03,09

Особенности поведения температурной зависимости высокочастотной проводимости неупорядоченных полупроводников в терагерцовой области частот

© М.А. Ормонт, А.А. Ляшенко

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

E-mail: ormont.73@mail.ru

Поступила в Редакцию 11 октября 2024 г.
В окончательной редакции 18 ноября 2024 г.
Принята к публикации 19 ноября 2024 г.

Проведен анализ особенностей электронного прыжкового транспорта по примесной зоне неупорядоченного полупроводника (с водородоподобными примесями), связанных с поведением температурной зависимости высокочастотной проводимости в области низких температур. На основе парного приближения выполнен численный расчет температурной зависимости вещественной части высокочастотной проводимости неупорядоченного полупроводника в терагерцовой области частот, в которой в условиях низких температур с ростом частоты наблюдался переход от почти линейной к квадратичной частотной зависимости вещественной части проводимости. Показано, что учет кулоновского взаимодействия между электронами в парах обусловливает немонотонный выход на насыщение температурной зависимости высокочастотной проводимости с понижением температуры вследствие разнонаправленности изменений релаксационного и резонансного вкладов в проводимость с изменением температуры. Увеличение бесфононной проводимости с понижением температуры обусловливается главной ролью кулоновского взаимодействия между электронами в резонансных парах при низких температурах, $e^2/kr_\omega > \hbar\omega$ (r_ω — оптимальная длина прыжка на частоте ω).

Ключевые слова: высокочастотная прыжковая проводимость, отклонения от универсальности частотной зависимости проводимости, неупорядоченные полупроводники.

DOI: 10.61011/FTT.2025.01.59762.2-25

1. Введение

Получение информации об особенностях механизмов прыжкового переноса в неупорядоченных полупроводниках осложняется универсальностью степенной частотной зависимости проводимости, $\sigma(\omega) \sim \omega^s$ (s — постоянная; как правило, $0.5 < s < 1$), хорошо описывающей $\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + i\sigma_2(\omega)$ неупорядоченных полупроводников в широкой области частот. В этой связи важную роль играют исследования температурной зависимости проводимости на переменном токе [1]; в частности, в области частот, в которой наблюдаются отклонения частотной зависимости проводимости неупорядоченных полупроводников от универсальности ($s \approx 1$).

Высокочастотную проводимость неупорядоченных полупроводников с водородоподобными примесями принято описывать с использованием представлений о переменной, зависящей от частоты, оптимальной длине прыжка r_ω, существенно превышающей радиус локализации состояний a и уменьшающейся с ростом частоты. Даваемые теорией немонотонные частотные зависимости для резонансного (бесфононного) и релаксационного (фононного) вкладов в проводимость [2–6],

$$\sigma_1^{res}(\omega) \sim r_\omega^n \omega^m \sim \omega^m \ln^n(\omega_c/\omega),$$
$$\sigma_1^{rel}(\omega) \sim \tilde{r}_\omega^l \omega^q \sim \omega^q \ln^l(\omega_{ph}/\omega), \qquad (1)$$

можно аппроксимировать степенным законом $C\omega^s$ с показателем степени $s(\omega)$, уменьшающимся с ростом частоты [7]; здесь σ_1^{res}, σ_1^{rel} — вещественные части бесфононного и релаксационного вкладов в проводимость, $\sigma_1(\omega) = \sigma_1^{res}(\omega) + \sigma_1^{rel}(\omega)$, n, m, l, q — целые числа, ω_c — частота, при которой оптимальная длина прыжка r_ω для резонансной проводимости становится порядка радиуса локализации состояний, ω_{ph} — характерная фононная частота, представляющая собой частоту попыток перехода электрона при релаксационной проводимости.

Однако, частотные зависимости проводимости вида (1) при типичных для мелких примесей значениях параметра $A = e^2/\kappa a\hbar\omega_c \approx 1/2$ (где κ — диэлектрическая проницаемость среды, $\omega_c = 2I_0/\hbar$; $I_0 \approx e^2/\kappa a$ — предэкспоненциальный множитель резонансного интеграла) не описывают наблюдаемый в SiP [8–10], SiB [11] переход частотной зависимости вещественной части низкотемпературной проводимости $\sigma_1(\omega)$ от почти линейной к квадратичной с ростом частоты. При высоких частотах бесфононная проводимость преобладает над релаксационной; при этом согласно теории в широкой области частот, $\omega < \omega_c$, кулоновское взаимодействие между электронами в резонансных парах играет основную роль, $\hbar\omega < e^2/\kappa r_\omega$, и частотная зависимость бесфононной проводимости $\sigma_1^{res}(\omega)$ остается близкой к линейной ($s \approx 1$) вплоть до частоты $\omega_m \approx 0.07\omega_c$, отвечающей

максимуму $\sigma_1^{res}(\omega)$ [12]. Отметим, что частотная зависимость проводимости будет немонотонна за счет частотной зависимости оптимальной длины прыжка; в парном приближении для бесфононной проводимости частотная зависимость оптимальной длины прыжка r_ω связана с гибридизацией волновых функций изолированной пары центров и определяется равенством $\hbar\omega = 2I_{\lambda\lambda'}(r_\omega)$, где $I_{\lambda\lambda'} = I_0 \exp(-r_{\lambda\lambda'}/a)$ — резонансный интеграл, $r_{\lambda\lambda'}$ — межцентровое расстояние, λ — номер центра.

Существенно более плавный переход, чем наблюдается на опыте, от сублинейной (релаксационной, бесфононной) к субквадратичной (бесфононной) частотной зависимости проводимости $\sigma_1(\omega)$ в режиме с переменной длиной прыжка можно объяснить лишь при нетипичных для мелких примесей малых значениях параметра $A < 10^{-5}$; при этом частотная зависимость проводимости $\sigma_1(\omega)$ будет немонотонна с максимумом в окрестности частоты перехода [12]. Однако предсказываемая теорией немонотонность частотной зависимости проводимости $\sigma_1(\omega)$ неупорядоченных полупроводников в переходной области частот экспериментально не была обнаружена [8–11].

