постоянная; как правило, $0.5 < s < 1$) хорошо описывает $\sigma(\omega)$ неупорядоченных полупроводников в широком диапазоне частот (см., например, [1,2]). Вместе с тем, примером отклонения от универсальной степенной частотной зависимости проводимости является наблюдавшийся в Si:P, Si:B при низких температурах ($T \approx 1$ К) в терагерцовой области частот переход (кроссовер) от почти линейной к квадратичной частотной зависимости вещественной части проводимости [3–5]. Исследование указанного отклонения частотной зависимости проводимости от универсальности ($s \approx 1$) позволяет получить информацию об особенностях механизма переноса носителей заряда в неупорядоченных полупроводниках.

Степенная частотная зависимость проводимости $\sigma(\omega) \propto \omega^s$ в случае неупорядоченных полупроводников связывается с прыжковым транспортом электронов по локализованным состояниям примесной зоны. Согласно [6], выражение для вещественной части низкотемпературной высокочастотной релаксационной проводимости (проводимости с участием фононов) имеет вид

$$\sigma_1^{\text{rel}}(\omega) = \frac{\pi^2 e^4 g_{\text{F}}^2 a}{6\kappa} \bar{r}_\omega^3 \omega, \quad (1)$$

здесь $e^2/(\kappa \bar{r}_\omega) > k_{\text{B}}T$, $\bar{r}_\omega = (a/2) \ln(\omega_{\text{ph}}/\omega)$ — характерная длина прыжка при релаксационной проводимости на частоте ω , a — радиус локализации состояний, κ — диэлектрическая проницаемость среды, g_{F} — плотность локализованных состояний на уровне Ферми, ω_{ph} —

характерная фононная частота (для Si:P, например, $\omega_{\text{ph}}/(2\pi) \approx 10^{13}$ Hz).

Для вещественной части низкотемпературной бесфононной (резонансной) проводимости в области частот, при которых энергия кулоновского взаимодействия между электронами внутри активных пар центров $U(r_\omega) = e^2/(\kappa r_\omega)$ превышает энергию $\hbar\omega$, теория [7,8] дает сублинейную ($s < 1$) частотную зависимость вида (1):

$$\sigma_1^{\text{res}}(\omega) = \frac{\pi^2 e^4 a g_{\text{F}}^2}{3\kappa} r_\omega^3 \omega, \quad (2)$$

где $e^2/(\kappa r_\omega) > \hbar\omega > k_{\text{B}}T$, $r_\omega = a \ln(\omega_{\text{c}}/\omega)$ — характерная длина прыжка при бесфононной проводимости на частоте ω , $\omega_{\text{c}} = 2I_0/\hbar$ — критическая частота, при которой характерная длина прыжка становится порядка радиуса локализации состояний a , $I_0 \approx e^2/(\kappa a)$ — предэкспоненциальный множитель в резонансном интеграле $I_{\lambda\lambda'} = I_0 \exp(-r_{\lambda\lambda'}/a)$, $\hbar\omega = 2I_{\lambda\lambda'}(r_\omega)$, $r_{\lambda\lambda'}$ — межцентровое расстояние в паре. С ростом частоты бесфононный вклад в проводимость начинает преобладать над релаксационным вкладом. Теория бесфононной проводимости [7,8] предсказывает кроссовер с ростом частоты от почти линейной частотной зависимости вещественной части проводимости (2) ($s \approx 1$ [7,8]) к зависимости, близкой к квадратичной ($s \approx 2$ [9]),

$$\sigma_1^{\text{res}}(\omega) = \frac{\pi^2 e^2 a g_{\text{F}}^2 \hbar}{3} r_\omega^4 \omega^2, \quad (3)$$

в области частот порядка некоторой ω_{cr} , при которых энергия $\hbar\omega$ становится сравнима с энергией кулоновского взаимодействия между электронами внутри резонанс-

ных пар $U(r_\omega) = e^2/(kr_\omega)$ [7,8],

$$\sigma_1^{\text{res}}(\omega) = \frac{\pi^2 e^2 a g_F^2}{3} r_\omega^4 \omega (\hbar\omega + U(r_\omega)). \quad (4)$$

Область применимости выражений (2)–(4) ограничивается сверху критической частотой ω_c (для Si:P $\omega_c/(2\pi) \approx 10^{13}$ Hz).

Выражения для вкладов в проводимость (1)–(3) с точностью до логарифмических поправок отвечают линейной и квадратичной частотным зависимостям. С ростом частоты характерная длина прыжка \bar{r}_ω , r_ω уменьшается; при этом функции $r_\omega^n \omega^m$ и $\bar{r}_\omega^n \omega^m \propto \omega^m \ln^n(\omega_{c,\text{ph}}/\omega)$, фигурирующие в выражениях для проводимости, являются немонотонными функциями частоты, достигающими максимума при $\omega_{\text{max}} = \omega_{c,\text{ph}} \exp(-n/m)$. Их можно аппроксимировать при $\omega \ll \omega_{c,\text{ph}}$ степенным законом $A\omega^s$ с уменьшающимся с ростом частоты показателем степени [10]:

$$s(\omega) = \frac{d \ln \sigma(\omega)}{d \ln \omega} = m - \frac{n}{\ln(\omega_{c,\text{ph}}/\omega)}. \quad (5)$$

Однако, как было показано в [11], в рамках представлений о переменной длине прыжка r_ω , зависящей от частоты, теория резонансной проводимости при типичных значениях параметров не описывает поведение низкотемпературной проводимости неупорядоченных полупроводников в области перехода от почти линейной к квадратичной частотной зависимости. Проведенный в [11] расчет показал, что в силу частотной зависимости характерной длины прыжка r_ω при типичных для мелких примесей значениях параметров частотная зависимость $\sigma_1^{\text{res}}(\omega)$ немонотонна, причем вплоть до частоты, отвечающей максимуму $\sigma_1^{\text{res}}(\omega)$, кулоновское взаимодействие между электронами активных пар играет основную роль, $\hbar\omega < e^2/(kr_\omega)$, и частотная зависимость $\sigma_1^{\text{res}}(\omega)$ остается близкой к линейной. Отметим, что суперпозиция релаксационного вклада в проводимость (1) и бесфононного вклада (3), $\sigma_1(\omega) = \sigma_1^{\text{res}}(\omega) + \sigma_1^{\text{rel}}(\omega)$, также не описывает переход частотной зависимости проводимости от линейной к квадратичной с ростом частоты.

