

03.08.12

Неуниверсальность частотной зависимости проводимости неупорядоченных наногранулированных систем

© М.А. Ормонт, И.П. Звягин

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

E-mail: ormont@phys.msu.ru

(Поступила в Редакцию 13 июня 2018 г.)

Для неупорядоченного массива плотно упакованных сферических наногранул проведен расчет вещественной части высокочастотной бесфононной проводимости в парном приближении. Обобщение теории бесфононной проводимости систем с точечными примесными центрами на системы с областями локализации конечных размеров (массивы наногранул или квантовых точек) показало, что на высокочастотную проводимость влияет функция распределения расстояний между поверхностями гранул $P(w)$; это может приводить к отклонениям от линейной частотной зависимости вещественной части проводимости $\sigma_1(\omega)$. В окрестности частоты $\omega \sim \omega_c = 2I_0/\hbar$ (I_0 — предэкспоненциальный множитель резонансного интеграла) для неупорядоченных гранулированных систем следует ожидать отклонений от универсальности $\sigma_1(\omega) \sim \omega^s$ ($s \approx 1$), связанных с ослаблением частотной зависимости проводимости $\sigma_1(\omega)$, и ее немонотонности. С увеличением размера гранул немонотонность $\sigma_1(\omega)$ должна проявляться при меньших частотах; это связано с уменьшением предэкспоненциального множителя I_0 резонансного интеграла с увеличением размера гранул.

DOI: 10.21883/FTT.2018.12.46721.156

1. Введение

Как известно, исследования частотных зависимостей функций линейного отклика среды (комплексной диэлектрической восприимчивости $\alpha(\omega)$, проницаемости $\varepsilon(\omega)$ и проводимости $\sigma(\omega)$) может дать информацию об особенностях механизмов переноса носителей заряда и о локальной структуре материала [1].

Для многих неупорядоченных материалов (аморфные и легированные полупроводники, полупроводниковые стекла, проводящие полимеры, гранулированные материалы и т.п.) частотная зависимость проводимости в широком интервале частот (вплоть до GHz) может быть описана степенной зависимостью $\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + i\sigma_2(\omega) \sim \omega^s$, где s — постоянная ($0.7 < s < 1$) [2]. Возрастающая степенная частотная зависимость проводимости обычно свидетельствует о прыжковом механизме электронного переноса.

Универсальность степенной зависимости проводимости $\sigma(\omega) \sim \omega^s$ ($s < 1$) затрудняет получение информации о конкретных особенностях механизма переноса. По этой причине исследования отклонений от универсальности и нахождение их связи со структурными особенностями материала и с особенностями переноса играют важную роль.

В случае прыжкового переноса по локализованным состояниям примесной зоны слабо легированных компенсированных полупроводников теория предсказывает частотные зависимости вещественной $\sigma_1(\omega)$ и мнимой $\sigma_2(\omega)$ частей комплексной проводимости вида $\sigma_1(\omega)$, $\sigma_2(\omega) \sim r_\omega^n \omega^m \sim \omega^m \ln^n(\omega_{c,ph}/\omega)$ (где m, n — целые числа, r_ω — характерная длина прыжка на частоте ω , ω_{ph} —

характерная фононная частота, представляющая собой частоту попыток перехода электрона при релаксационной прыжковой проводимости; ω_c — частота попыток перехода электрона при резонансной проводимости). Функции вида $\omega^m \ln^n(\omega_{c,ph}/\omega)$, фигурирующие в выражениях для проводимости $\sigma_1(\omega)$ и $\sigma_2(\omega)$ при $\omega \ll \omega_{c,ph}$ можно аппроксимировать степенным законом $A\omega^s$ с показателем степени $s = \frac{d \ln(\sigma(\omega))}{d \ln \omega} = m - \frac{n}{\ln(\omega_{c,ph}/\omega)}$; при этом показатель степени s уменьшается с ростом частоты ω [3].