Проведенный в [13] в парном приближении расчет вещественной части низкотемпературной проводимости ($e^2/\kappa r_\omega$, $\hbar\omega > kT$) показал, что переход от почти линейной к квадратичной частотной зависимости $\sigma_1(\omega)$ может быть связан с переходом от проводимости с переменной длиной прыжка r_ω к проводимости с постоянной длиной прыжка r_{opt} с ростом частоты. Переход для бесфононной проводимости от переменной $r_\omega = a\ln(\omega_c/\omega)$ к постоянной длине прыжка $r_{opt} \approx 4a$ происходит при $r_{opt} \approx r_\omega$ ($\omega_{opt} \approx 0.02\omega_c$); для Si:P $\omega_c/2\pi \sim 10^{13}$ Hz. При низких частотах $\omega < \omega_{opt}$ ($r_\omega > r_{opt}$) в режиме с переменной длиной прыжка бесфононная проводимость принимает известный вид [3,6]

$$\sigma_1^{res}(\omega) = (\pi^3/3)e^2 a\rho_0^2 r_\omega^4 \omega(\hbar\omega + e^2/\kappa r_\omega); \qquad (2)$$

ρ_0 — плотность состояний, считаемая постоянной. Поскольку кулоновское взаимодействие между электронами внутри резонансных пар центров играет основную роль [12], $\hbar\omega < e^2/\kappa r_\omega$, частотная зависимость бесфононной проводимости остается сублинейной ($s \approx 0.8$)

$$\sigma_1^{res}(\omega) = (\pi^2/3)e^4 a\rho_0^2 r_\omega^3 \omega/\kappa. \qquad (3)$$

Согласно [13] при высоких частотах $\omega > \omega_{opt}$ ($r_{opt} > r_\omega$), когда эффекты гибридизации несущественны, основной вклад в проводимость вносят электронные переходы внутри пар с межцентровым расстоянием порядка r_{opt}. При высоких частотах в режиме с постоянной длиной прыжка r_{opt} бесфононная проводимость равна

$$\sigma_1^{res}(\omega) = (\pi^2 C_1/3)e^2\rho_0^2 a^5 \omega(\hbar\omega + e^2/\kappa r_{opt}), \qquad (4)$$

где $C_1 = 315$ — численный коэффициент. Частота $\omega_{opt} \approx 0.02\omega_c$ ($r_\omega \approx r_{opt}$), при которой происходит переход к постоянной длине прыжка, порядка частоты кроссовера в (4), $\hbar\omega_{cr} \approx e^2/\kappa r_{opt}$ ($\omega_{cr} \approx 0.1\omega_c$); т. е. переход от линейной к квадратичной частотной зависимости вещественной части проводимости осуществляется в окрестности частоты $\omega_{opt} \sim \omega_{cr}$ [13]. В условиях низких температур в области высоких частот, когда кулоновским взаимодействием между электронами в парах с оптимальным межцентровым расстоянием r_{opt} можно пренебречь, для бесфононной проводимости имеем

$$\sigma_1^{res}(\omega) = (\pi^2 C_1/3)e^2\rho_0^2 a^5 \hbar\omega^2. \qquad (5)$$

Как и в случае низких температур, в условиях $kT > \hbar\omega$, $e^2/\kappa r_{opt}$ в области высоких частот для бесфононной проводимости происходит переход к постоянной длине прыжка. Согласно [14] переход для бесфононной проводимости от переменной r_ω к постоянной длине прыжка r_{opt} происходит при $r_{opt} \approx r_\omega$ ($\omega_{opt} \approx 0.02\omega_c$). При низких частотах $\omega < \omega_{opt}$ ($r_\omega > r_{opt}$) в режиме с переменной длиной прыжка r_ω бесфононная проводимость равна [7]

$$\sigma_1^{res}(\omega) = (\pi^2/3)e^2 a\rho_0^2 \hbar r_\omega^4 \omega^2, \qquad (6)$$

т. е. $\sigma_1^{res}(\omega)$ (6) имеет субквадратичный характер ($s \approx 1.5$).

При высоких частотах $\omega > \omega_{opt}$ ($r_{opt} > r_\omega$), когда эффекты гибридизации несущественны, в режиме с постоянной длиной прыжка r_{opt} бесфононная проводимость принимает вид (5). Согласно (6), (5) в условиях $kT > \hbar\omega$, $e^2/\kappa r_{opt}$ высокочастотная бесфононная проводимость не зависит от температуры. Частота перехода для бесфононной проводимости от переменной к постоянной длине прыжка порядка частоты кроссовера, в окрестности которой происходит переход от релаксационной проводимости к бесфононной [14]. Соответственно, переход от сублинейной ($s < 1$) к квадратичной частотной зависимости $\sigma_1(\omega)$ с ростом температуры может сохраняться и обусловливаться переходом от релаксационной проводимости с переменной длиной прыжка к бесфононной проводимости с постоянной длиной прыжка с ростом частоты.

Напомним, что в области низких температур, $e^2/\kappa\tilde{r}_\omega > kT$, выражение для вещественной части высокочастотной релаксационной проводимости имеет вид [5]

$$\sigma_1^{rel}(\omega) = \pi^2 e^4 \rho_0^2 a\tilde{r}_\omega^3 \omega/(6\kappa), \qquad (7)$$

где $\tilde{r}_\omega = (a/2)\ln(\omega_{ph}/\omega)$ — оптимальная длина прыжка при релаксационной проводимости на частоте ω; для Si:P $\omega_{ph}/2\pi \sim 10^{13}$ Hz. Отметим, что выражения для вещественных частей низкотемпературной релаксационной проводимости (7) и низкотемпературной бесфононной проводимости в переходной области частот (3) имеют один вид ($s \approx 0.8$); с этим, в частности, связана трудность в интерпретации экспериментальных данных по частотным зависимостям проводимости неупорядоченных полупроводников и получении информации об особенностях механизма прыжкового переноса носителей заряда в них.

