1990 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 32, № 11
1990 SOLID STATE PHYSICS Vol. 32, N 11

УДК 621.315.592,621.383

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА КИНЕТИКУ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В ОДНОМЕРНЫХ СИСТЕМАХ. МОДЕЛЬ АСИММЕТРИЧНЫХ СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДАНИЙ ПО ЦЕПОЧКЕ С ЛОВУШКАМИ И ПРЕПЯТСТВИЯМИ

А. И. Онипко

Исследуется кинетика спада плотности заряда в случайно разупорядоченной одномерной решетке, состоящей из основных и примесных узлов. Последние играют роль ловушек или отражающих барьеров для носителей заряда.

Получены выражения для вероятности выживания заряженной частицы в сильном и слабом постоянном электрическом поле при быстром и медленном захвате на ловушки. Показано, в частности, что в сильных полях спад плотности заряда является экспоненциальным на временах $t \leqslant K^{-1}$ и описывается зависимостью вида $[\ln(t/T)+\alpha^{-1}](t/T)^{-\alpha}$ ($\alpha \ll 1$, K, T — константы) на бóльших временах, что указывает на аномальное замедление переноса заряда на ловушки.

Проблеме асимметричных случайных блужданий по цепочке с ловушками как модели нестационарного переноса заряда в квазиодномерных структурах с дефектами в присутствии постоянного электрического поля в последние годы уделено значительное внимание [1-5]. Этот интерес связан с возможностью получения точных теоретических результатов и адекватностью модели многим реальным объектам. Так, наблюдаемые особенности кинетики фототока в полимерных кристаллах на основе полидиацетилена, ПДА—1—ОН [6-8], в кристаллах ДНК [9] и некоторые другие эксперименты согласуются с теорией Мовагхара, Полмана, Вюртца [1, 2].

Основная задача теории — расчет вероятности выживания носителя заряда. В цитируемых работах эта величина найдена в предположении, что изменение энергии заряда при смещении в поле на постоянную решетки мало по сравнению с тепловой энергией частицы. Считалось также, что концентрации ловушек и носителей заряда малы, а скорость захвата на ловушки бесконечна. В указанной постановке задачи дискретная (асимметричные случайные блуждания) и континуальная (диффузионный дрейф) модели движения приводят к одинаковым результатам. Случай произвольных концентраций ловушек и произвольных полей на основе управляющих уравнений для дискретной модели рассмотрен в [3]. Основной результат этой работы состоит в нахождении концентрационной и полевой зависимости константы скорости экспоненциального спада вероятности выживания в сильных полях. Более общая модель переноса заряда на ловушки, в которой снято жесткое ограничение на скорость захвата, предложена в [4, 5]. В [5] показано, что сделанные в [1, 2] выводы остаются справедливыми в случае быстрого захвата на ловушки (определение см. в (10)) в широком диапазоне значений скорости захвата. В то же время кинетика спада вероятности выживания и ее зависимость от величины поля и концентрации ловушек при медленном захвате оказались качественно отличающимися от предсказаний теории [1, 2].

В реальных системах наряду с ловушками столь же вероятно присутствие дефектов с противоположным, в известном смысле, действием на переносчики заряда или энергии возбуждения. Имеются в виду рассеивающие центры или барьеры, которые, как и ловушки, запирают частицу в пределах ограниченного отрезка цепочки, кластера, но обеспечивают ее сохранение. Влияние эффекта запирания или клетирование частиц на процесс переноса энергии возбуждения от основного вещества на ловушки наблюдалось в ряде квазиодномерных кристаллов [10-13]. Количественное его описание в рамках модели симметричных случайных блужданий по цепочке с ловушками и барьерами (идеально отражающими) дано в [14, 15].

Учет обусловленной полем асимметрии скоростей прыжков носителей заряда может привести к специфическим особенностям временного поведения вероятности выживания. В частности, в [4] предсказан эффект аномального замедления сильным электрическим полем захвата частиц на ловушки в присутствии барьеров. Качественно этот вывод подтвержден и в данной работе, однако конкретный вид зависимости, описывающий поведение плотности заряда на больших временах, существенно отличается от результата [4]. Детальное обсуждение этого расхождения представлено в конце статьи, где резюмируются оригинальные результаты. В основной ее части для случаев быстрого и медленного захвата получены аналитические выражения вероятности выживания на всем временном интервале в слабых и сильных полях. При этом, как и в [4, 5], не использовалась модель бесконечно быстрого захвата и, более того, не накладывается ограничений на величину электрического поля.

