

Влияние кулоновской корреляции на прыжковую проводимость

© В.Д. Каган

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: victor kagan @ pop.rssi.ru

(Поступила в Редакцию 14 сентября 1999 г.)

Для прыжковой проводимости нужно использовать полное квантово-статистическое описание пары узлов, между которыми происходит прыжок электрона. Это описание включает двухзарядный уровень энергии, причем энергия увеличена кулоновским отталкиванием зарядов. Учет этого уровня изменяет числа заполнения однозарядных состояний, существенных в прыжковой проводимости. Такое косвенное влияние кулоновского отталкивания называется кулоновской корреляцией. Она приводит к модификации закона Мотта в случае проводимости с переменной длиной прыжка. Для этой модификации понятие кулоновской щели не требуется.

Работа поддержана грантами РФФИ (№ 96-15-97268 и 97-02-18286).

При низких температурах в компенсированных полупроводниках проводимость осуществлялась прыжками электронов с заполненных доноров на пустые, число которых равно числу акцепторов. Эти прыжки описываются не классическими прыжками частицы из одной потенциальной ямы в другую, а квантовым туннелированием между двумя состояниями пары доноров, содержащих один электрон. Энергии электронов, находящихся на донорах с координатами r_i и r_j , имеют случайный разброс в широком интервале и, вообще говоря, не совпадают ($\varepsilon_i \neq \varepsilon_j$), поэтому невозможно туннелирование электрона без участия фононов, энергия которых должна компенсировать разность электронных энергий. Квантовое описание процесса перескока дано в известной статье Миллера и Абрахамса [1], являющейся исходной точкой всех теорий прыжковой проводимости. В этой статье была вычислена вероятность перескока, имеющая естественную экспоненциальную зависимость на расстояниях, заметно превышающих радиус локализации электрона на доноре a .

$$w_{ij} = w_{ij}^0 \exp\left(-2\frac{r_{ij}}{a}\right), \quad (1)$$

где $r_{ij} = |r_i - r_j|$.

Вероятность w пропорциональна квадрату интеграла перекрытия $J_{ij} = J_0 \exp(-r_{ij}/a)$.

Однако статистическое описание пары уровней, между которыми происходит переход, в [1] не вполне удовлетворительно, и основной целью данной статьи является исправление этого недостатка. Из-за наличия интеграла перекрытия в паре доноров происходит коллективизация одноэлектронных уровней с энергиями ε_i и ε_j , в результате чего энергии принимают значения

$$E_{1,2} = \frac{\varepsilon_i + \varepsilon_j}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_j}{2}\right)^2 + J_{ij}^2}. \quad (2)$$

Как заметили Эфрос и Шкловский [2], в этой двухцентровой системе, кроме одноэлектронных уровней, имеются еще два уровня: уровень, в котором нет электронов с ну-

левой энергией, и двухэлектронный уровень с энергией

$$E_3 = \varepsilon_i + \varepsilon_j + \frac{e^2}{kr_{ij}} = E_1 + E_2 + \frac{e^2}{kr_{ij}}. \quad (3)$$

Здесь e — заряд электрона, а k — статическая диэлектрическая проницаемость полупроводника. Все четыре уровня должны быть учтены в статистическом описании заполнения в двухцентровой системе, и эта статистика существенно отличается от фермиевской. Исходя из обычного равновесного экспоненциального выражения для вероятности заполнения уровней и требования нормировки вероятности, для равновесных чисел заполнения получаем

$$n_s^{(0)} = A^{-1} \exp[(\mu - E_s)/T]. \quad (4)$$

Нормировочный множитель A равен

$$A = 1 + \exp[(\mu - E_1)/T] + \exp[(\mu - E_2)/T] + \exp[(2\mu - E_3)/T]. \quad (5)$$

Здесь T — температура в энергетических единицах. Отметим, что для состояний E_1 и E_2 , в которых имеется только один электрон и не может быть никакого кулоновского отталкивания, из-за условия нормировки проявляется увеличение чисел заполнения по сравнению с гипотетическим случаем электронов, не имеющих электрического заряда. Это и есть кулоновская корреляция, открытая в [2]. Химический потенциал μ определяется усредненной задачей и для выделенной пары уровней является независимым параметром.