С ростом температуры, $kT > e^2/\kappa\tilde{r}_\omega$, вещественная часть релаксационной проводимости начинает зависеть

от температуры; при этом ее частотная зависимость меняется несущественно ($s \approx 0.6$) [4]

$$\sigma_1^{rel}(\omega) = \pi^4 e^2 \rho_0^2 a k T \tilde{r}_\omega^4 \omega / 24. \quad (8)$$

Интерполяционное выражение для вещественной части релаксационной проводимости имеет вид [7]

$$\sigma_1^{rel}(\omega) = (\pi^4/24) e^2 a \rho_0^2 \omega \tilde{r}_\omega^4 (kT + (4/\pi^2) e^2/\kappa \tilde{r}_\omega). \quad (9)$$

Отметим, что выражение (6) для бесфононной проводимости при высоких температурах, $kT > \hbar\omega$, $e^2/\kappa r_\omega$, совпадает с выражением для бесфононной проводимости в высокочастотном пределе в области низких температур, $\hbar\omega > e^2/\kappa r_\omega > kT$; в этих случаях кулоновским взаимодействием между электронами в резонансных парах можно пренебречь. Вместе с тем, согласно [12] при низких температурах кулоновское взаимодействие между электронами в резонансных парах играет основную роль, $\hbar\omega < e^2/\kappa r_\omega$, в широкой области частот; при этом частотная зависимость вещественной части низкотемпературной бесфононной проводимости (3), $e^2/\kappa r_\omega > \hbar\omega > kT$, оказывается слабее частотной зависимости бесфононной проводимости при высоких температурах (6), $kT > \hbar\omega$, $e^2/\kappa r_{opt}$. Согласно (2), (3) и (6) с уменьшением температуры при фиксированной частоте бесфононная проводимость неупорядоченного полупроводника растет, в то время как релаксационная проводимость (9), напротив, уменьшается. Соответственно, температурная зависимость проводимости $\sigma_1(\omega, T)$ в области низких температур может иметь немонотонный характер, который обусловливается преобладанием бесфононного вклада в проводимость в переходной области частот и главной ролью кулоновского взаимодействия между электронами в резонансных парах при низких температурах, $e^2/\kappa r_\omega > \hbar\omega > kT$.

Отношение релаксационного (7) и бесфононного (3) вкладов в проводимость, $\sigma_1(\omega, T) = \sigma_1^{res}(\omega, T) + \sigma_1^{rel}(\omega, T)$, равно

$$\sigma_1^{rel}(\omega)/\sigma_1^{res}(\omega) = (1/16)\big(\ln(\omega_{ph}/\omega)/\ln(\omega_c/\omega)\big)^3. \quad (10)$$

В случае $\omega_{ph} \sim \omega_c$ в области частот $\omega < 0.1\omega_c$ резонансный вклад в низкотемпературную проводимость преобладает над релаксационным, $\sigma_1^{rel}(\omega)/\sigma_1^{res}(\omega) \ll 1$; формально при $\omega_{ph} = \omega_c$ отношение вкладов в проводимость не зависит от частоты, $\sigma_1^{rel}(\omega)/\sigma_1^{res}(\omega) \approx 5 \cdot 10^{-2}$.

Таким образом, с ростом температуры на начальном этапе вещественная часть проводимости $\sigma_1(\omega, T)$ (при заданной частоте) должна уменьшаться; это не согласуется с зависимостями $\sigma_1(\omega, T)$, полученными в [8] в экспериментах на Si:P, согласно которым с понижением температуры (до $T \approx 3$ K) проводимость $\sigma_1(\omega, T)$ выходит на насыщение монотонно убывая. Указанное несоответствие, связанное с особенностью поведения температурной зависимости высокочастотной проводимости неупорядоченных полупроводников в области низких температур, может быть существенным при оценке степени влияния кулоновских эффектов на частотную зависимость низкотемпературной проводимости неупорядоченных полупроводников и обусловливает необходимость ее дальнейшего исследования. Цель настоящей работы состояла в расчете температурной зависимости высокочастотной проводимости неупорядоченных полупроводников в переходной области частот и исследовании особенностей ее поведения в области низких температур.

Расчет температурной зависимости высокочастотной проводимости в переходной области частот

Согласно теории прыжкового переноса в парном приближении выражение для вещественной части бесфононной проводимости имеет вид (см., например, [15])

$$\sigma_1^{res}(\omega) = \frac{\pi e^2 \omega}{V_0} \sum_{\substack{\{\lambda,\lambda'\} \\ \lambda \neq \lambda'}} \left| \langle \psi_{\lambda\lambda'}^- | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \psi_{\lambda\lambda'}^+ \rangle \right|^2 \times \big(n_F(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^-) - n_F(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+)\big) \delta(\varepsilon_{\lambda\lambda'}^- - \varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ + \hbar\omega). \quad (11)$$

В условиях низких температур в переходной области частот (для Si:P $\nu \sim 10\,\text{GHz} - 1\,\text{THz}$) электронный прыжковый транспорт по примесной зоне определяется основными примесными состояниями. В рассматриваемом случае водородоподобных примесных центров матричные элементы равны [13]

$$\langle \psi_{\lambda\lambda'}^- | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \psi_{\lambda\lambda'}^+ \rangle = (\mathbf{n}, \mathbf{r}_{\lambda\lambda'}) \frac{I_{\lambda\lambda'}}{\Gamma_{\lambda\lambda'}} + \frac{(\varepsilon_\lambda^0 - \varepsilon_{\lambda'}^0) \langle \psi_\lambda | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \psi_{\lambda'} \rangle}{\Gamma_{\lambda\lambda'}}; \quad (12)$$

здесь $\psi_{\lambda\lambda'}^\pm = C_\lambda^\pm \psi_\lambda + C_{\lambda'}^\pm \psi_{\lambda'}$ — гибридизованные волновые функции основных состояний электрона $\psi_\lambda, \psi_{\lambda'}$ на изолированных центрах локализации λ и λ', $\mathbf{n}$ — единичный вектор, параллельный внешнему электрическому полю, $\mathbf{r}_{\lambda\lambda'}$ — радиус-вектор центра λ' относительно центра λ, $n_F(\varepsilon)$ — среднее число заполнения состояния с энергией ε, V_0 — объем системы, $\varepsilon_\lambda^0, \varepsilon_{\lambda'}^0$ — затравочные энергии (без учета гибридизации), $I_{\lambda\lambda'} = \langle \psi_\lambda | \hat{U}_\lambda | \psi_{\lambda'} \rangle$ — резонансный интеграл; $I_{\lambda\lambda'} = I_0 \exp(-r_{\lambda\lambda'}/a)$, $I_0 \approx e^2/\kappa a$, $\Gamma_{\lambda\lambda'} = \sqrt{(\varepsilon_\lambda^0 - \varepsilon_{\lambda'}^0) + 4I_{\lambda\lambda'}^2}$. В случае мелких примесных центров при слабом легировании, $a < N_d^{-1/3}$ (N_d — концентрация примесных центров), потенциальная энергия локализованного электрона в точке расположения центра с номером λ может быть представлена в виде $U_\lambda = -e^2/\kappa|\mathbf{r} - \mathbf{r}_\lambda| + e\varphi(\mathbf{r}_\lambda)$; здесь $\mathbf{r}_\lambda$ — радиус-вектор центра λ, $e\varphi(\mathbf{r}_\lambda)$ — кулоновский сдвиг, обусловленный другими заряженными центрами в точке $\mathbf{r}_\lambda$.