Вероятность выживания: общее выражение и предельные зависимости

Рассмотрим модель трехкомпонентной случайно разупорядоченной цепочки, состоящей из основных узлов и узлов, занятых ловушками и барьерами. Предполагается, что движение частиц может происходить только по основным узлам, образующим четыре типа кластеров: с двумя ловушками на границах, обозначаемых далее (tr, tr); с двумя барьерами — (b, b); с ловушкой на левой границе и барьером на правой — (tr, b); и наоборот — (b, tr).

Для описания динамики носителя заряда в любом из перечисленных типов кластеров введем скорости прыжков $W^{\pm}=W\exp(\pm\eta)$ вдоль (+) и против (—) приложенного поля с напряженностью E, $\eta=eEa/2\Theta$, e — величина заряда, a — постоянная решетки, Θ — тепловая энергия частицы. Скорости поглощения частицы на граничных узлах кластера, первом и n-м, обозначим ω_1 и ω_n. В принятых обозначениях уравнения, определяющие вероятность нахождения частицы на r-м узле кластера в момент времени $\tau=Wt$, $G_{r,r_0}(\tau)$ при условии, что в начальный момент она находилась на узле r_0, для любого из кластеров цепочки имеют вид

$$\frac{dG_{r,r_0}(\tau)}{d\tau}=\sum_{r'=1} L_{r,r'}G_{r',r_0}(\tau), \tag{1}$$

$$G_{r,r_0}(0)=\delta_{r,r_0}, \quad r,\ r_0 \in \overline{1,\ n}, \tag{2}$$

где

$$\begin{gathered} -L_{1,1}=\exp(\eta)+\omega_1/W, \quad -L_{n,n}=\exp(-\eta)+\omega_n/W, \\ -L_{r,r}=2\operatorname{ch}(\eta), \quad L_{r,r+1}=\exp(-\eta), \quad L_{r-1,r}=\exp(\eta), \\ r\in\overline{2,\ n-1}\quad L_{r,r'}=0, \quad |r-r'|\geqslant 2. \end{gathered} \tag{3}$$

Решение (1), (2) описывает случайные блуждания по ограниченной цепочке заряженной частицы в постоянном внешнем поле при произвольных скоростях поглощения (исчезновения) частицы на граничных узлах.

В различных кластерах рассматриваемой модели эти скорости принимают следующие значения

$$\omega_1 = \omega W^-, \quad \omega_n = \omega W^+ - (\mathrm{tr},\ \mathrm{tr}),$$

$$\omega_1 = \omega W^-, \quad \omega_n = 0 - (\mathrm{tr},\ \mathrm{b}),$$

$$\omega_1 = 0, \quad \omega_n = \omega W^+ - (\mathrm{b},\ \mathrm{tr}),$$

$$\omega_1 = \omega_n = 0 - (\mathrm{b},\ \mathrm{b}), \tag{4}$$

где ω — отношение скорости прыжка частицы с основного узла на узел, занятый ловушкой, к скорости прыжка между основными узлами в отсутствие поля.

Фототок (к исследованиям кинетики которого прежде всего адресуются наши результаты), интенсивность люминесценции и другие наблюдаемые величины прямо связаны со средней вероятностью выживания носителей заряда, движение которых в условиях быстрой поперечной релаксации и малой плотности носителей описывается управляющими уравнениями (1). Усреднение необходимо проводить как по случайному распределению дефектов в цепочке, так и по начальному положению частицы на основных узлах, которое здесь предполагается равновероятным. Дефекты случайно разупорядоченной цепочки, т. е. узлы, играющие роль ловушек и барьеров для движущихся частиц, в соответствии с (4) изолируют кластеры из основных узлов друг от друга, так что частица не может покинуть кластер, в котором она находилась в начальный момент времени. Независимость движения носителей в кластерах позволяет существенно упростить обычно весьма сложную процедуру конфигурационного усреднения, сведя ее к усреднению по длинам кластеров.