Проведенный в [12] в парном приближении расчет вещественной части низкотемпературной проводимости показал, что наблюдаемый переход от почти линейной к квадратичной частотной зависимости проводимости в терагерцовом диапазоне частот может быть связан с переходом от проводимости с переменной длиной прыжка r_ω к проводимости с постоянной оптимальной длиной прыжка r_{opt} с ростом частоты. Согласно [12], при высоких частотах, когда эффекты гибридизации незначительны, основной вклад в проводимость вносят электронные переходы внутри пар с межцентровыми расстояниями порядка r_{opt} . Не зависящая от частоты и определяемая параметрами системы оптимальная длина прыжка r_{opt} обуславливает монотонный характер

частотной зависимости вещественной части проводимости в области кроссовера,

$$\sigma_1^{\text{res}}(\omega) = \frac{\pi^2}{3} C_1 e^2 \rho_0^2 a^5 \omega (\hbar\omega + U(r_{\text{opt}})), \quad (6)$$

где $U(r_{\text{opt}}) = e^2/(kr_{\text{opt}})$, $r_{\text{opt}} \approx 3.5a$ — оптимальная длина прыжка, ρ_0 — плотность состояний, считаемая постоянной, C_1 — численный коэффициент. Согласно [12], переход к режиму проводимости с постоянной длиной прыжка r_{opt} происходит при $r_\omega \approx r_{\text{opt}}$ ($\omega_{\text{opt}} \approx 0.05\omega_c$); при этом частота ω_{opt} порядка частоты кроссовера $\omega_{\text{cr}} \approx 0.1\omega_c$, $\hbar\omega_{\text{cr}} \approx e^2/(kr_{\text{opt}})$. В области частот $\omega > \omega_{\text{opt}}$ ($r_\omega < r_{\text{opt}}$) основной вклад в проводимость вносят электронные переходы внутри пар с межцентровыми расстояниями $r_{\lambda\lambda'} \approx r_{\text{opt}}$; при этом частотная зависимость проводимости принимает вид

$$\sigma_1^{\text{res}}(\omega) = \frac{\pi^2}{3} C_1 e^2 \rho_0^2 a^5 \hbar\omega^2. \quad (7)$$

Результаты расчета частотной зависимости низкотемпературной бесфононной проводимости в области высоких частот (7), когда оптимальная длина прыжка r_{opt} не зависит от частоты, согласуются с результатами расчета низкотемпературной бесфононной проводимости, полученными с использованием представлений о самосогласованных энергиях ($\hbar\omega > e^2/(kr_{\text{opt}})$) [13]. Оптимальная длина прыжка r_{opt} отвечает переходам вне кулоновской щели в одночастичной плотности состояний; при этом в переходной области частот эффекты кулоновской щели не сказываются существенным образом на частотной зависимости проводимости.

Выше мы рассмотрели особенности поведения частотной зависимости вещественной части проводимости неупорядоченных полупроводников в области перехода от почти линейной к квадратичной зависимости при температурах, близких к абсолютному нулю ($e^2/(kr_\omega)$, $\hbar\omega > k_B T$).

Согласно [14], с ростом температуры, $k_B T > e^2/(kr_\omega)$, частотная зависимость вещественной части релаксационной проводимости меняется незначительно по сравнению с (1):

$$\sigma_1^{\text{rel}}(\omega) = \frac{\pi^4 e^2 \rho_0^2 a}{24} k_B T \bar{r}_\omega^4 \omega; \quad (8)$$

при этом выражение для бесфононной проводимости в условиях $k_B T > \hbar\omega$, $e^2/(kr_\omega)$ принимает вид (3) [10]. Соответственно, решение задачи о высокочастотной бесфононной проводимости при температурах $k_B T > \hbar\omega$, $e^2/(kr_\omega)$ дает то же выражение, что и в случае низких температур в области больших частот, $\hbar\omega > U(r_\omega) > k_B T$, когда кулоновским взаимодействием между электронами в резонансных парах можно пренебречь.

Отметим, что переход от релаксационной проводимости (8) к бесфононной проводимости, даваемой выражением (3), с ростом частоты не приводит

к кроссоверу от сублинейной к квадратичной частотной зависимости вещественной части проводимости, $\sigma_1(\omega) = \sigma_1^{\text{res}}(\omega) + \sigma_1^{\text{rel}}(\omega)$; это обусловлено частотной зависимостью характерной длины прыжка r_ω , приводящей к уменьшению показателя степени $s(\omega)$ (5), отвечающего выражению (3), с ростом частоты. Численный расчет бесфононной проводимости в парном приближении, проведенный в [11], показал, что частотная зависимость низкотемпературной бесфононной проводимости $\sigma_1^{\text{res}}(\omega)$ без учета кулоновского взаимодействия электронов, попадающих на изолированные пары центров, является немонотонной. Максимум $\sigma_1^{\text{res}}(\omega)$ находится в области применимости теории [7], $r_\omega > a$; при этом с ростом частоты проводимость выходит на насыщение.