Для водородоподобных примесей в случае большого межцентрового расстояния, $r_{\lambda,\lambda'} > a$, в приближении

изотропного закона дисперсии матричные элементы в (12) имеют вид [13]

$$\langle\psi_\lambda|(\mathbf{n},\mathbf{r})|\psi_{\lambda'}\rangle \approx \frac{r^3_{\lambda,\lambda'}}{a^2}\,\exp(-r_{\lambda,\lambda'}/a)\cos\theta, \qquad (13)$$

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

Переходя в (11) от суммирования к интегрированию, для вещественной части бесфононной проводимости получаем [13,14]

$$\sigma_1^{res}(\omega)=\sigma_{1a}^{res}(\omega)+\sigma_{1b}^{res}(\omega)+\sigma_{1c}^{res}(\omega), \qquad (14)$$

$$\sigma_{1a}^{res}(\omega)=\frac{4\pi^2e^2\rho_0^2\omega}{3}\times\int\limits_{r_\omega}^{\infty}dr_{\lambda\lambda'}r^4_{\lambda\lambda'}\int\limits_{-\infty}^{\infty}d\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}\int d\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}\Phi(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'},\varepsilon^+_{\lambda\lambda'},r_{\lambda\lambda'})\times\frac{I^2_{\lambda\lambda'}}{(\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}-\varepsilon^-_{\lambda\lambda'})^2}\,(n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'})-n_F(\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}))\delta(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}-\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}+\hbar\omega), \qquad (15.1)$$

$$\sigma_{1b}^{res}(\omega)=\frac{4\pi^2e^2\rho_0^2\omega}{3}\int\limits_{r_\omega}^{\infty}dr_{\lambda\lambda'}\,\frac{r^6_{\lambda\lambda'}}{a^2}\,\exp(-r_{\lambda\lambda'}/a)\times\int\limits_{-\infty}^{\infty}d\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}\int d\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}\Phi(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'},\varepsilon^+_{\lambda\lambda'},r_{\lambda\lambda'})\,\frac{2I_{\lambda\lambda'}}{(\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}-\varepsilon^-_{\lambda\lambda'})^2}\times\sqrt{(\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}-\varepsilon^-_{\lambda\lambda'})^2-4I^2_{\lambda\lambda'}}\,(n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'})-n_F(\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}))\times\delta(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}-\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}+\hbar\omega), \qquad (15.2)$$

$$\sigma_{1c}^{res}(\omega)=\frac{4\pi^2e^2\rho_0^2\omega}{3}\int\limits_{r_\omega}^{\infty}dr_{\lambda\lambda'}\,\frac{r^8_{\lambda\lambda'}}{a^4}\,\exp(-2r_{\lambda\lambda'}/a)\times\int\limits_{-\infty}^{\infty}d\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}\int d\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}\Phi(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'},\varepsilon^+_{\lambda\lambda'},r_{\lambda\lambda'})\times\frac{((\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}-\varepsilon^-_{\lambda\lambda'})^2-4I^2_{\lambda\lambda'})}{(\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}-\varepsilon^-_{\lambda\lambda'})^2}\left(n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'})-n_F(\varepsilon^+_{\lambda\lambda'})\right)\times\delta(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}-\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}+\hbar\omega), \qquad (15.3)$$

здесь

$$\Phi(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'},\varepsilon^+_{\lambda\lambda'},r_{\lambda\lambda'})=\frac{\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}-\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}}{\sqrt{(\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}-\varepsilon^-_{\lambda\lambda'})^2-4I^2_{\lambda\lambda'}}}$$

— якобиан перехода от затравочных энергий ε^0_λ, $\varepsilon^0_{\lambda'}$ (без учета гибридизации) к энергиям $\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}$, $\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}$, отвечающим волновым функциям $\psi^-_{\lambda\lambda'}$ и $\psi^+_{\lambda\lambda'}$,

$$\varepsilon^\pm_{\lambda\lambda'}=\frac{\varepsilon^0_\lambda+\varepsilon^0_{\lambda'}}{2}\pm\frac{1}{2}\sqrt{(\varepsilon^0_\lambda-\varepsilon^0_{\lambda'})^2+4I^2_{\lambda\lambda'}}, \qquad (16)$$

$\Gamma_{\lambda\lambda'}=\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}-\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}$. Фигурирующую в (15.1)–(15.3) разность средних чисел заполнения с учетом кулоновского взаимодействия между электронами, локализованными одновременно на паре центров λ, λ', можно представить в виде [14]

$$n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'})-n_F(\varepsilon^+_{\lambda\lambda'})=\frac{(1-\exp(-\hbar\omega/kT))}{\exp\left(-(\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}+e^2/\kappa r_{\lambda\lambda'}-\mu)/kT\right)+\exp(-\hbar\omega/kT)+1+\exp((\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}-\mu)/kT)}, \qquad (17)$$

где $\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}=\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}+\hbar\omega$, $\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}+\varepsilon^+_{\lambda\lambda'}=\varepsilon^0_\lambda+\varepsilon^0_{\lambda'}$.