Обозначив концентрацию ловушек c_{tr}, концентрацию барьеров c_{b}, суммарную концентрацию дефектов $c = c_{\mathrm{tr}} + c_{\mathrm{b}}$, так что $1 - c = c_h$ — концентрация основных узлов, для средней (усредненной дважды в указанном смысле) вероятности выживания можем написать [14]

$$\Delta\Omega(t) \equiv \langle\Omega(t)\rangle - \langle\Omega(\infty)\rangle = c_{\mathrm{tr}}^2/c^2 \langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\ \mathrm{tr})} +$$

$$+ c_{\mathrm{tr}} c_{\mathrm{b}}/c^2 \left(\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\ \mathrm{b})} + \langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{b},\ \mathrm{tr})}\right), \tag{5}$$

где частичные средние, относящиеся к различным типам кластеров, определены так

$$\langle\Omega(t)\rangle^{\nu} = c^2 \sum_{n=1}^{\infty} n (1 - c)^{n-1} \Omega_n^{\nu}(t), \tag{6}$$

$$\Omega_n^{\nu}(t) = n^{-1} \sum_{r,\ r_0=1}^{n} G_{r,\ r_0}^{\nu}(\tau), \quad \nu = (\mathrm{tr},\ \mathrm{tr}),\ (\mathrm{tr},\ \mathrm{b}),\ (\mathrm{b},\ \mathrm{tr}), \tag{7}$$

что $\langle\Omega(0)\rangle^{\nu} = 1$. В частности, $\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\ \mathrm{tr})}$ есть не что иное, как вероятность выживания частицы в цепочке с хаотически распределенными ловушками, которая рассматривалась в [1-5].

Формулы (5), (6) достаточно прозрачны. Весовой множитель $c_{\mathrm{tr}}^2 (1-c)^{n-1}$ имеет смысл вероятности того, что выбранный наудачу кластер из их совокупности, содержащейся во всех неэквивалентных конфигурациях трехкомпонентной цепочки, состоит из n основных узлов и ограничен с двух сторон ловушками. Аналогичный смысл имеет множитель $c_{\mathrm{tr}} c_{\mathrm{b}} (1-c)^{n-1}$, относящийся к кластерам типа (tr, b) и (b, tr), а также $c_{\mathrm{b}}^2 (1-c)^{n-1}$. Слагаемым в (5), содержащим последний весовой множитель, учитывается вклад от кластеров (b, b), для которых $\Omega_n^{(\mathrm{b},\ \mathrm{b})}(t) = 1$, что обеспечивает конечный предел вероятности выживания на бесконечности

$$\langle\Omega(\infty)\rangle = c_{\mathrm{b}}^2/c^2. \tag{8}$$

Равенство (5) получено путем точной редукции конфигурационного среднего к усреднению по длинам кластеров. Процедура редукции для конечной и бесконечной случайно разупорядоченной цепочки из произвольного числа компонент предложена в [16]. Для определения средней вероятности выживания частицы, совершающей симметричные случайные блуждания в трехкомпонентной цепочке, формула (5) использовалась в [14–15]. Такая же задача решалась и в [17], где, однако, весовые множители выбраны некорректно (см. (6а)—(6с) из [17]).

В соответствии с (5) необходимо найти вероятности выживания в кластерах (7) и вычислить фигурирующие в (6) суммы. Для получения нужного выражения вероятности выживания в кластерах в (7) следует использовать решение (1), (2), в котором значения ω_1, ω_n выбраны в соответствии с (4). Эта задача решается точно в пространстве Лаплас-образов. Суммируя функцию Грина $\tilde{G}^{\nu}_{r,r_0}(s)=\int\limits_0^{\infty}\exp(-s\tau)\,G^{\nu}_{r,r_0}(\tau)\,d\tau$ по r и r_0, получим

$$\tilde{\Omega}_n^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})}(s)=s^{-1}-\omega/ns^2\times$$
$$\times\frac{Q_{n+1}(\xi)-s\,\mathrm{sh}\,((n+1)\,\xi)+(\omega-1)\,[Q_{n-1}(\xi)+s\,\mathrm{sh}\,((n-1)\,\xi)]}{\left[s\left(1-\omega+\dfrac{\omega^2}{2}\right)+\omega^2\,\mathrm{ch}\,(\eta)\right]\mathrm{sh}\,(n\xi)+\omega\,(2-\omega)\,\mathrm{sh}\,(\xi)\,\mathrm{ch}\,(n\xi)},$$