Вместе с тем, согласно [12] в условиях низких температур в области высоких частот ($\omega > \omega_{\text{opt}} \approx \omega_{\text{cr}}$), когда кулоновским взаимодействием между электронами в резонансных парах можно пренебречь, $\hbar\omega > U(r_{\text{opt}})$, происходит переход к режиму проводимости с постоянной длиной прыжка; при этом проводимость имеет квадратичную частотную зависимость (7). Переход от релаксационной проводимости (8) к бесфононной проводимости, даваемой выражением (7), с ростом частоты может приводить к кроссоверу от сублинейной к квадратичной частотной зависимости вещественной части проводимости. Соответственно в этом случае кроссовер частотной зависимости вещественной части проводимости с ростом температуры может сохраняться и обуславливаться переходом от релаксационной проводимости с переменной, зависящей от частоты, длиной прыжка к бесфононной проводимости с постоянной длиной прыжка.

Цель настоящей работы состояла в установлении особенностей поведения высокочастотной проводимости неупорядоченных полупроводников в переходной области частот с ростом температуры, что включало непосредственный расчет в парном приближении частотной зависимости вещественной части бесфононной проводимости в переходной области частот при температурах $k_B T > \hbar\omega$, $e^2/(kr_{\text{opt}})$. Ограничение на рассматриваемые температуры сверху обусловлено переходом к зонному транспорту носителей заряда.

2. Расчет бесфононной проводимости в переходной области частот в условиях $k_B T > \hbar\omega$, $e^2/(kr_{\text{opt}})$

Согласно [12], матричные элементы, фигурирующие в выражении для бесфононной проводимости в парном приближении [15]:

$$\sigma_1^{\text{res}}(\omega) = \frac{\pi e^2 \omega}{V_0} \sum_{\{\lambda, \lambda'\}, \lambda \neq \lambda'} |\langle \Psi_{\lambda\lambda'}^- | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \psi_{\lambda\lambda'}^+ \rangle|^2 \times (n_F(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-) - n_F(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+)) \delta(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- - \varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ + \hbar\omega), \quad (9)$$

в случае водородоподобных примесных центров равны

$$\langle \Psi_{\lambda\lambda'}^- | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \Psi_{\lambda\lambda'}^+ \rangle = (\mathbf{n}, \mathbf{r}_{\lambda\lambda'}) \frac{I_{\lambda\lambda'}}{\Gamma_{\lambda\lambda'}} + \frac{(\varepsilon_\lambda^0 - \varepsilon_{\lambda'}^0) \langle \Psi_\lambda | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \Psi_{\lambda'} \rangle}{\Gamma_{\lambda\lambda'}}, \quad (10)$$

здесь $\Psi_{\lambda\lambda'}^\pm = C_\lambda^\pm \Psi_\lambda + C_{\lambda'}^\pm \Psi_{\lambda'}$ — гибридные волновые функции основных состояний электрона $\Psi_\lambda, \Psi_{\lambda'}$ на изолированных центрах локализации λ и λ' , \mathbf{n} — единичный вектор, параллельный внешнему электрическому полю, $\langle \Psi_\lambda | \mathbf{r} | \Psi_\lambda \rangle = \mathbf{r}_\lambda$, $\langle \Psi_{\lambda'} | \mathbf{r} | \Psi_{\lambda'} \rangle = \mathbf{r}_{\lambda'} = \mathbf{r}_\lambda + \mathbf{r}_{\lambda\lambda'}$, \mathbf{r}_λ — радиус-вектор центра λ , $\mathbf{r}_{\lambda\lambda'}$ — радиус-вектор центра λ' относительно центра λ , $\langle \Psi_\lambda | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \Psi_{\lambda'} \rangle = \langle \Psi_{\lambda'} | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \Psi_\lambda \rangle$, $n_F(\varepsilon)$ — среднее число заполнения состояния с энергией ε , V_0 — объем системы. Волновые функции

$$\Psi_{\lambda\lambda'}^- = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{4I_{\lambda\lambda'}^2}{(\varepsilon_\lambda^0 - \varepsilon_{\lambda'}^0 + \Gamma_{\lambda\lambda'})^2}}} \times \left(-\frac{2I_{\lambda\lambda'}}{\varepsilon_\lambda^0 - \varepsilon_{\lambda'}^0 + \Gamma_{\lambda\lambda'}} \Psi_\lambda + \Psi_{\lambda'} \right), \quad (11.1)$$

$$\Psi_{\lambda\lambda'}^+ = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{4I_{\lambda\lambda'}^2}{(\varepsilon_\lambda^0 - \varepsilon_{\lambda'}^0 + \Gamma_{\lambda\lambda'})^2}}} \times \left(\Psi_\lambda + \frac{2I_{\lambda\lambda'}}{\varepsilon_\lambda^0 - \varepsilon_{\lambda'}^0 + \Gamma_{\lambda\lambda'}} \Psi_{\lambda'} \right), \quad (11.2)$$

отвечают нижнему $\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-$ и верхнему $\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+$ уровням энергии,

$$\varepsilon_{\lambda\lambda'}^\pm = \frac{\varepsilon_\lambda^0 + \varepsilon_{\lambda'}^0}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_\lambda^0 - \varepsilon_{\lambda'}^0)^2 + 4I_{\lambda\lambda'}^2}, \quad (12)$$

здесь

$$\Gamma_{\lambda\lambda'} = \varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ - \varepsilon_{\lambda\lambda'}^- = \sqrt{(\varepsilon_\lambda^0 - \varepsilon_{\lambda'}^0)^2 + 4I_{\lambda\lambda'}^2},$$

$\varepsilon_\lambda^0, \varepsilon_{\lambda'}^0$ — затравочные энергии (без учета гибридизации), $I_{\lambda\lambda'} = \langle \Psi_\lambda | \hat{U}_\lambda | \Psi_{\lambda'} \rangle$ — резонансный интеграл; $\hat{U}_\lambda \approx \hat{U}_\lambda + e\phi(\mathbf{r}_\lambda)$ — потенциальная энергия локализованного электрона в точке расположения центра с номером λ , учитывающая кулоновский сдвиг $e\phi(\mathbf{r}_\lambda)$, обусловленный другими заряженными центрами в точке \mathbf{r}_λ .