Интегрирование (15.1)–(15.3) при условии $kT<\hbar\omega$, $e^2/\kappa r_\omega$ ($kT>\hbar\omega$, $e^2/\kappa r_{opt}$) дает для вещественной части бесфононной проводимости (14) в случаях низких ($\omega<\omega_{opt}$) и высоких ($\omega>\omega_{opt}$) частот выражения (2) и (4) [13] ((6) и (5) [14]); при этом имеем

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}(n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'})-n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}+\hbar\omega))d\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}=\hbar\omega+e^2/\kappa r_{\lambda\lambda'}\quad\text{для } kT<\hbar\omega,\ e^2/\kappa r_\omega, \qquad (18.1)$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}(n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'})-n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}+\hbar\omega))d\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}\approx\hbar\omega\quad\text{для } kT>\hbar\omega,\ e^2/\kappa r_\omega. \qquad (18.2)$$

Для расчета бесфононной проводимости в промежуточной области температур соотношения (15.1), (15.2), (15.3), (17) представим в виде

$$\sigma_{1a}^{res}(\omega)=C_0\sigma_0\int\limits_{2\ln(\omega_c/\omega)}^{\infty}\frac{x^4\exp(-x)}{\sqrt{(\omega/\omega_c)^2-\exp(-x)}}\,dx\times\int\limits_{-\infty}^{\infty}(n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'})-n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}+\hbar\omega))d(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}/\hbar\omega_c), \qquad (19.1)$$

$$\sigma_{1b}^{res}(\omega)=C_0\sigma_0\int\limits_{2\ln(\omega_c/\omega)}^{\infty}x^6\exp(-x)dx\times\int\limits_{-\infty}^{\infty}(n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'})-n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}+\hbar\omega))d(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}/\hbar\omega_c), \qquad (19.2)$$

$$\sigma_{1c}^{res}(\omega)=C_2\sigma_0\,\frac{\omega}{\omega_c}\int\limits_{2\ln(\omega_c/\omega)}^{\infty}x^8\exp(-x)\sqrt{1-\frac{\exp(-x)}{(\omega/\omega_c)^2}}\,dx\times\int\limits_{-\infty}^{\infty}(n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'})-n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}+\hbar\omega))d(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}/\hbar\omega_c) \qquad (19.3)$$

где $\sigma_0 = \pi^2 e^4 \rho_0^2 a^4 \omega_c/(3\kappa) = \pi^2 e^2 \rho_0^2 a^5 \hbar \omega_c^2/6$, $\omega_c = 2I_0/\hbar$, $I_0 = e^2/\kappa a$, $r_\omega = a \ln(\omega_c/\omega)$, $x = 2r_{\lambda\lambda'}/a$, $C_0 = 1/2^4$, $C_2 = 1/2^6$ — численные коэффициенты,

$$n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}) - n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'} + \hbar\omega) = \frac{(1 - \exp(-\omega/(\omega_c\vartheta)))}{\exp(-(\tilde{\varepsilon}^-_{\lambda\lambda'} + \omega/\omega_c + 1/x)/\vartheta) + \exp(-\omega/(\omega_c\vartheta)) + 1 + \exp(\tilde{\varepsilon}^-_{\lambda\lambda'}/\vartheta)} \quad (20)$$

$\vartheta = kT/\hbar\omega_c$, $\tilde{\varepsilon}^-_{\lambda\lambda'} = (\varepsilon^-_{\lambda\lambda'} - \mu)/\hbar\omega_c$; при этом имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \big(n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}) - n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'} + \hbar\omega)\big) d(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}/\hbar\omega_c) = \omega/\omega_c + 1/x$$

для $kT < \hbar\omega$, $e^2/\kappa r_\omega$ [13], (21.1)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \big(n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}) - n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'} + \hbar\omega)\big) d(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}/\hbar\omega_c) \approx \omega/\omega_c$$

для $kT > \hbar\omega$, $e^2/\kappa r_\omega$ [14]. (21.2)

Отметим, что без учета кулоновского взаимодействия электронов, попадающих на изолированные пары центров (слагаемого $e^2/\kappa r_{\lambda\lambda'}$ в (17)), интегрирование по энергии в (15.1)–(15.3) дает $\int_{-\infty}^{\infty} (n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'}) - n_F(\varepsilon^-_{\lambda\lambda'} + \hbar\omega)) d\varepsilon^-_{\lambda\lambda'} = \hbar\omega$; при этом частотная зависимость вещественной части бесфононной проводимости $\sigma_1^{res}(\omega)$ (14) не зависит от температуры и отвечает выражениям (6) при $\omega < \omega_{opt}$ и (5) при $\omega > \omega_{opt}$, т.е. согласуется с выражениями для $\sigma_1^{res}(\omega)$, полученными с учетом кулоновского взаимодействия электронов в парах при высоких температурах $kT > \hbar\omega$, $e^2/\kappa r_{opt}$.

2. Результаты и выводы

Результаты численного расчета частотных зависимостей вещественной части бесфононной проводимости (14) при различных значениях температуры приведены на рис. 1. В случаях низких ($e^2/\kappa r_\omega$, $\hbar\omega > kT$) и высоких ($kT > \hbar\omega$, $e^2/\kappa r_{opt}$) температур результаты расчета $\sigma_1^{res}(\omega, T)$ (14) согласуются, соответственно, с выражениями (3), (6) при низких частотах $\omega < \omega_{opt}$; и с выражением $\sigma_1^{res}(\omega)$ (5) — при высоких частотах $\omega > \omega_{opt}$. Увеличение бесфононной проводимости с понижением температуры при заданной частоте ($\omega < \omega_{opt}$) обусловливается главной ролью кулоновского взаимодействия между электронами в резонансных парах при низких температурах, $e^2/\kappa r_\omega > \hbar\omega > kT$.

На рис. 2 представлены полученные частотные зависимости вещественной части проводимости с учетом резонансного и релаксационного вкладов, $\sigma_1(\omega, T) = \sigma_1^{res}(\omega, T) + \sigma_1^{rel}(\omega, T)$, при различных значениях температуры. Согласно результатам вычислений температурная зависимость высокочастотной проводимости с понижением температуры выходит на насыщение немонотонным образом вследствие разнонаправленности изменений релаксационного и резонансного вкладов в проводимость с изменением температуры (рис. 3);