где

$$Q_n(\xi)=4\,\mathrm{sh}\,(\xi)\,\mathrm{sh}\left(\frac{n}{2}(\xi+\eta)\right)\mathrm{sh}\left(\frac{n}{2}(\xi-\eta)\right),$$

$$\exp(\pm\xi)=s/2+\mathrm{ch}\,(\eta)\pm\sqrt{(s/2+\mathrm{ch}\,(\eta))^2-1},\tag{9а}$$

$$\tilde{\Omega}_n^{(\mathrm{tr},\mathrm{b})}(s)=s^{-1}-\omega/ns^2\times$$
$$\times\frac{\exp(-\eta)\,\mathrm{sh}\,((n+1)\,\xi)-2\,\mathrm{sh}\,(n\xi)+\exp(\eta)\,\mathrm{sh}\,((n-1)\,\xi)+2\exp(-n\eta)\,\mathrm{sh}\,(\eta)\,\mathrm{sh}\,(\xi)}{\mathrm{sh}\,((n+1)\,\xi)-\exp(\eta)\,\mathrm{sh}\,(n\xi)+\exp(-\eta)\,(\omega-1)\,[\mathrm{sh}\,(n\xi)-\exp(\eta)\,\mathrm{sh}\,((n-1)\,\xi)]},\tag{9б}$$

$$\tilde{\Omega}_n^{(\mathrm{b},\,\mathrm{tr})}(s)=\tilde{\Omega}_n^{(\mathrm{tr}\text{-}\,\mathrm{b})}(s)\,|_{\eta\to-\eta}.\tag{9в}$$

Равенствами (9) совместно с (5)—(7) определяется точное выражение средней вероятности выживания в пространстве Лаплас-образов, удобное для проведения численных расчетов. В некоторых частных случаях зависимость $\Delta\Omega\,(t)$ можно получить в аналитическом виде, что позволяет проследить основные особенности кинетики спада плотности носителей заряда в цепочке с ловушками и барьерами.

Рассмотрим вначале случай слабых полей $\eta\ll c$, предполагая везде в дальнейшем, что концентрация дефектов мала. Расчет $\langle\Omega\,(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})}$ и $\langle\Omega\,(t)\rangle^{(\mathrm{b},\,\mathrm{tr})}$ аналогичен проведенному в [5], где показано, что при быстром захвате

$$\omega\gg c\tag{10}$$

вероятность выживания частицы в цепочке с ловушками определяется равенством

$$\langle\Omega\,(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})}\equiv\exp(-\eta^2\tau)\,F\,(\tau_1)=\frac{4\exp(-\eta^2\tau)}{\pi^2}\int\limits_0^{\infty}dx\,\frac{x\exp(-\tau_1/2x^2)}{\mathrm{sh}\,(x)}=\tag{11}$$

$$=16/\pi\sqrt{\frac{\tau_1}{6\pi}}\exp\left(-\eta^2\tau-\frac{3}{2}\tau_1^{1/3}\right)\left(1+\frac{17}{18}\tau_1^{-1/3}+\frac{205}{648}\tau_1^{-2/3}\right),\ \langle\Omega\,(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})}\leqslant 0.5,\tag{11а}$$

где $\tau_1=2\pi^2c^2\tau$. Используя ту же схему расчета, нетрудно показать, что

$$\langle\Omega\,(t)\rangle^{(\mathrm{b},\,\mathrm{tr})}=\exp(-\eta^2\tau)\,F\,(\tau_1/4).\tag{12}$$

Подчеркнем, что приведенная в (11а) оценка интеграла, практически совпадающая с точной зависимостью уже при $\langle\Omega\,(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})}\leqslant 0.5$, получена при учете в $\Omega_n^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})}(t)$ только вклада от наименьшего по абсолютной величине полюса Лаплас-образа $\tilde{\Omega}_n^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})}(s)\doteqdot\Omega_n^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})}(t)$.