Степенную частотную зависимость вещественной части проводимости с показателем степени $s \approx 1$ обычно принято связывать с прыжковой проводимостью с переменной длиной прыжка по локализованным состояниям с участием фононов (релаксационная проводимость) [4–6]. Частотная зависимость вещественной части проводимости, близкая к линейной, получается при не слишком высоких частотах и в теории низкотемпературной бесфононной (резонансной) прыжковой проводимости при учете кулоновских корреляций [7]. Теория бесфононной проводимости предсказывает переход (кроссовер) от линейной частотной зависимости ($s \approx 1$) к зависимости, близкой к квадратичной ($s \approx 2$) в области частот порядка ω_{cr} , при которых $\hbar\omega$ становится порядка энергии кулоновского взаимодействия между электронами внутри резонансных пар [7,8]; при более низких частотах вещественная часть проводимости определяется фононным механизмом, а с ростом частоты бесфононная проводимость начинает преобладать над релаксационной. Низкотемпературные (при $T \sim 1$ К) измерения частотной зависимости проводимости в легированном кремнии (Si : B [9], Si : P [10,11])

на изоляторной стороне перехода металл–диэлектрик и в металлических нанокompозитах [12] показали, что с ростом частоты зависимость вещественной части проводимости $\sigma_1(\omega)$ переходит от линейной к квадратичной. В Si:P этот переход происходит при частотах порядка $\nu_{cr} \sim 1$ THz [10,11].

Проведенное в работе [13] рассмотрение показало, что в силу частотной зависимости характерной длины прыжка r_ω частотная зависимость $\sigma_1(\omega)$ может быть немонотонной, причем вплоть до частоты ω_m , отвечающей максимуму $\sigma_1(\omega)$, кулоновское взаимодействие между электронами „активных“ (резонансных) пар играет основную роль при $\hbar\omega < e^2/\kappa r_\omega$ и частотная зависимость $\sigma_1(\omega)$ остается близкой к линейной. Однако предсказанная теорией немонотонность частотной зависимости бесфононной проводимости в легированных компенсированных полупроводниках экспериментально не была обнаружена [10,11]. Наблюдаемый переход от линейной к квадратичной частотной зависимости проводимости $\sigma_1(\omega)$ может быть связан с переходом к режиму проводимости с постоянной длиной прыжка, когда основной вклад в проводимость вносят электронные переходы внутри пар с оптимальными межцентровыми расстояниями r_{opt} , слабо зависящими от частоты [14–17]. Существование оптимального расстояния r_{opt} между центрами в парах обусловлено тем, что с уменьшением расстояния между центрами в паре уменьшается и изменение дипольного момента системы при электронном переходе, а с увеличением расстояния между центрами происходит экспоненциальное уменьшение перекрытия волновых функций состояний, отвечающих центрам локализации. С ростом частоты характерная длина прыжка r_ω уменьшается. Переход к режиму проводимости с постоянной длиной прыжка r_{opt} происходит в области частот, где $r_{opt} > r_\omega$; в этом случае основной вклад в проводимость вносят электронные переходы внутри пар с межцентровыми расстояниями $r_{\lambda,\lambda'} \sim r_{opt}$.

Имеющаяся теория бесфононной проводимости неупорядоченных полупроводников с мелкими примесными уровнями не учитывает неточности центров локализации носителей заряда; в тоже время на практике часто приходится иметь дело с неупорядоченными системами, включающими в себя центры локализации конечных размеров (наногранулы, квантовые точки, проводящие области в легированных компенсированных полупроводниках, обусловленные крупномасштабными флуктуациями концентрации примеси и связанные с крупномасштабными флуктуациями случайных кулоновских полей) [18,19]. Отметим, что высокочастотная электронная проводимость, описываемая в рамках парного приближения, существенно зависит от особенностей структуры центров локализации; при этом особый интерес представляют аномалии прыжковых явлений переноса, связанные с взаимным влиянием квантового ограничения, беспорядка и кулоновского взаимодействия электронов. В работе [20] было показано, что учет размеров гранул существенно влияет на результат при

вычислении высокочастотной релаксационной прыжковой проводимости массива плотно упакованных гранул. В частности, в режиме постоянной не зависящей от частоты длины прыжка (переходы между ближайшими соседями) высокочастотная релаксационная проводимость массива плотно упакованных гранул зависит от функции распределения $P(w_{\lambda\lambda'})$ величин расстояний между поверхностями гранул $w_{\lambda\lambda'}$. Зависимость проводимости $\sigma(\omega)$ от структурной характеристики $P(w_{\lambda\lambda'})$ может приводить к отклонениям частотной зависимости вещественной части проводимости $\sigma_1(\omega)$ от линейной.