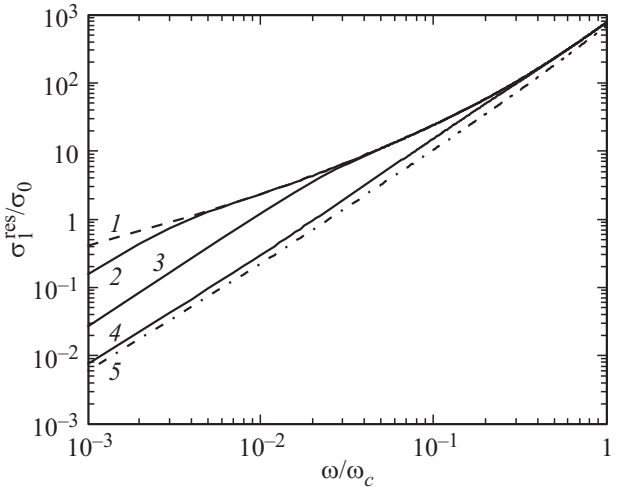


Рис. 1. Частотные зависимости вещественной части бесфононной проводимости $\sigma_1^{res}(\omega, T)$ (14) при различных значениях температуры; кривая *1* — $T = 0$ K ($e^2/\kappa r_\omega$, $\hbar\omega > kT$), кривая *2* — $T = 0.1$ K, кривая *3* — $T = 0.7$ K, кривая *4* — $T = 8$ K, кривая *5* — $kT > \hbar\omega$, $e^2/\kappa r_{opt}$. Кривые *1* и *5* при низких частотах $\omega < \omega_{opt}$ отвечают выражениям (3) и (6), т.е. $\sigma_1^{res}(\omega)$ в этих случаях имеет сублинейный ($s \approx 0.8$) и субквадратичный ($s \approx 1.5$) характер соответственно; при высоких частотах $\omega > \omega_{opt}$ кривые *1* и *5* согласуются с выражением (5) ($s \approx 2$).

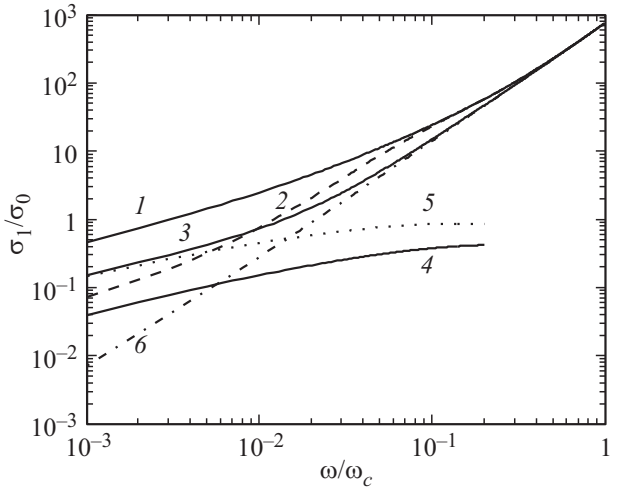


Рис. 2. Частотные зависимости вещественной части проводимости, $\sigma_1(\omega, T) = \sigma_1^{res}(\omega, T) + \sigma_1^{rel}(\omega, T)$, при различных значениях температуры; кривая *1* — $\sigma_1(\omega) \approx \sigma_1^{res}(\omega)$ при $T \approx 0$ K, кривая *2* — $\sigma_1(\omega, T)$ при $T = 2.1$ K, кривая *3* — $\sigma_1(\omega, T)$ при $T = 10$ K, кривая *4* — частотная зависимость релаксационной проводимости $\sigma_1^{rel}(\omega, T)$ при $T \approx 0$ K (7), кривая *5* — частотная зависимость интерполяционного выражения для релаксационной проводимости $\sigma_1^{rel}(\omega, T)$ (9) при $T = 10$ K, кривая *6* — частотная зависимость бесфононной проводимости $\sigma_1^{res}(\omega, T)$ (14) при $T = 10$ K.

так, с понижением температуры при заданной частоте вклад от релаксационной проводимости уменьшается, а от бесфононной проводимости — растет. Приведенные на рисунках результаты расчетов проводимости, отвечают характерным значениям параметров $\omega_c = 10^{13}$ rad/s, $\omega_{ph}/\omega_c = 5$.

Отметим, что в переходной области частот при $\omega < \omega_{cr}$ сублинейность ($s < 1$) частотной зависимости проводимости неупорядоченных полупроводников, вообще говоря, может определяться релаксационной, а не резонансной составляющей. Так, при низких частотах $\omega \ll \omega_c$, отвечающих большим значениям оптимальной длины прыжка $r_\omega > N_d^{-1/3}$, при переходе носителя заряда не на ближайший центр локализации с близкой затравочной энергией, гибридизация с участием состояний промежуточных центров может рассогласовывать уровни энергии в резонансных парах с большим межцентровым расстоянием. Расчет вещественной части бесфононной проводимости с использованием базиса локализованных функций атомного типа, $\langle\psi^-_{\lambda\lambda'}|(\mathbf{n},\mathbf{r})|\psi^+_{\lambda\lambda'}\rangle \approx \langle\psi_\lambda|(\mathbf{n},\mathbf{r})|\psi_{\lambda'}\rangle$,

$$\sigma_1^{res}(\omega) = \pi e^2 \omega \rho_0^2 \iiint d\varepsilon_\lambda d\varepsilon_{\lambda'}, d\mathbf{r}_{\lambda\lambda'} \left|\psi_\lambda|(\mathbf{n},\mathbf{r})|\psi_{\lambda'}\rangle\right|^2 \times (n_F(\varepsilon_\lambda) - n_F(\varepsilon_{\lambda'}))\delta(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'} + \hbar\omega), \quad (22)$$

$$\sigma_1^{res}(\omega) = C_2\sigma_0 \frac{\omega}{\omega_c} \int\limits_0^\infty x^8 \exp(-x)dx \times \int\limits_{-\infty}^{\infty} (n_F(\varepsilon_\lambda) - n_F(\varepsilon_\lambda + \hbar\omega))d\left(\varepsilon_\lambda/\hbar\omega_c\right), \quad (23)$$