Если выполняется противоположное (10) неравенство (т. е. при медленном захвате на ловушки), то на временах $\tau_2=2c\,\omega\tau\ll\pi^2c^2/\omega^2$

$$\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})}=2\tau_2 K_2(2\sqrt{\tau_2})\exp(-\eta^2\tau),\tag{13}$$

$$\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{b},\,\mathrm{tr})}=\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{b})}=\tau_2 K_2(\sqrt{2\tau_2})\exp(-\eta^2\tau),\tag{14}$$

где $K_2(\tau)$ — функция Бесселя второго рода. При $\tau_2\gg\pi^2c^2/\omega^2$ зависимости (13), (14) сменяются на (11), (12) соответственно [14, 15]. Возникновение приведенных в (13), (14) промежуточных асимптотик обусловлено вкладом в частичные средние от тех кластеров (tr, tr) и (b, tr), в которых спад вероятности выживания контролируется скоростью захвата

$$\Omega_n^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})}(t)=\exp\left(-2\frac{\omega\tau}{n}\right),$$

$$\Omega_n^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{b})}(t)=\Omega_n^{(\mathrm{b},\,\mathrm{tr})}(t)=\exp\left(-\frac{\omega\tau}{n}\right),\quad \omega n,\ \eta n\ll 1.\tag{15}$$

При нахождении частичного среднего по кластерам (tr, b) необходимо учесть, что в сколь угодно слабом поле всегда существует обусловленная флуктуациями плотности дефектов доля кластеров, для которых выполняется условие $n\eta\gg 1$. Нетрудно показать, что для таких кластеров Лаплас-образ (9б), как функция комплексной переменной s, имеет выделенный малый по абсолютной величине полюс

$$s_{\min}=-T^{-1}\exp(-2\eta n),\quad T^{-1}=\frac{2\omega\,\mathrm{sh}(\eta)}{1+\omega\exp(-\eta)/2\,\mathrm{sh}(\eta)}.\tag{16}$$

В этом случае

$$\Omega_n^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{b})}(t)=\exp\left[-\frac{\tau}{T}\exp(-2\eta n)\right],\quad n\eta\gg 1.\tag{17}$$

При $\eta\ll 1$ выражение (17) с точностью до обозначений совпадает с аналогичным результатом из [4].

Оценка вклада в $\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{b})}$ от кластеров, в которых вероятность выживания частицы определяется равенством (17), дается интегралом

$$\Phi_\alpha(\tau)\equiv\int\limits_{2\alpha}^{\infty}dx\,x\exp\left[-x-\frac{\tau}{T}\exp\left(-\frac{x}{\alpha}\right)\right],\tag{18}$$

при $\tau\gg T\alpha$

$$\Phi_\alpha(\tau)=\alpha\Gamma(1+\alpha)\frac{\ln\left(\frac{\tau}{T}\right)-\Psi(\alpha)}{(\tau/T)^\alpha},\tag{18а}$$

где $\alpha=c/2\eta$, $\Gamma(\alpha)$ — гамма-функция, $\Psi(\alpha)=\frac{d\ln\Gamma(\alpha)}{d\alpha}$.

В рассматриваемом случае слабых полей вместо асимптотики (18а), справедливой при любых α, удобней использовать выражение

$$\Phi_\alpha(\tau)=\alpha\Gamma(1+\alpha)\frac{\ln(\tau/\alpha T)+(2\alpha)^{-1}}{(\tau/T)^\alpha},\tag{18б}$$

где с учетом использованных при выводе (18б) ограничений на параметры $T^{-1}=4\eta^2$.