Вместе с тем, в области высоких частот бесфононная составляющая проводимости σ_1^{res} преобладает над релаксационной σ_1^{rel} ; при этом $\sigma_1(\omega) = \sigma_1^{res}(\omega) + \sigma_1^{rel}(\omega) \approx \sigma_1^{res}(\omega)$. Проведем обобщение теории высокочастотной бесфононной проводимости систем с точечными примесными центрами на системы с областями локализации конечных размеров (массивы наногранул или квантовых точек).

Рассмотрим низкотемпературную бесфононную проводимость неупорядоченной системы, обусловленную электронными переходами между состояниями, отвечающими различным областям локализации конечных размеров.

2. Модель гранулированной системы

Рассмотрим систему, включающую массив сферических наногранул или квантовых точек, с беспорядком, возникающим из-за случайных флуктуаций размера гранул d_λ и расстояний между поверхностями гранул $w_{\lambda,\lambda'}$ (ширин потенциальных диэлектрических барьеров). Флуктуации размера гранул, эффекты размерного квантования, кулоновского взаимодействия, квантовой корреляции (квантового отталкивания) уровней энергии приводят к случайному разбросу энергий локализованных состояний, связанных с гранулами. Будем рассматривать случай плотной упаковки гранул, когда длина затухания γ^{-1} волновых функций в областях диэлектрических барьеров между гранулами и среднее расстояние w между поверхностями ближайших (соседних) гранул меньше среднего размера гранул d , т. е. $\gamma^{-1} < w < d$.

В области высоких частот, больших частоты, при которой длина туннелирования становится сравнима с диаметром гранулы, проводимость определяется переходами между ближайшими гранулами. В этом случае при расчете высокочастотной проводимости можно ограничиться учетом перекрытия волновых функций соседних гранул и не принимать во внимание перекрытие между удаленными гранулами [20–22].

Частотная зависимость характерной длины прыжка r_ω в режиме резонансной проводимости связана с гибридизацией электронных состояний. Согласно теории [7,8] для мелких примесных уровней, из-за гибридизации волновых функций изолированной пары центров и соответствующего ей отталкивания уровней, наибольший вклад

в бесфононную проводимость вносят пары центров, для которых межцентровые расстояния $r_{\lambda\lambda'}$ удовлетворяют неравенствам $r_\omega \leq r_{\lambda\lambda'} \leq r_\omega + a$ (a — радиус локализации); при $r_{\lambda\lambda'} < r_\omega$ отталкивание уровней за счет гибридизации состояний приводит к тому, что $\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ - \varepsilon_{\lambda\lambda'}^- > \hbar\omega$, и резонансные переходы невозможны. В случае достаточно большого разброса энергий уровней, при условии $|\varepsilon_{\lambda\lambda''}^0 - \varepsilon_\lambda^0| \gg |I_{\lambda,\lambda''}|$, $|\varepsilon_{\lambda\lambda''}^0 - \varepsilon_{\lambda'}^0| \gg |I_{\lambda',\lambda''}|$, пары центров λ, λ' с близкими энергиями $\varepsilon_\lambda^0 \approx \varepsilon_{\lambda'}^0$ можно считать изолированными; при учете гибридизации локализованных электронных состояний в таких парах перекрытием волновых функций центров λ, λ' с другими центрами λ'' можно пренебречь. Характерная длина прыжка r_ω в парном приближении на частоте ω определяется из условия $\hbar\omega = 2I_{\lambda,\lambda'}(r_\omega)$, где $I_{\lambda,\lambda'} = I_0 \exp(-r_{\lambda\lambda'}/a)$ — резонансный интеграл, а λ — номер центра. Следует отметить, что характерная длина прыжка r_ω определяется тем, что область значений $\varepsilon_{\lambda\lambda'}^+ - \varepsilon_{\lambda,\lambda'}^-$ ограничена снизу величиной $2I(r_{\lambda\lambda'})$. Ограничение существенно, когда разность затравочных энергий $\varepsilon_{\lambda'}^0 - \varepsilon_\lambda^0$ по абсолютной величине меньше $2I_{\lambda,\lambda'}$. С ростом частоты ω характерная длина прыжка r_ω уменьшается.