Для резонансных пар уровней с затравочными энергиями $\varepsilon_\lambda^0 \approx \varepsilon_{\lambda'}^0$ и оптимальными межцентровыми расстояниями r_ω , вносящих основной вклад в бесфононную проводимость при частотах $\omega < \omega_{\text{opt}}$ ($r_\omega > r_{\text{opt}}$), матричные элементы (10) принимают вид

$$\langle \Psi_{\lambda\lambda'}^- | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \Psi_{\lambda\lambda'}^+ \rangle \approx (\mathbf{n}, \mathbf{r}_{\lambda\lambda'}) \frac{I_{\lambda\lambda'}}{\Gamma_{\lambda\lambda'}}. \quad (13.1)$$

Матричные элементы вида (13.1) были использованы в работах [7,9] для расчета частотной зависимости низкотемпературной бесфононной проводимости (2)–(4).

При высоких частотах, $\omega > \omega_{\text{opt}}$ ($r_{\omega} < r_{\text{opt}}$) основной вклад в вещественную часть бесфононной проводимости вносят пары центров с большим разбросом энергий уровней, $|\varepsilon_{\lambda}^0 - \varepsilon_{\lambda'}^0| > 2I_{\lambda\lambda'}$, и оптимальным межцентровым расстоянием, $r_{\lambda\lambda'} \approx r_{\text{opt}}$, не зависящим от частоты; для таких пар центров матричные элементы (10) равны

$$\langle \Psi_{\lambda\lambda'}^- | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \Psi_{\lambda\lambda'}^+ \rangle \approx \langle \Psi_{\lambda} | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \Psi_{\lambda'} \rangle. \quad (13.2)$$

Выражения (13.2) использовались в [16] для расчета низкотемпературной бесфононной проводимости $\sigma_1^{\text{res}}(\omega)$ в области высоких частот (6), (7). Поскольку основной вклад в бесфононную проводимость вносят пары, расстояния между центрами в которых больше радиуса локализации, $r_{\lambda\lambda'} > a$, то для водородоподобных примесей в приближении изотропного закона дисперсии матричный элемент (13.2) имеет вид

$$\langle \Psi_{\lambda} | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \Psi_{\lambda'} \rangle \approx \frac{r_{\lambda\lambda'}^3}{a^2} \exp(-r_{\lambda\lambda'}/a) \cos \theta, \quad (14)$$

где θ — угол между векторами \mathbf{n} и $\mathbf{r}_{\lambda\lambda'}$, $\Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) = (1/\sqrt{\pi a^3}) \exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\lambda}|/a)$.

Для расчета частотной зависимости проводимости $\sigma_1^{\text{res}}(\omega)$ в переходной области частот, $\omega \approx \omega_{\text{opt}}$, следует использовать общий вид матричных элементов (10). Переходя в (9) от суммирования к интегрированию, получаем [12]:

$$\sigma_1^{\text{res}}(\omega) = \sigma_{1a}^{\text{res}}(\omega) + \sigma_{1b}^{\text{res}}(\omega) + \sigma_{1c}^{\text{res}}(\omega), \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{1a}^{\text{res}}(\omega) &= \frac{4\pi^2 e^2 \rho_0^2 \omega}{3} \\ &\times \int_{r_{\omega}}^{\infty} dr_{\lambda\lambda'} r_{\lambda\lambda'}^4 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- \int d\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ \Phi(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-, \varepsilon_{\lambda\lambda'}^+, r_{\lambda\lambda'}) \\ &\times \frac{I^2(r_{\lambda\lambda'})}{(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ - \varepsilon_{\lambda\lambda'}^-)^2} (n_{\text{F}}(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-) - n_{\text{F}}(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+)) \delta(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- - \varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ + \hbar\omega), \end{aligned} \quad (16.1)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{1b}^{\text{res}}(\omega) &= \frac{4\pi^2 e^2 \rho_0^2 \omega}{3} \int_{r_{\omega}}^{\infty} dr_{\lambda\lambda'} \frac{r_{\lambda\lambda'}^6}{a^2} \exp(-r_{\lambda\lambda'}/a) \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- \int d\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ \Phi(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-, \varepsilon_{\lambda\lambda'}^+, r_{\lambda\lambda'}) \\ &\times \frac{2I_{\lambda\lambda'}}{(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ - \varepsilon_{\lambda\lambda'}^-)^2} \sqrt{(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ - \varepsilon_{\lambda\lambda'}^-)^2 - 4I_{\lambda\lambda'}^2} \\ &\times (n_{\text{F}}(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-) - n_{\text{F}}(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+)) \delta(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- - \varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ + \hbar\omega), \end{aligned} \quad (16.2)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{1c}^{\text{res}}(\omega) &= \frac{4\pi^2 e^2 \rho_0^2 \omega}{3} \int_{r_{\omega}}^{\infty} dr_{\lambda\lambda'} \frac{r_{\lambda\lambda'}^8}{a^4} \exp(-2r_{\lambda\lambda'}/a) \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- \int d\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ \Phi(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-, \varepsilon_{\lambda\lambda'}^+, r_{\lambda\lambda'}) \\ &\times \frac{((\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ - \varepsilon_{\lambda\lambda'}^-)^2 - 4I_{\lambda\lambda'}^2)}{(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ - \varepsilon_{\lambda\lambda'}^-)^2} (n_{\text{F}}(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-) - n_{\text{F}}(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+)) \\ &\times \delta(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- - \varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ + \hbar\omega), \end{aligned} \quad (16.3)$$

здесь

$$\Phi(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-, \varepsilon_{\lambda\lambda'}^+, r_{\lambda\lambda'}) = \frac{\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ - \varepsilon_{\lambda\lambda'}^-}{\sqrt{(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ - \varepsilon_{\lambda\lambda'}^-)^2 - 4I_{\lambda\lambda'}^2}}$$

— якобиан перехода от затравочных энергий $\varepsilon_{\lambda}^0, \varepsilon_{\lambda'}^0$ (без учета гибридизации) к энергиям $\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-, \varepsilon_{\lambda\lambda'}^+$.