Неравенство $\tau\gg T\alpha$ эквивалентно $\tau_1\gg(\pi c/\eta)^3$. На временах $\tau_1\ll\ll(\pi c/\eta)^3$ зависимость $\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{b})}$ совпадает с $\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{b},\,\mathrm{tr})}$. Таким образом, частичное среднее по кластерам (tr, b) можно представить в виде суперпозиции (18) и (в зависимости от величины ω) (12) или (14)

$$\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{b})}=\Phi_\alpha(\tau)+\exp(-\eta^2\tau)\begin{cases}F(\tau_1/4), & \omega\gg c,\\ \left.\begin{array}{ll}\tau_2K_2(\sqrt{2\tau_2}), & \tau_2\ll\pi^2c^2/\omega^2,\\ F(\tau_1/4), & \tau_2\gg\pi^2c^2/\omega^2\end{array}\right\} & \omega\ll c,\end{cases}\tag{19}$$

причем заметных отклонений аппроксимации (19) от точной зависимости можно ожидать только на временах $\tau_1 \sim (\pi c/\gamma_i)^3$ во временном интервале того же порядка.

Объединяя результаты (11)—(14) и (19) для средней вероятности выживания частицы, получим при $\eta \ll c$

$$\Delta\Omega(t) = \exp(-\eta^2\tau)\,\Delta\Omega_{\eta=0}(t) + \Phi_\alpha(\tau), \tag{20}$$

где $\Delta\Omega_{\eta=0}(t)$ — решение задачи в нулевом поле, определяемое приведенными выше равенствами.

Рассмотрим теперь случай сильных полей $\eta \gg c$. При $\omega \gg c$, как известно [1-3, 5], вычисление $\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})}$ связано с учетом вкладов от всех полюсов Лаплас-образа (9а). В [5] расчет проводился обращением Лаплас-образа усредненной вероятности выживания, полученного в диффузионном приближении при $\eta \ll 1$. Этот же метод пригоден и для расчета частичных средних по кластерам (tr, tr), (b, tr) в дискретной модели (но при малых c) без ограничений на параметр η. Опуская промежуточные вычисления, которые аналогичны проведенным в [5], приведем окончательный результат при $\eta \gg c$

$$\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})} = \langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{b},\,\mathrm{tr})} = \exp(-2c\,\mathrm{sh}(\eta)\,\tau). \tag{21}$$

Равенство (21) соответствует главному слагаемому разложения для $\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})}$, полученному в [3] методом изображений. Как и ожидалось, зависимости $\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})}$ и $\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{b},\,\mathrm{tr})}$ в этом приближении [достаточно точно описывающим поведение частичных средних на временах $\tau \gg (2c\,\mathrm{sh}(\eta))^{-1}$] оказались совпадающими. Для $\eta \ll 1$ результат (21) впервые получен в [1, 2].

При медленном захвате ($\omega \ll c$) основной вклад в частичные средние $\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})}$, $\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{b},\,\mathrm{tr})}$ обусловлен теми кластерами, для которых Лаплас-образы вероятности выживания (9а), (9в) имеют полюс

$$s'_{\min} = -2\omega\,\mathrm{sh}(\eta), \tag{22}$$

существующий при $n\omega \ll 1$ и $n\eta \gg 1$. В этом случае

$$\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})} = \langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{b},\,\mathrm{tr})} = \exp(-2\omega\,\mathrm{sh}(\eta)\,\tau). \tag{23}$$

Приведенное равенство для $\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})}$ представляет решение задачи для цепочки с ловушками без препятствий и обобщает результат [4, 5], полученный ранее для $\eta \ll 1$.

Вне зависимости от скорости захвата, частичное среднее по кластерам (tr, b) при $\eta \gg c$ определяется выражением

$$\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{b})} = \Phi_0(\tau) = \int\limits_0^\infty dx\,x \exp\left[-x - \frac{\tau}{T}\exp(-x/a)\right], \tag{24}$$

при $\tau \gg T$

$$\Phi_0(\tau) = a\Gamma(a+1)\frac{\ln(\tau/T) + a^{-1} + 0.5772}{(\tau/T)^a}. \tag{24a}$$

Таким образом, в сильных полях при $\eta \gg c$

$$\Delta\Omega(t) = (c_{\mathrm{tr}}/c)\,\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})}_{\eta\gg c} + \frac{c_{\mathrm{tr}}c_{\mathrm{b}}}{c^2}\,\Phi_0(\tau), \tag{25}$$

где

$$\langle\Omega(t)\rangle^{(\mathrm{tr},\,\mathrm{tr})}_{\eta\gg c} = \begin{cases} \exp(-2c\,\mathrm{sh}(\eta)\,\tau), & \omega \gg c, \\ \exp(-2\omega\,\mathrm{sh}(\eta)\,\tau), & \omega \ll c, \end{cases} \tag{26}$$

а T определено в (16).