Как и для точечных примесных центров, в случае наногранулированной системы вследствие большого разброса энергий уровней, гибридизацию волновых функций локализованных электронных состояний при расчете высокочастотной проводимости можно учесть в парном приближении, считая пару центров локализации (гранул) λ, λ' изолированной, т.е. пренебречь перекрытием волновых функций с другими центрами, не принадлежащими рассматриваемой паре.

В слабых электрических полях в парном приближении выражение для бесфононной проводимости имеет вид [23]

$$\sigma_1^{\text{res}}(\omega) = \frac{\pi e^2 \omega}{V_0} \sum_{\substack{\{\lambda,\lambda'\} \\ \lambda \neq \lambda'}} |\langle \psi_{\lambda,\lambda'}^- | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \psi_{\lambda,\lambda'}^+ \rangle|^2 \times (n_F(\varepsilon_{\lambda,\lambda'}^-) - n_F(\varepsilon_{\lambda,\lambda'}^+)) \delta(\varepsilon_{\lambda,\lambda'}^- - \varepsilon_{\lambda,\lambda'}^+ + \hbar\omega), \quad (1)$$

где $\psi_{\lambda,\lambda'}^\pm = C_\lambda^\pm \psi_\lambda + C_{\lambda'}^\pm \psi_{\lambda'}$ — гибридные волновые функции основных состояний $\psi_\lambda, \psi_{\lambda'}$ электрона на изолированных центрах локализации (наногранулах) λ и λ' , \mathbf{n} — единичный вектор, параллельный внешнему электрическому полю, $n_F(\varepsilon)$ — среднее число заполнения состояния с энергией ε , V_0 — объем системы. Волновые функции $\psi_{\lambda,\lambda'}^-, \psi_{\lambda,\lambda'}^+$ отвечают нижнему $\varepsilon_{\lambda,\lambda'}^-$ и верхнему $\varepsilon_{\lambda,\lambda'}^+$ уровням энергии,

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

$I_{\lambda,\lambda'} = \langle \psi_\lambda | \hat{U}_\lambda | \psi_{\lambda'} \rangle$ — резонансный интеграл; $\hat{U}_\lambda \approx \hat{U}_\lambda + e\varphi(\mathbf{r}_\lambda)$ — потенциальная энергия локализованного

электрона, создаваемая центром λ и учитывающая кулоновский сдвиг $e\varphi(\mathbf{r}_\lambda)$, обусловленный другими заряженными центрами в области расположения наногранулы с номером λ . При этом волновая функция локализованного в области гранулы основного состояния остается практически неизменной и близкой к волновой функции, соответствующей изолированной грануле. Волновые функции $\psi_{\lambda,\lambda'}^-, \psi_{\lambda,\lambda'}^+$ представляют собой гибридные волновые функции основных состояний электрона на изолированных центрах локализации (наногранулах).

Для волновых функций основных состояний сферически симметричных гранул матричный элемент равен

$$\langle \psi_{\lambda,\lambda'}^- | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \psi_{\lambda,\lambda'}^+ \rangle = (\mathbf{n}, \mathbf{r}_{\lambda\lambda'}) \frac{I_{\lambda,\lambda'}}{\Gamma_{\lambda,\lambda'}} + \frac{(\varepsilon_\lambda^0 - \varepsilon_{\lambda'}^0) \langle \psi_\lambda | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \psi_{\lambda'} \rangle}{\Gamma_{\lambda,\lambda'}}; \quad (2)$$

здесь $\langle \psi_\lambda | \mathbf{r} | \psi_\lambda \rangle = \mathbf{r}_\lambda$, $\langle \psi_{\lambda'} | \mathbf{r} | \psi_{\lambda'} \rangle = \mathbf{r}_{\lambda'} = \mathbf{r}_\lambda + \mathbf{r}_{\lambda\lambda'}$, r_λ — радиус-вектор центра гранулы (шара) λ , $\mathbf{r}_{\lambda\lambda'}$ — радиус-вектор центра гранулы λ' относительно центра гранулы λ , $\langle \psi_\lambda | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \psi_{\lambda'} \rangle = \langle \psi_{\lambda'} | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \psi_\lambda \rangle$, $\Gamma_{\lambda,\lambda'} = \sqrt{(\varepsilon_\lambda^0 - \varepsilon_{\lambda'}^0)^2 + 4I_{\lambda,\lambda'}^2}$.