дает в области низких температур, $kT \ll \hbar\omega$, $e^2/\kappa r_{opt}$, выражение (4), а в условиях, $kT > \hbar\omega$, $e^2/\kappa r_{opt}$, — выражение (5); при этом частотные зависимости вещественной части бесфононной проводимости $\sigma_1^{res}(\omega)$ (22) во всем исследуемом температурном диапазоне являются суперлинейными ($s > 1$) (рис. 4). В области частот $\omega < \omega_{cr} \sim \omega_{opt}$ расчет бесфононной проводимости с использованием базиса функций атомного типа (в режиме с постоянной длиной прыжка) дает меньшую величину проводимости по сравнению с результатом расчета бесфононной проводимости с использованием базиса из попарно гибридизованных волновых функций (в режиме с переменной длиной прыжка); при этом в области частот $\omega < \omega_{cr}$ сублинейность частотной зависимости проводимости неупорядоченных полупроводников определяется преобладающей релаксационной составляющей (рис. 5). Согласно проведенным расчетам в области частот $\omega \ll \omega_{cr}$ немонотонность температурной зависимости вещественной части проводимости сглаживается; при этом для частот, отвечающим переходной области, немонотонность в поведении $\sigma_1(\omega, T)$, пусть и менее выраженная, остается (рис. 6). Немонотонность температурной зависимости проводимости $\sigma_1(\omega, T)$ в области низких температур обусловливается разнонаправленностью изменений релаксационного и резонансного

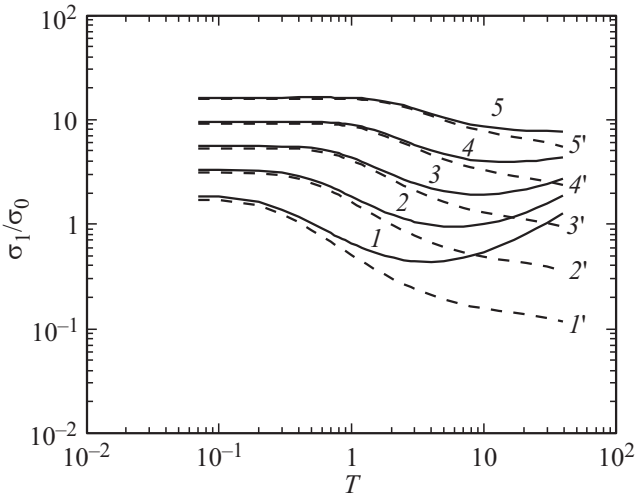


Рис. 3. Температурные зависимости высокочастотной проводимости, $\sigma_1(\omega, T) = \sigma_1^{res}(\omega, T) + \sigma_1^{rel}(\omega, T)$, при различных заданных значениях частоты; кривая *1* — $\omega/\omega_c = 0.007$, кривая *2* —$\omega/\omega_c = 0.014$, кривая *3* — $\omega/\omega_c = 0.025$, кривая *4* — $\omega/\omega_c = 0.043$, кривая *5* — $\omega/\omega_c = 0.071$. Штрихованные номера кривых отвечают температурным зависимостям бесфононного вклада в проводимость, вычисленным при заданных значениях частот.

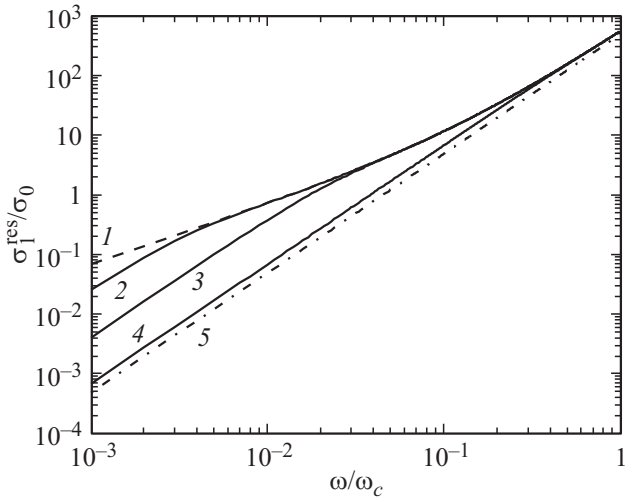


Рис. 4. Частотные зависимости вещественной части бесфононной проводимости $\sigma_1^{res}(\omega, T)$ (22) при различных значениях температуры; кривая *1* — $T = 0$ K ($kT \ll \hbar\omega$, $e^2/\kappa r_{opt}$), кривая *2* — $T = 0.1$ K, кривая *3* — $T = 0.7$ K, кривая *4* — $T = 10$ K, кривая *5* — $kT > \hbar\omega$, $e^2/\kappa r_{opt}$. Кривые *1* и *5* отвечают, соответственно, выражениям (4) и (5).

вкладов в проводимость с изменением температуры, преобладанием бесфононного вклада и главной ролью кулоновского взаимодействия между электронами в парах, дающих вклад в бесфононную проводимость, в области низких температур, $e^2/\kappa r_{opt} > \hbar\omega > kT$.

В некоторых экспериментах на Si:P [9] в области частот 100–500 ГГц была обнаружена суперлинейность ($s > 1$) частотной зависимости вещественной части низ-

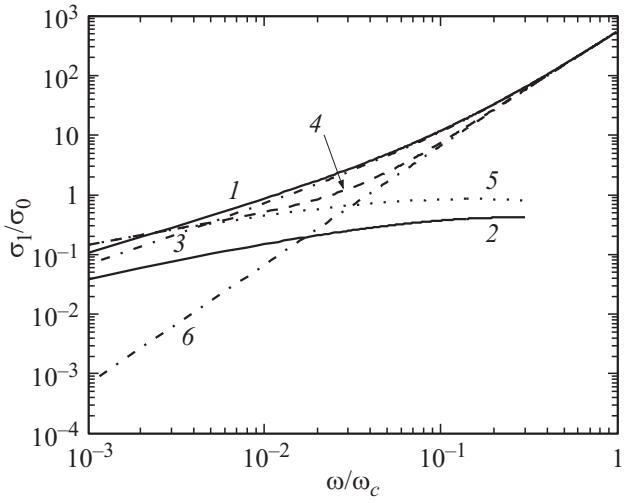


Рис. 5. Частотные зависимости вещественной части проводимости при различных значениях температуры; кривая *1* — $\sigma_1(\omega, T) = \sigma_1^{res}(\omega, T) + \sigma_1^{rel}(\omega, T)$ при $T \approx 0$ K, кривая *2* — частотная зависимость релаксационной проводимости $\sigma_1^{rel}(\omega)$ (7), кривая *3* — частотная зависимость бесфононной проводимости $\sigma_1^{res}(\omega, T)$ (22) при $T \approx 0$ K, кривая *4* — $\sigma_1(\omega, T)$ при $T \approx 10$ K, кривая *5* — частотная зависимость интерполяционного выражения для релаксационной проводимости (9) при $T = 10$ K, кривая *6* — частотная зависимость бесфононной проводимости $\sigma_1^{res}(\omega, T)$ (22) при $T = 10$ K.