Обсуждение результатов

В рассмотренной модели характер временной зависимости усредненной вероятности выживания достаточно сложным образом связан с величиной приложенного поля, а также собственными параметрами системы. Поскольку полученные результаты могут быть использованы для интерпретации экспериментальных данных, например по измерению фототока в квазиодномерных кристаллах, представляется целесообразным перечислить основные количественные и качественные предсказания теории.

В сильных полях $\eta \gg c$ закон спада вероятности выживания близок к экспоненциальному, $\exp(-K\tau)$, $\tau \lesssim K^{-1}$, в интервале значений $\langle\Omega(t)\rangle = 1 - \left(1 - \frac{c_{tr}}{c}\right)$. Константа скорости определяется равенствами

$$K = \begin{cases} 2c\,\mathrm{sh}(\eta), & \omega \gg c, \\ 2\omega\,\mathrm{sh}(\eta), & \omega \ll c. \end{cases} \tag{27}$$

В интервале от $1 - c_{tr}/c$ до предельного значения c_b^2/c^2 закон спада при произвольной скорости захвата определяется выражением (24), причем логарифмически-степенная асимптотика пригодна уже при весьма малом отличии $\langle\Omega(t)\rangle^{(tr, b)}$ от 1.

Обратим внимание на следующее обстоятельство. Если при $c_b = 0$ измерение полевой зависимости константы экспоненциального спада не позволяет отличить друг от друга случаи быстрого и медленного захвата, так как зависимости $K(\eta)$ одинаковы (см. (27)), то при $c_b \neq 0$ по характеру зависимости $T(\eta)$ в этом отношении можно сделать вполне однозначный вывод. Существенно, что измерение $T(\eta)$ доступно уже при малой глубине спада $\Delta\Omega(t)$, если концентрации ловушек и препятствий сравнимы по величине. Например, при $c_b = c_{tr}$ кинетика спада плотности носителей заряда до значения 0.5 от начальной будет происходить экспоненциально быстро. Затем последует стадия аномально медленного уменьшения $\Delta\Omega(t)$, которая полностью описывается зависимостью (24а).

В [4] асимптотика вероятности выживания получена в виде $\Delta\Omega(t) \sim (\tau/T)^{-\alpha}$. Отсутствие логарифмического множителя (весьма существенно при малых α) связано с отличием использованной в [4] формулы усреднения (отсутствует множитель x в подынтегральной функции (24)). Кроме того, временной масштаб T, приведенный в [4] только для случаев $\eta \ll \omega$, $\eta \gg \omega$, имеет иную зависимость от поля ($T^{-1} \sim \eta^3$ и $T^{-1} \sim \eta^2$, формулы (109) и (111) из [4] соответственно) и, по непонятной для нас причине, зависит от концентрации дефектов.

В слабых полях ($\eta \ll c$) зависимость вероятности выживания от времени для случаев быстрого и медленного захвата различается качественно. При $\omega \gg c$ в соответствии с (20) могут наблюдаться смены законов спада в последовательности (с увеличением времени)

$$\Delta\Omega(t) \sim J_1(t) \to J_2(t) \to J_3(t),$$

$$J_1(t) \sim c_{tr}^2 \exp\left(-\frac{3}{2}\tau_1^{1/3}\right) + 2c_{tr}c_b \exp\left(-\frac{3}{2}(\tau_1/4)^{1/3}\right),$$

$$J_2(t) \sim \exp(-\eta^2\tau), \quad J_3 \sim \frac{\ln(\tau/\alpha T)}{(\tau/T)^{\alpha}}. \tag{28}$$

В случае медленного захвата ($\omega \ll c$) следует ожидать

$$\Delta\Omega(t) \sim J(t) \to J_1(t) \to J_2(t) \to J_3(t),$$

$$J(t) \sim c_{tr}^2 \exp(-2\sqrt{\tau_2}) + c_{tr}c_b \exp(-\sqrt{2\tau_2}) \tag{29}$$

при $\eta \ll \omega$ и

$$\Delta\Omega(t) \sim J(t) \to J_2(t) \to J_3(t) \tag{30}$$

при $\eta \gg \omega$ (но $\eta \ll c$).