Обсудим, насколько правомерно включать энергию кулоновского отталкивания в энергию двухэлектронного третьего уровня, хотя энергии электрона на узле i определены самосогласованно с учетом воздействия со стороны электронов на всех других узлах. Это, конечно, можно делать в модели аморфного полупроводника, когда случайные значения энергии ε_i обусловлены флуктуациями расположения атомов в узлах решетки и валентными силами некулоновской природы. Можно думать, однако,

что выражение (3) для энергии двухэлектронного уровня правильно и в модели классической примесной зоны, когда случайные значения ε_i обусловлены именно кулоновскими взаимодействиями со всеми зарядами полупроводника, и использование этого выражения не производит двойного учета кулоновского взаимодействия между электронами на узлах i и j . Все расчеты ведутся в термодинамическом пределе, при этом как полный объем проводника, так и число любых примесей стремятся к бесконечности, а конечной считается их отношение, т.е. концентрация примесей. При этом вклад одной выделенной примеси j в величину ε_i пренебрежимо мал. Математически это выражается в том, что конечный вклад в ε_i дает интеграл от концентрации всех примесей, вклад в который от данной примеси — бесконечно малая величина. Вклад же кулоновского отталкивания в энергию двух выделенных примесей вполне конечен.

Процесс перескока описывается как баланс переходов между уровнями E_1 и E_2 с испусканием w_e или поглощением w_a фонона

$$w_a = w_{ij}N(E_2 - E_1), \quad w_e = w_{ij}[N(E_2 - E_1) + 1],$$

$$N(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\varepsilon/T} - 1}. \quad (6)$$

Здесь $N(E)$ — равновесная функция распределения Планка для фононов.

Дальнейшее изложение следует схеме статьи [1], модифицированной использованием парной статистики. Ток I_{ij} включает разность переходов между уровнями E_1 и E_2

$$I_{ij} = er_{ij}(w_a n_1 - w_e n_2). \quad (7)$$

В равновесии, как и следовало ожидать, ток равен нулю. При наличии электрического поля E в выражении для тока (6) возникают два изменения. Во-первых, в выражениях для вероятностей энергия электрона на узле получает добавку

$$\delta\varepsilon_i = eEr_i + \sum_s K_{is}f_s, \quad (8)$$

где K_{is} — функция взаимодействия, учитывающая влияние на энергетический уровень одночастичной функции распределения, а δf_s — изменение равновесной одночастичной функции распределения. Во-вторых, равновесные парные функции распределения должны быть заменены неравновесными. Однако для одной независимой пары доноров неравновесная парная функция распределения в электрическом поле свелась бы к равновесной функции, зависящей от измененных энергий. При этом полный ток остался бы равным нулю. Для связанной системы пар, кроме изменения энергий на узле, необходимо ввести изменения энергий $E_{1,2}$ в виде локальных электрических напряжений U_{ij}

$$\delta E_{1,2} = \pm eU_{ij}. \quad (9)$$

Эти локальные электрические напряжения нужно рассчитывать для полной системы всех пар с учетом граничного условия, состоящего в том, что полное падение напряжения на всей системе равно разности потенциалов, приложенной ко всему образцу.

Рассматривая ток, линейный по электрическому полю, мы можем рассматривать задачу о сетке случайных сопротивлений в поле случайных разностей потенциалов

$$I_{ij} = R_{ij}^{-1}U_{ij}. \quad (10)$$

Здесь

$$R_{ij}^{-1} = 2 \frac{e^2 r_{ij} w_{ij}}{T} N(E_2 - E_1) n_1. \quad (11)$$

При низких температурах функция распределения Планка переходит в функцию распределения Вина. По той же причине в нормировочном множителе надо пренебречь третьим слагаемым

$$R_{ij}^{-1} = 2 \frac{e^2 r_{ij} w_{ij}}{T} \frac{e^{-\frac{E_2 - E_1}{T}} e^{-\frac{\mu - E_1}{T}}}{1 + e^{\frac{\mu - E_1}{T}} + e^{\frac{\mu - E_2}{T}} + e^{\frac{2\mu - (e^2/k r_{ij}) - E_2 - E_1}{T}}}. \quad (12)$$