Разность средних чисел заполнения $n_{\text{F}}(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-) - n_{\text{F}}(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+)$, фигурирующая в выражении (9), равна

$$\begin{aligned} n_{\text{F}}(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-) - n_{\text{F}}(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+) &= \left(1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_{\text{B}}T}\right) \right) \\ &\times \exp\left(\frac{\Omega - (\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- - \mu)}{k_{\text{B}}T}\right), \end{aligned} \quad (17)$$

где $\exp\left(\frac{\Omega - (\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- - \mu)}{k_{\text{B}}T}\right)$ — равновесная вероятность однократного заполнения пары центров с энергией заполненного состояния $\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-, \mu$ — уровень Ферми;

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{\Omega}{k_{\text{B}}T}\right) &= 1 + \exp\left(-\frac{(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- - \mu)}{k_{\text{B}}T}\right) \\ &+ \exp\left(-\frac{(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ - \mu)}{k_{\text{B}}T}\right) + \exp\left(-\frac{(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- + \varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ - 2\mu)}{k_{\text{B}}T}\right). \end{aligned} \quad (18)$$

Согласно [7], учесть кулоновское взаимодействие между электронами, локализованными одновременно на рассматриваемой паре центров, можно, приняв их энергию равной $\varepsilon_{\lambda}^0 + \varepsilon_{\lambda'}^0 + e^2/\kappa r_{\lambda\lambda'}$. Тогда выражение для статистической суммы (18) принимает вид

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{\Omega}{k_{\text{B}}T}\right) &= 1 + \exp\left(-\frac{(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- - \mu)}{k_{\text{B}}T}\right) \\ &+ \exp\left(-\frac{(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ - \mu)}{k_{\text{B}}T}\right) + \exp\left(-\frac{(\varepsilon_{\lambda}^0 + \varepsilon_{\lambda'}^0 + e^2/\kappa r_{\lambda\lambda'} - 2\mu)}{k_{\text{B}}T}\right), \end{aligned} \quad (19)$$

где $\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- + \varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ = \varepsilon_{\lambda}^0 + \varepsilon_{\lambda'}^0$. Разность средних чисел заполнения с учетом закона сохранения энергии, $\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ = \varepsilon_{\lambda\lambda'}^- + \hbar\omega$, и равенства $\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- + \varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ = \varepsilon_{\lambda}^0 + \varepsilon_{\lambda'}^0$, можно

представить в виде

$$n_F(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-) - n_F(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+) = \frac{(1 - \exp(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}))}{\exp(-\frac{(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ + e^2/\kappa r_{\lambda\lambda'} - \mu)}{k_B T}) + \exp(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}) + 1 + \exp(\frac{(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- - \mu)}{k_B T})}. \quad (20)$$

Проинтегрировав (16.1), (16.2), (16.3) по энергиям $\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-$, $\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+$ с учетом (20), при условии $k_B T > \hbar\omega$, $e^2/(\kappa r_{\text{opt}})$, получаем

$$\sigma_{1a}^{\text{res}}(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2 \rho_0^2}{3\hbar} \int_{r_\omega}^{\infty} r_{\lambda\lambda'}^4 \hbar\omega \frac{I_{\lambda\lambda'}^2}{\sqrt{(\hbar\omega)^2 - 4I_{\lambda\lambda'}^2}} dr_{\lambda\lambda'}, \quad (21.1)$$

$$\sigma_{1b}^{\text{res}}(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2 \rho_0^2 \omega c}{3} \int_{r_\omega}^{\infty} \frac{r_{\lambda\lambda'}^6}{a^2} \hbar\omega \exp(-2r_{\lambda\lambda'}/a) dr_{\lambda\lambda'}, \quad (21.2)$$

$$\sigma_{1c}^{\text{res}}(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2 \rho_0^2}{3\hbar} \times \int_{r_\omega}^{\infty} \frac{r_{\lambda\lambda'}^8}{a^4} \hbar\omega \exp(-2r_{\lambda\lambda'}/a) \sqrt{(\hbar\omega)^2 - 4I_{\lambda\lambda'}^2} dr_{\lambda\lambda'}; \quad (21.3)$$

в (21.1), (21.2), (21.3) учтено, что

$$\exp\left(\frac{\Omega - (\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- - \mu)}{k_B T}\right) \approx \left(\exp\left(\frac{(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- - \mu)}{k_B T}\right) + 2 + \exp\left(-\frac{(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- - \mu)}{k_B T}\right)\right)^{-1}, \quad (22)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} (n_F(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-) - n_F(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- + \hbar\omega)) d\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- = \left(1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)\right) \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{\Omega - (\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- - \mu)}{k_B T}\right) d\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- \approx \hbar\omega, \quad (23)$$

где

$$\exp\left(\frac{\Omega - (\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- - \mu)}{k_B T}\right) \approx \frac{1}{4} \text{ch}^{-2}\left(\frac{\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- - \mu}{2k_B T}\right),$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{\Omega - (\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- - \mu)}{k_B T}\right) d\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- \approx k_B T.$$

Напомним, что в случае низких температур, $k_B T < \hbar\omega$, $e^2/(\kappa r_\omega)$, интегрирование по энергии разно-

сти средних чисел заполнения дает

$$\int_{-\infty}^{\infty} (n_F(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-) - n_F(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- + \hbar\omega)) d\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- = \int_{\mu - \hbar\omega - e^2/\kappa r_{\lambda\lambda'}}^{\mu} d\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- = \hbar\omega + \frac{e^2}{\kappa r_{\lambda\lambda'}};$$

при этом выражения для компонент проводимости можно получить заменой в (21.1), (21.2), (21.3) $\hbar\omega$ на $\hbar\omega + e^2/(\kappa r_{\lambda\lambda'})$ под знаком интегралов [12].