Для резонансных пар уровней с затравочными энергиями $\varepsilon_\lambda^0 \approx \varepsilon_{\lambda'}^0$, вносящих основной вклад в бесфононную проводимость, матричный элемент (2) принимает вид

$$\langle \psi_{\lambda,\lambda'}^- | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \psi_{\lambda,\lambda'}^+ \rangle \approx (\mathbf{n}, \mathbf{r}_{\lambda,\lambda'}) \frac{I_{\lambda,\lambda'}}{\Gamma_{\lambda,\lambda'}}. \quad (3)$$

Отметим, что выражение для матричного элемента (2) в случае сферически симметричных гранул совпадает с выражением для матричного элемента в случае водородоподобных примесных центров (мелких локальных уровней). Согласно (3), выражение для вещественной части бесфононной проводимости неупорядоченного массива наногранул принимает вид

$$\sigma_1^{\text{res}}(\omega) = \frac{\pi e^2 \omega}{V_0} \sum_{\substack{\{\lambda,\lambda'\} \\ \lambda \neq \lambda'}} \left[\frac{(\mathbf{n}, \mathbf{r}_{\lambda\lambda'}) I_{\lambda,\lambda'}}{\Gamma_{\lambda,\lambda'}} \right]^2 \times (n_F(\varepsilon_{\lambda,\lambda'}^-) - n_F(\varepsilon_{\lambda,\lambda'}^+)) \delta(\varepsilon_{\lambda,\lambda'}^- - \varepsilon_{\lambda,\lambda'}^+ + \hbar\omega). \quad (4)$$

Из теории бесфононной проводимости систем водородоподобных (точечных) центров локализации следует, что предэкспоненциальный множитель I_0 резонансного интеграла $I_{\lambda,\lambda'} = I_0 \exp(-r_{\lambda,\lambda'}/a)$ служит основным параметром рассматриваемой задачи о высокочастотной проводимости, определяющим величину критической частоты $\omega_c = 2I_0/\hbar$, при которой длина прыжка становится порядка радиуса локализации состояний. Для систем с водородоподобными примесными центрами (Si:P) характерное значение критической частоты составляет $\nu_c = \omega_c/2\pi \sim 10$ THz.

3. Резонансный интеграл

В случае плотной упаковки гранул, $\gamma^{-1} < w < d$, предэкспоненциальный множитель I_0 в выражении для резонансного интеграла $I_{\lambda,\lambda'}$ существенно уменьшается с увеличением размеров центров локализации. Этот эффект определяется двумя тенденциями. С одной стороны, в связи с условием нормировки с увеличением размера гранул происходит уменьшение амплитуд соответствующих волновых функций состояний на границах гранул; с другой, — увеличение размера гранул обуславливает увеличение объема эффективной контактной области (сферического сегмента с высотой γ^{-1} , интегрирование по которому и дает основной вклад в резонансный интеграл) [20].

Вычислим резонансный интеграл в рассматриваемом нами случае сферических наногранул. Для оценки предэкспоненциального множителя I_0 резонансного интеграла рассмотрим случай двух одинаковых сферически симметричных прямоугольных потенциальных квантовых ям радиуса R , для которых зависимость потенциальной энергии от расстояния до центра квантовой ямы имеет вид $\tilde{U}_\lambda(r) = -U_0$ при $r \leq R$, $\tilde{U}_\lambda(r) = 0$ при $r > R$.