При определенных соотношениях между концентрациями ловушек и барьеров зависимость $J_2(t)$ в последовательностях (28)—(30) может отсутствовать.

При произвольных значениях параметров системы (кроме $c_b=0$) и величине поля асимптотика вероятности выживания имеет вид

$$\Delta\Omega(t) \sim \frac{\ln(\tau/T) - \Psi(\alpha)}{|(\tau/T)^{\alpha}} . \qquad (31)$$

Глубина спада плотности носителей заряда $\langle\Omega(t)\rangle/\langle\Omega(0)\rangle$, начиная с которой возможно наблюдение зависимости (31), определяется γ_l/c и c_b/c_{tr}. Эта величина максимальна в сильных полях и составляет $(1-c_{tr}/c)$. Доля носителей заряда, исчезновение которых описывается законом (31), равна $1-c_{tr}/c-c_b^2/c^2$.

Асимптотика (31) имеет место для системы любой размерности d, если концентрация c_b превышает перколяционный порог (основные узлы образуют замкнутые, изолированные друг от друга области), и в этом смысле является универсальной. Однако ясно, что переход к асимптотическому закону спада при $d \geqslant 2$ и в сильных полях не будет столь резким, как при $d \approx 1$. Вопросы определения доли частиц, кинетика гибели которых описывается зависимостью (31), и времени ее включения для систем большей размерности остаются открытыми.

Список литературы

[1] Movaghar B., Pohlmann B., Würtz D. // Phys. Rev. A. 1985. V. 31. N 13. P. 1568—1570.
[2] Movaghar B., Würtz D., Pohlmann B. // Z. Phys. B. 1987. V. 66. N 7. P. 523—535.
[3] Aldea A., Dulea M., Gartner P. // J. St. Phys. 1988. V. 52. N 3/4. P. 1061—1068.
[4] Бурлацкий С. Ф., Иванов О. Ф. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. № 8. С. 331—350.
[5] Onipko A. I., Zozulenko I. V. // J. Phys. Cond. Matter. 1989. V. 1. N 49. P. 9875—9891; ФТТ. 1990. Т. 32. № 5. С. 1433—1440.
[6] Hunt I. G., Bloor D., Movaghar B // J. Phys. C. 1983. V. 16. N 18. P. L623—628; 1985. V. 18. N 8. P. 3497—3509.
[7] Rughoopth S. D., Bloor D., Phillips D. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 15. P. 8103—8112.
[8] Seiferheld V., Bâssler B., Movaghar B. // Phys. Rev. Lett. 1983. V. 51. N 9. P. 813—816.
[9] Magan J. D., Blau W., Croke D. T., McConnel D. J., Kelly J. M. // Chem. Phys. Lett. 1987. V. 141. N 6. P. 489—492.
[10] Dlott D. D., Fayer M. D., Wieting R. D. // J. Chem. Phys. 1978. V. 69. N 6. P. 2752—2762.
[11] Карачевцев В. А. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 5. С. 1400—1407.
[12] Auerbach R. A., McPherson G. L. // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. N 10. P. 6815—6820.
[13] Knochenmuss R., Güdel H. V. // J. Chem. Phys. 1987. V. 11. N 4. P. 1104—1113.
[14] Онипко А. И. // ТЭХ. 1988. Т. 24. № 1. С. 8—13.
[15] Onipko A. I., Malysheva L. I., Zozulenko I. V. // Chem. Phys. 1988. V. 121. N 1. P. 99—114.
[16] Onipko A. I. Preprint. 1986. ITP—86—58E.
[17] Parris P. E. // Phys. Lett. A. 1987. V. 125. N 5. P. 262—266.

Институт теоретической физики
АН УССР Киев

Поступило в Редакцию
24 апреля 1990 г.