В условиях $k_B T > \hbar\omega$, $e^2/(\kappa r_{\text{opt}})$ в области частот $\omega \ll \omega_c$ основной вклад в бесфононную проводимость дает (21.1); при этом выражение для бесфононной проводимости принимает вид (3):

$$\sigma_{1a}^{\text{res}}(\omega) = \frac{\pi^2 e^2 a \rho_0^2 \hbar}{3} r_\omega^4 \omega^2. \quad (24)$$

В режиме проводимости с переменной длиной прыжка $r_\omega > r_{\text{opt}}$ ($\omega < \omega_{\text{opt}}$) вклады от слагаемых (21.2), (21.3) в бесфононную проводимость (15) экспоненциально малы. Частотная зависимость вещественной части бесфононной проводимости (24) оказывается сильнее частотной зависимости проводимости (2), отвечающей случаю низких температур.

При высоких частотах $\omega > \omega_{\text{opt}}$ ($r_\omega < r_{\text{opt}}$) в режиме с постоянной длиной прыжка r_{opt} определяющий вклад в бесфононную проводимость (15) вносит слагаемое (21.3). Подынтегральное выражение в (21.3) имеет резкий максимум в окрестности r_{opt} ; в условиях $r_\omega < r_{\text{opt}}$ вклад (21.3) можно представить в виде

$$\sigma_{1c}^{\text{res}}(\omega) \approx \frac{4\pi^2 e^2 \rho_0^2 \hbar}{3} \omega^2 \int_0^{\infty} \frac{r_{\lambda\lambda'}^8}{a^4} \exp(-2r_{\lambda\lambda'}/a) dr_{\lambda\lambda'}. \quad (25)$$

В (25) учтено, что

$$\sqrt{(\hbar\omega)^2 - 4I_{\lambda\lambda'}^2} \approx \hbar\omega$$

при $r_\omega + a < r_{\lambda\lambda'}$. Интегрируя в (25), получаем выражение для бесфононной проводимости (7)

$$\sigma_{1c}^{\text{res}}(\omega) = \frac{\pi^2}{3} C_1 e^2 \rho_0^2 a^5 \hbar\omega^2, \quad (26)$$

где $C_1 \approx 315$ — численный коэффициент. Из вида подынтегральной функции в выражении (25) следует, что при высоких частотах основной вклад в бесфононную проводимость вносят пары, расстояния между центрами в которых порядка $r_{\lambda\lambda'} \approx r_{\text{opt}}$; максимум подынтегрального выражения достигается при оптимальном значении, равном $r_{\text{opt}} = 4a$.

3. Заключение

На рис. 1 приведены результаты расчета частотной зависимости бесфононной проводимости $\sigma_1^{\text{res}}(\omega/\omega_c)$ (15)

в области перехода от переменной к постоянной длине прыжка в условиях $k_B T > \hbar \omega$, $e^2 / (\kappa r_{\text{opt}})$. Для характерных в случае неупорядоченных полупроводников значений параметров $a \approx 80 \text{ \AA}$, $\kappa \approx 10$ имеем $e^2 / (\kappa r_{\text{opt}}) \approx 4 \text{ meV}$; при этом равенству $\hbar \omega \approx e^2 / (\kappa r_{\text{opt}})$ отвечает частота порядка 1 THz ($\omega \approx 0.1 \omega_c$). Согласно результатам расчета, переход для бесфононной проводимости от переменной r_ω к постоянной длине прыжка $r_{\text{opt}} \approx 4a$ происходит при $r_{\text{opt}} \approx r_\omega$ ($\omega_{\text{opt}} \approx 0.02 \omega_c$). При низких частотах $\omega < \omega_{\text{opt}}$ ($r_\omega > r_{\text{opt}}$) в режиме проводимости с переменной длиной прыжка r_ω бесфононная проводимость определяется выражением (24). Частотная зависимость слагаемого (21.1) немонотонна (рис. 1 и 2); это связано с уменьшением характерной длины прыжка r_ω с ростом частоты. При высоких частотах $\omega > \omega_{\text{opt}}$

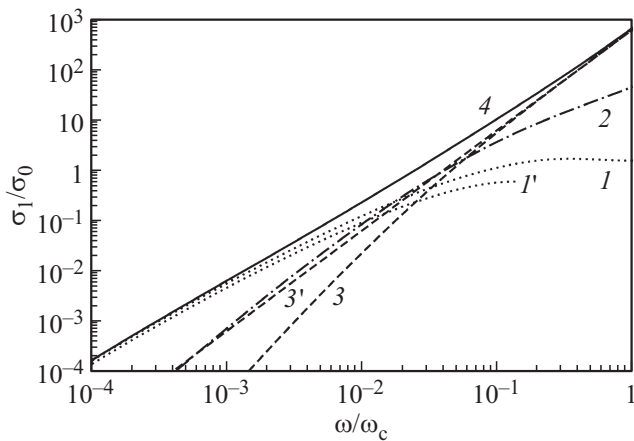


Рис. 1. Частотные зависимости слагаемых вещественной части бесфононной проводимости $\sigma_1^{\text{res}}/\sigma_0$: кривая 1 — (21.1), 1' — (24), 2 — (21.2), 3 — (21.3), 3' — (26); 4 — частотная зависимость бесфононной проводимости (15). Проводимость нормирована на величину $\sigma_0 = \frac{1}{3} \pi^2 e^4 a^4 \rho_0^2 \omega_c / \kappa$.