Токи в сетке сопротивлений должны быть просуммированы по всем значениям энергий на узлах и расстояний между узлами. Поскольку пары содержат в основном большие энергии, в энергиях можно пренебречь интегралом перекрытия

$$E_{1,2} = \frac{\varepsilon_i + \varepsilon_j \pm |\varepsilon_i - \varepsilon_j|}{2}, \quad E_2 - E_1 = |\varepsilon_i - \varepsilon_j|. \quad (13)$$

Тем не менее мы не приходим к выражениям Миллера–Абрахамса именно из-за отличия парной статистики от статистики Ферми. Подобно [1], перепишем выражение для сопротивления при предельно низких температурах в эквивалентной форме

$$R_{ij}^{-1} = \gamma_{ij} e^{-2\frac{r_{ij}}{a} - \frac{\varepsilon_{ij}}{T}}, \quad (14)$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (|\mu - E_1| + |\mu - E_2 - e^2/k r_{ij}| + |\varepsilon_i - \varepsilon_j| - e^2/k r_{ij}). \quad (15)$$

Обратим внимание на тот случай, когда обе энергии $\varepsilon_i, \varepsilon_j$ заключены в интервале между μ и $\mu - \frac{e^2}{k r_{ij}}$; при этом энергия активации равна $|\varepsilon_i - \varepsilon_j|$. Этот случай не возникает в сетке Миллера–Абрахамса.

При пренебрежении энергией кулоновского отталкивания $e^2/k r_{ij}$ выражение (15) переходит в выражение Миллера–Абрахамса.

Сетка случайных сопротивлений используется при рассмотрении различных задач теории протекания как для проводимости с постоянной длиной прыжка (nearest neighbor hopping — NNH), так и для проводимости с переменной длиной прыжка (variable range hopping — VRH) [3]. Модификация сетки Миллера–Абрахамса позволяет учесть влияние кулоновского взаимодействия на

все процессы прыжковой проводимости. Эфрос и Шкловский [3] считали, что это влияние надо учитывать, исходя из представлений о наличии мягкой кулоновской щели в спектре одночастичных состояний. Однако кулоновская щель не имеет отношения к задачам о коллективных процессах и в том числе к задаче о проводимости. Все взаимодействие учтено в формуле (15).

Согласно [4], для задачи протекания, определяющей проводимость, напишем условие связности

$$2\frac{r_{ij}}{a} + \frac{|\varepsilon_i - \varepsilon_j|}{T} \leq \xi, \quad (16)$$

где величина ξ определяет модуль показателя экспоненты в электропроводности. Переходя к рассмотрению VRH, введем безразмерные переменные $x_{ij} = 2\frac{r_{ij}}{a\xi}$ и $y_i = \frac{\varepsilon_i}{T\xi}$, для которых формулируется задача протекания в безразмерном пространстве с единичным условием связности. Критерий наличия протекания для нее будет

$$g\left(\frac{a}{2}\right)^3 T\xi^4 \geq n_c. \quad (17)$$

Здесь g — постоянная плотность состояний, а число n_c известно в литературе [3]. Обычное решение задачи Мотта состоит в том, что в формуле (17) выбирается знак равенства, что определяет величину $\xi_c = \left(\frac{2n_c}{gTa^3}\right)^{1/4}$.

При решении этой задачи мы упростили выражение для энергии активации (15), пренебрегая в нем энергией кулоновского отталкивания. Это можно было сделать только при выполнении условия

$$T\xi_c \geq 2\frac{e^2}{ka\xi_c}\beta, \quad \beta \leq 1. \quad (18)$$

Условие (18) ограничивает применение закона Мотта для низких температур

$$T \gg ga\left(\frac{e^2}{k}\right)^2. \quad (19)$$

При дальнейшем понижении температуры режим Мотта для VRH становится невозможным. Теперь мы должны использовать неравенство (18) и неравенство, противоположное (19). Выберем энергию активации в указанном выше интервале кулоновской энергии, для чего используем в формуле (18) знак равенства. Неравенство (17) при таком выборе будет эквивалентно неравенству, обратному (19), что показывает применимость нового закона как раз в том интервале температур, в котором не применим закон Мотта. Таким образом, кулоновская энергия активации привела к известному закону электропроводности

$$\sigma = \exp\left(-\sqrt{\frac{2\beta(e^2/ka)}{T}}\right). \quad (20)$$

Этот закон связывают с кулоновской щелью в одночастичной плотности состояний [3], но кулоновская щель не имеет отношения к процессу проводимости, в котором участвуют двухчастичные состояния и применяется двухчастичная статистика (4), (5), которая и определила закон (20).