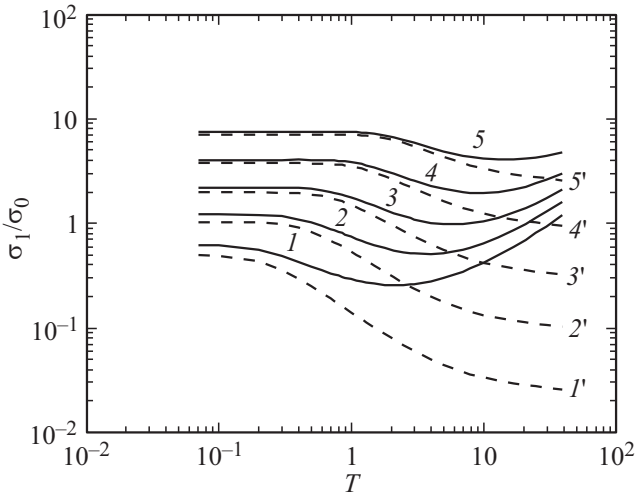


Рис. 6. Температурные зависимости высокочастотной проводимости, $\sigma_1(\omega, T) = \sigma_1^{res}(\omega, T) + \sigma_1^{rel}(\omega, T)$, при различных заданных значениях частоты; кривая *1* — $\omega/\omega_c = 0.007$, кривая *2* — $\omega/\omega_c = 0.014$, кривая *3* — $\omega/\omega_c = 0.025$, кривая *4* — $\omega/\omega_c = 0.043$, кривая *5* — $\omega/\omega_c = 0.071$. Штрихованные номера кривых отвечают температурным зависимостям бесфононного вклада в проводимость (22), вычисленным при заданных значениях частот.

котемпературной проводимости $\sigma_1(\omega)$, которая связывалась с проявлением кулоновской щели в одночастичной плотности состояний, описывающей распределение самосогласованных энергий ε_i взаимодействующих локализованных носителей заряда в основном состоянии системы. Напомним, что мягкая кулоновская щель в одночастичной плотности состояний $\rho(\varepsilon)$ в окрестности уровня Ферми определяется устойчивостью основного состояния системы относительно одноэлектронных переходов. Однако спектр возбуждений, создаваемых при поглощении фотонов при низких температурах, не связан непосредственно с одночастичной плотностью состояний $\rho(\varepsilon)$, описывающей распределение самосогласованных энергий, отвечающих добавлению электрона в основное состояние системы. При переходе энергия конечного состояния φ_f соответствует добавлению электрона в состояние, отличающееся от основного тем, что центр i пуст (занят дыркой); при этом имеем $\varphi_f = \varepsilon_f - e^2/\kappa r_{if}$, $\varphi_i = \varepsilon_i$, где r_{if} — межцентровое расстояние.

Проведенный в [16] расчет низкотемпературной бесфононной проводимости с использованием представлений о самосогласованных энергиях показал, что частотная зависимость бесфононной проводимости имеет вид (4), т. е. согласуется с результатами расчета частотной зависимости низкотемпературной бесфононной проводимости при высоких частотах, когда эффекты гибридизации несущественны и оптимальная длина прыжка r_{opt} не зависит от частоты [13]. Оптимальная длина прыжка r_{opt} отвечает переходам вне кулоновской щели. Экстраполяция результатов стандартного подхода из области почти линейной частотной зависимости проводимости с переменной длиной прыжка на область квадратичной частотной зависимости проводимости с постоянной длиной прыжка отвечает сублинейной частотной зависимости проводимости в области низких частот ($s \approx 0.8$ при $\omega \ll \omega_{cr}$). Таким образом, суперлинейность частотной зависимости проводимости $\sigma_1(\omega)$ в переходной области частот может быть обусловлена переходом от переменной к постоянной (не зависящей от частоты) оптимальной длине прыжка r_{opt}.

Исходя из вышеизложенного, отметим, что для установления особенностей влияния кулоновских эффектов на низкотемпературную высокочастотную проводимость неупорядоченных полупроводников существенное значение имеют данные по ее температурной зависимости в области низких температур.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, А.Г. Забродский. ФТТ **47**, *7*, 1195 (2005).
[2] N.F. Mott. Phil. Mag. **22**, *7* (1970).
[3] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. ЖЭТФ **81**, *1*, 406 (1981). [B.I. Shklovskii, A.L. Efros. JETP **54**, *1*, 218 (1981).]
[4] I.G. Austin, N.F. Mott. Adv. Phys. **18**, *71*, 41 (1969).
[5] A.L. Efros. Phil. Mag. B **43**, *5*, 829 (1981).

[6] 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.
[7] 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.
[8] E. Helgren, N.P. Armitage, G. Grüner. Phys. Rev. B **69**, 014201 (2004). E. Helgren, N.P. Armitage, G. Grüner. Phys. Rev. Lett. **89**, 246601 (2002).
[9] M. Hering, M. Scheffler, M. Dressel, H.V. Lohneysen. Phys. Rev. B **75**, 205203 (2007).
[10] E. Ritz, M. Dressel. Phys. Stat. Sol. (**c**), **5**, 703 (2008).
[11] M. Lee, M.L. Stutzmann. Phys. Rev. Lett. **87**, 056402 (2001).
[12] М.А. Ормонт, И.П. Звягин. ФТП **52**, *2*, 161 (2018). [M.A. Ormont, I.P. Zvyagin. Semicond. **52**, *2*, 150 (2018).] 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).]
[13] М.А. Ормонт, И.П. Звягин. ФТП **54**, *1*, 36 (2020). [M.A. Ormont, I.P. Zvyagin. Semicond. **54**, *1*, 33 (2020).]
[14] М.А. Ормонт, Н.В. Валенко. ФТТ **65**, *7*, 1244 (2023). [M.A. Ormont, N.V. Valenko. Phys. Solid State **65**, *7*, 1192 (2023).]
[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. Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3, Физ., Астрон. **19**, *2*, 57 (2011). [M.A. Ormont. Moscow Univ. Phys. Bull. **66**, *2*, 162 (2011).]

Редактор Ю.Э. Китаев