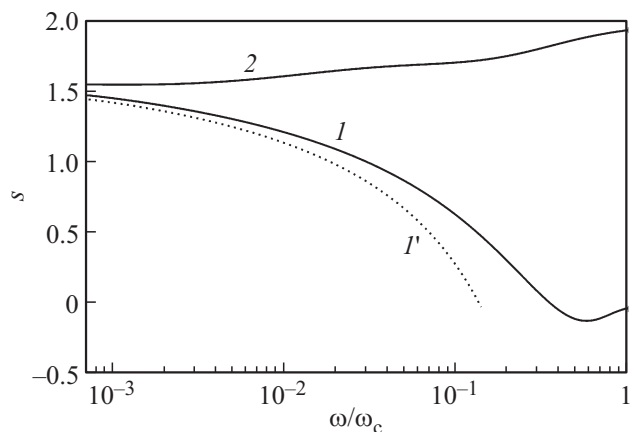


Рис. 2. Частотные зависимости $s(\omega/\omega_c) = \frac{d \ln(\sigma)}{d \ln(\omega)} = \frac{\omega/\omega_c}{\sigma/\sigma_0} \frac{d\sigma/\sigma_0}{d\omega/\omega_c}$. Кривая 1 соответствует бесфононной проводимости с переменной длиной прыжка (21.1); кривая 1' соответствует выражению для бесфононной проводимости с переменной длиной прыжка (24); кривая 2 соответствует бесфононной проводимости (15).

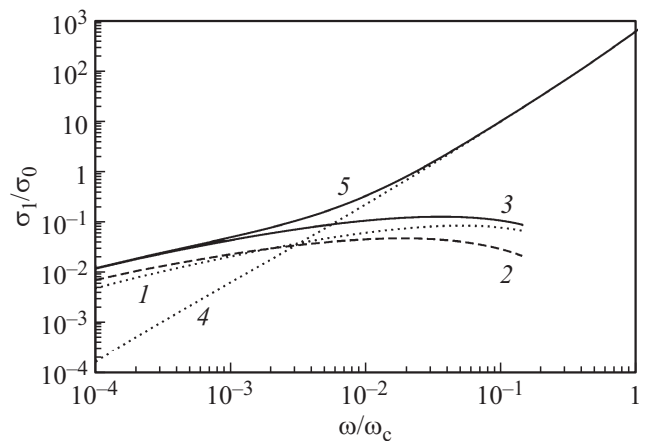


Рис. 3. Кривая 1 — частотная зависимость релаксационной проводимости $\sigma_1^{\text{rel}}/\sigma_0$ (1); 2 — частотная зависимость релаксационной проводимости (8), $T = 60 \text{ K}$, 3 — частотная зависимость интерполяционного выражения для релаксационной проводимости (27); 4 — частотная зависимость бесфононной проводимости $\sigma_1^{\text{res}}/\sigma_0$ (15); 5 — суперпозиция релаксационного (27) и бесфононного (15) вкладов в проводимость, $\sigma_1(\omega) = \sigma_1^{\text{res}}(\omega) + \sigma_1^{\text{rel}}(\omega)$.

($r_\omega < r_{\text{opt}}$) в режиме проводимости с постоянной длиной прыжка r_{opt} выражение для бесфононной проводимости принимает вид (26); в этом случае определяющий вклад в бесфононную проводимость (15) вносит слагаемое (21.3). Соответственно, как и в случае низких температур ($e^2 / (\kappa r_\omega)$, $\hbar \omega > k_B T$), в условиях $k_B T > \hbar \omega$, $e^2 / (\kappa r_{\text{opt}})$, в области высоких частот, для бесфононной проводимости происходит переход к постоянной длине прыжка, когда основной вклад в проводимость вносят электронные переходы внутри пар с оптимальными межцентровыми расстояниями $r_{\lambda\lambda'} \approx r_{\text{opt}}$.

На рис. 3 приведена суперпозиция релаксационного и бесфононного вкладов в проводимость, $\sigma_1(\omega) = \sigma_1^{\text{res}}(\omega) + \sigma_1^{\text{rel}}(\omega)$. С ростом температуры, $k_B T > e^2 / (\kappa r_\omega)$, частотная зависимость вещественной части релаксационной проводимости несколько ослабляется [17]; при этом интерполяционное выражение для вещественной части релаксационной проводимости имеет вид [10]:

$$\sigma_1^{\text{rel}}(\omega) = \frac{\pi^4 e^2 a \rho_0^2}{24} \omega \bar{r}_\omega^4 \left(k_B T + \frac{4}{\pi^2} U(\bar{r}_\omega) \right). \quad (27)$$

На рис. 4 видно, что переход от релаксационной проводимости к бесфононной проводимости в режиме с переменной длиной прыжка, даваемой выражениями (21.1) и (24), с ростом частоты не приводит к кроссоверу от сублинейной к квадратичной частотной зависимости вещественной части проводимости. Вместе с тем, переход от релаксационной проводимости к бесфононной проводимости с постоянной длиной прыжка, даваемой выражением (26), с ростом частоты обуславливает кроссовер от сублинейной к квадратичной частотной