Процесс VRH может происходить лишь при условии, что средняя длина прыжка $\frac{a\xi_c}{2}$ значительно превышает среднюю длину прыжка в процессе NNH r_0 , почти равную среднему расстоянию между основными примесями $N^{-1/3}$, где N — концентрация основных примесей. Для применимости закона Мотта это дает

$$\left(\frac{a}{gT}\right)^{1/4} \ll r_0, \quad (21)$$

а для применимости зависимости (20) —

$$\left(\frac{e^2}{kT}a\right)^{1/2} \ll r_0, \quad (22)$$

Эти неравенства ограничивают сверху температуру, при которой выполняются законы проводимости VRH, что соответствует эксперименту при низких температурах. Напомним, однако, что температура, при которой выполняется закон Мотта, согласно (19), ограничена и снизу, т. е. закон Мотта выполняется в определенном интервале температур.

Неравенства (18)–(22) определяют то, что мы назовем фазовой диаграммой: область температур и концентраций основных и неосновных примесей, в которых осуществляются разные температурные зависимости проводимости. Замена неравенств на равенства определяет границы этих областей. Граница, разделяющая области выполнения закона Мотта и закона (20), определяется уравнением

$$T = c_1 ag\frac{e^4}{k^2}, \quad (23)$$

граница, разделяющая области выполнения законов Мотта и закона NNH, — выражением

$$T = c_2 \frac{a}{gr_0^4}, \quad (24)$$

а граница, разделяющая области выполнения закона (20) и закона NNH, представляется в следующем виде:

$$T = c_3 \frac{e^2 a}{kr_0^2}. \quad (25)$$

К сожалению, мы не можем определить константы в этих равенствах, так что наша фазовая диаграмма передает только общий вид областей, но не их точные значения. Вспомним, что плотность состояний пропорциональна концентрации неосновных примесей n

$$g = \frac{n}{A}, \quad (26)$$

где A — характерная величина разброса случайных энергий. Трудность состоит в том, что фазовая диаграмма зависит от двух концентраций: основных и неосновных носителей.

На рис. 1, a – c изображена фазовая диаграмма в пространстве температур T и концентраций неосновных

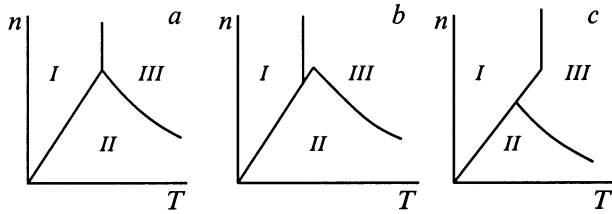


Рис. 1. Области изменения температур и концентраций неосновных носителей, в которых выполняются разные зависимости электропроводности, при заданной концентрации основных носителей.

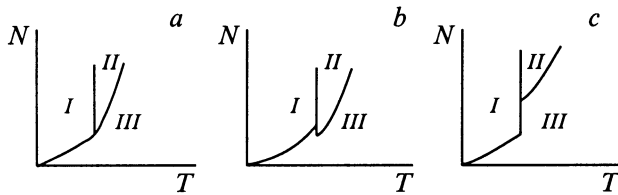


Рис. 2. Области изменения температур и концентраций основных носителей, в которых выполняются разные зависимости электропроводности, при заданной концентрации неосновных носителей.

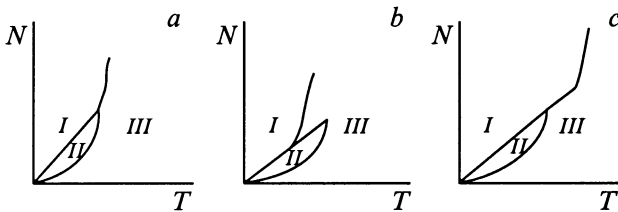


Рис. 3. Области изменения температур и концентраций основных носителей, в которых выполняются разные зависимости электропроводности, при заданной степени компенсации.