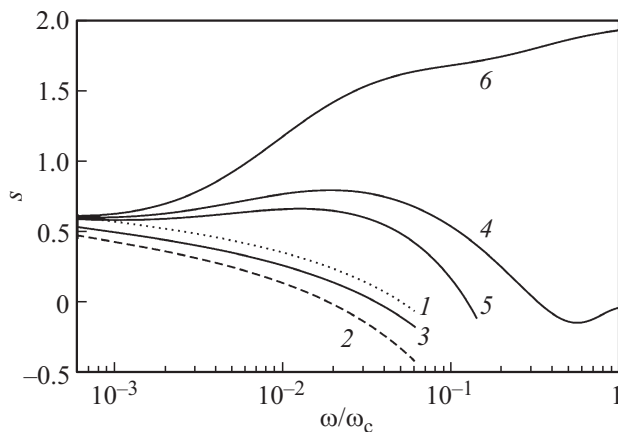


Рис. 4. Частотные зависимости $s(\omega/\omega_c) = \frac{d \ln(\sigma)}{d \ln(\omega)} = \frac{\omega/\omega_c}{\sigma/\sigma_0} \frac{d\sigma/\sigma_0}{d\omega/\omega_c}$. Кривая 1 соответствует релаксационной проводимости $\sigma_1^{\text{rel}}/\sigma_0$ (1); кривая 2 соответствует релаксационной проводимости (8); кривая 3 соответствует интерполяционному выражению для релаксационной проводимости (27); кривая 4 соответствует суперпозиции релаксационного вклада (27) и вклада (21.1) в бесфононную проводимость (15); кривая 5 соответствует суперпозиции релаксационного вклада (27) и вклада (24) в бесфононную проводимость (15); кривая 6 соответствует суперпозиции релаксационного (27) и бесфононного (15) вкладов в проводимость, $\sigma_1(\omega) = \sigma_1^{\text{res}}(\omega) + \sigma_1^{\text{rel}}(\omega)$.

зависимости вещественной части проводимости (рис. 3 и 4). При этом суперлинейность ($s > 1$) вещественной части проводимости неупорядоченных полупроводников в переходной области частот свидетельствует о проявлении эффекта кроссовера.

Отметим, что частота перехода для бесфононной проводимости от переменной к постоянной длине прыжка, $\omega_{\text{opt}} \approx 0.02\omega_c$, порядка частоты кроссовера ω_{cr} , в окрестности которой происходит переход от релаксационной проводимости к бесфононной, $\sigma_1^{\text{rel}}(\omega_{\text{cr}}) = \sigma_1^{\text{res}}(\omega_{\text{cr}})$. Соответственно переход от сублинейной к субквадратичной частотной зависимости вещественной части проводимости $\sigma_1(\omega)$ осуществляется в окрестности частоты ω_{opt} ($r_\omega \approx r_{\text{opt}}$).

Таким образом, с ростом температуры наблюдаемый при низких температурах в неупорядоченных полупроводниках переход от почти линейной к квадратичной частотной зависимости вещественной части проводимости может сохраняться; при этом с ростом температуры кроссовер частотной зависимости вещественной части проводимости в терагерцовом диапазоне частот может обуславливаться переходом от релаксационной проводимости с переменной, зависящей от частоты, длиной прыжка к бесфононной проводимости с постоянной длиной прыжка.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] H. Böttger, V.V. Bryksin. Hopping Conduction in Solids. VCH Akademie Verlag, Berlin (1985). 398 p.
- [2] I.P. Zvyagin. In: Charge Transport in Disordered Solids with Applications in Electronics / Ed. S. Baranovski. John Wiley & Sons, Chichester (2006). Ch. 9. P. 339.
- [3] E. Helgren, N.P. Armitage, G. Grüner. Phys. Rev. B **69**, 1, 014201 (2004); E. Helgren, N.P. Armitage, G. Grüner. Phys. Rev. Lett. **89**, 24, 246601 (2002).
- [4] M. Hering, M. Scheffler, M. Dressel, H.v. Löhneysen. Phys. Rev. B **75**, 20, 205203 (2007); M. Hering, M. Scheffler, M. Dressel, H.v. Löhneysen. Physica B **359–361**, 1469 (2005).
- [5] M. Lee, M.L. Stutzmann. Phys. Rev. Lett. **87**, 5, 056402 (2001).
- [6] A.L. Efros. Phil. Mag. B **43**, 5, 829 (1981).
- [7] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. ЖЭТФ **81**, 1, 406 (1981). [B.I. Shklovskii, A.L. Efros. JETP **54**, 1, 218 (1981).]
- [8] A.L. Efros, B.I. Shklovskii. In: Electron-Electron Interactions in Disordered Systems / Eds A.L. Efros, M. Pollak. North Holland, Elsevier Science Publishers B.V., Amsterdam (1985). P. 409.
- [9] N.F. Mott. Phil. Mag. **22**, 175, 7 (1970).
- [10] И.П. Звягин. Кинетические явления в неупорядоченных полупроводниках. Изд-во МГУ, М. (1984). 192 с.
- [11] И.П. Звягин, М.А. Ормонт. Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3: Физ., Астрон. **16**, 4, 44 (2008). [I.P. Zvyagin, M.A. Ormont. Moscow Univ. Phys. Bull. **63**, 4, 272 (2008)]
- [12] М.А. Ормонт, И.П. Звягин. ФТП **54**, 1, 36 (2020). [M.A. Ormont, I.P. Zvyagin. Semicond. **54**, 1, 33 (2020).]
- [13] М.А. Ормонт. Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3: Физика, астрономия **19**, 2, 57 (2011). [M.A. Ormont. Moscow Univ. Phys. Bull. **66**, 2, 162 (2011).]
- [14] I.G. Austin, N.F. Mott. Adv. Phys. **18**, 71, 41 (1969).
- [15] В.Л. Бонч-Бруевич, И.П. Звягин, Р. Кайпер, А.Г. Миронов, Р. Эндерлайн, Б.-М. Эссер. Электронная теория неупорядоченных полупроводников. Наука, М. (1981).
- [16] М.А. Ормонт, И.П. Звягин. ФТГ **60**, 5, 880 (2018). [M.A. Ormont, I.P. Zvyagin. Phys. Solid State **60**, 5, 882 (2018).]
- [17] M. Pollak. Phys. Rev. **138**, 6A, A1822 (1965).

Редактор Е.В. Толстякова