носителей n при заданной концентрации основных носителей. В области I осуществляется закон (20), в области II — закон Мотта, в области III — экспоненциальная температурная зависимость NНН. Рис. 1, *a* соответствует особому вырожденному случаю, который возможен лишь при случайном соотношении между константами, входящими в уравнения, определяющие границы областей

$$c_3 = \sqrt{c_1 c_2}. \quad (27)$$

Характерной чертой всех диаграмм является наличие критической концентрации неосновных носителей, выше которой нет области, в которой мог бы наблюдаться закон Мотта.

На рис. 2, *a–c* изображена фазовая диаграмма в пространстве температур T и основных носителей N , когда заданной считается концентрация неосновных носителей. Наконец, на рис. 3, *a–c* изображена фазовая диаграмма в пространстве температур T и концентраций основных носителей N , когда заданной считалась степень компенсации $K = \frac{n}{N}$. Рис. 2, *a* и 3, *a* соответствуют вырожденному соотношению (27). На всех диаграммах можно видеть наличие критического значения концентрации

носителей, выше которого невозможно осуществление закона Мотта.

На всю фазовую диаграмму прыжковой проводимости со стороны высоких температур должен быть наброшен "занавес", соответствующий проводимости по делокализованным состояниям, что может значительно уменьшить область NНН. По-видимому, это проявляется в экспериментах в легированном германии [5].

Рассмотрим задачу о VRH в сильном магнитном поле напряженности H , в котором магнитная длина $\lambda = \sqrt{\frac{ch}{eH}}$ меньше радиуса локализации. При этом волновая функция локализованного состояния вдоль магнитного поля спадает на расстоянии $a_H = a \ln(H/H_0)$, мало отличающемся от a , а поперек поля — на много меньшем расстоянии λ . Поэтому мы должны заменить неравенство (17) на неравенство

$$g\lambda^2 a_H T \xi^4 \geq n_c, \quad (28)$$

а неравенство (18) — на неравенство

$$T \xi \geq 2 \frac{e^2}{k \sqrt{a_H^2 + 2\lambda^2} \xi} \beta. \quad (29)$$

В последнем неравенстве λ можно пренебречь, после чего оно совпадает с неравенством (18). Определяя теперь энергию активации из этого условия, мы видим, что оно не зависит от магнитного поля. От магнитного поля зависит область тех низких температур, определяемая неравенством (28), при которых осуществляется закон (20). Таким образом, сильное магнитное поле существенно изменяет закон Мотта, но не влияет на закон (20). Этот вывод резко отличается от вывода, связывающего закон (20) с кулоновской щелью: согласно последнему, имеется резкая зависимость от магнитного поля (ξ_c пропорционально $H^{1/5}$) [3].

Парная статистика использовалась для описания явлений переноса в высокочастотном поле [2]. Основная мысль настоящей статьи состоит в том, что для описания явлений переноса в статическом поле необходимо использовать ту же статистику. Но такое использование приводит к существенному изменению теории — модификации сетки случайных сопротивлений. В статье продемонстрированы некоторые следствия такой модификации. Можно предположить, что все явления, возникающие при перескоках электронов полупроводника между локализованными состояниями, должны быть пересмотрены на основе двухчастичной статистики и модифицированной сетки случайных сопротивлений.

Список литературы

- [1] A. Miller, E. Abrahams. Phys. Rev. **120**, 3, 745 (1960).
- [2] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. ЖЭТФ **81**, 1, 406 (1981).
- [3] B.I. Shklovskii, A.L. Efros. Electronic properties of doped semiconductors. Springer-Verlag (1984).
- [4] V. Ambegaokar, B.I. Halperin, J.S. Langer. Phys. Rev. **B4**, 8, 2612 (1971).
- [5] А.Г. Забродский, А.Г. Андреев, А.В. Алексеенко. ФТП **26**, 3, 431 (1992).