Как известно, волновая функция, отвечающая основному состоянию изолированной квантовой ямы, в областях внутри и вне квантовой ямы, имеет вид: $\psi_\lambda = A \sin(\alpha r)/r$ при $r \leq R$, $\psi_\lambda = B \exp(-\gamma r)/r$ при $r > R$; здесь $\alpha = \sqrt{2m(U_0 - \varepsilon)}/\hbar$, $\gamma = \sqrt{2m\varepsilon}/\hbar$ — обратный радиус локализации волновой функции в области барьера между ямами, $\alpha^2 + \gamma^2 = 2mU_0/\hbar^2$, $\varepsilon = -E$, E — энергия электрона, m — эффективная масса электрона (см., например, [24]).

В случае сильной локализации волновых функций в областях квантовых ям (пренебрегая вероятностью нахождения электрона во внешней, по отношению к квантовой яме, области $r > R$) из условия нормировки имеем

$$A \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi R \left(1 - \frac{\sin(2\alpha R)}{2\alpha R}\right)}}; \quad (5)$$

при этом из непрерывности волновых функций на границе ям следует равенство $B = A \sin(\alpha R) \exp(\gamma R)$.

Отметим, что резонансный интеграл можно представить в виде

$$I_{\lambda,\lambda'} = \langle \psi_\lambda | \tilde{U}_\lambda | \psi_{\lambda'} \rangle \approx \langle \psi_\lambda | \hat{\tilde{U}}_\lambda | \psi_{\lambda'} \rangle + e\varphi(\mathbf{r}_\lambda) s_{\lambda,\lambda'}; \quad (6)$$

здесь $\hat{\tilde{U}}_\lambda \approx \tilde{U}_\lambda + e\varphi(\mathbf{r}_\lambda)$ — потенциальная энергия локализованного электрона, создаваемая центром λ и учитывающая кулоновский сдвиг $e\varphi(\mathbf{r}_\lambda)$, обусловленный другими заряженными центрами в области расположения наногранулы с номером λ .

При решении задачи о гибридизации состояний часто можно считать, что резонансные интегралы не зависят от случайных кулоновских полей $\varphi(\mathbf{r}_\lambda)$, т. е.

$$I_{\lambda,\lambda'} = \langle \psi_\lambda | \hat{\tilde{U}}_\lambda | \psi_{\lambda'} \rangle \approx \langle \psi_\lambda | \tilde{U}_\lambda | \psi_{\lambda'} \rangle; \quad (7)$$

равенства (7) справедливы при условии

$$\left| \langle \psi_\lambda | \hat{\tilde{U}}_\lambda | \psi_{\lambda'} \rangle \right| > |e\varphi(\mathbf{r}_\lambda) s_{\lambda,\lambda'}|. \quad (8)$$

Неравенство (8) представляет собой условие на глубину квантовых ям, отвечающих приближению (7). Действительно, в случае плотной упаковки гранул, $\gamma^{-1} < w_{\lambda,\lambda'} < d = 2R$, существенный вклад в интеграл неортогональности $s_{\lambda,\lambda'}$ дает интегрирование по межгранульной части сигарообразной области, вытянутой вдоль отрезка $r_{\lambda,\lambda'}$, внутри межгранульной части которой произведение волновых функций $\psi_\lambda \psi_{\lambda'}$ можно считать постоянным и равным

$$\begin{aligned} \psi_\lambda \psi_{\lambda'} &\approx \left(\frac{B}{R}\right)^2 \exp(-\gamma r_{\lambda,\lambda'}) \\ &= \left(\frac{A \sin(\alpha R)}{R}\right)^2 \exp(-\gamma w_{\lambda,\lambda'}); \end{aligned} \quad (9)$$

здесь $w_{\lambda,\lambda'}$ — расстояние между поверхностями гранул, $r_{\lambda,\lambda'} = 2R + w_{\lambda,\lambda'}$ — расстояние между центрами сферических гранул λ и λ' .

Граница сигарообразной области, интегрирование по межгранульной части которой дает существенный вклад в интеграл неортогональности $s_{\lambda,\lambda'}$, представляет собой поверхность, на которой значение произведения

$$\begin{aligned} \psi_\lambda \psi_{\lambda'} &\approx \left(\frac{A \sin(\alpha R)}{R}\right)^2 \exp(-\gamma w_{\lambda,\lambda'}) \\ &\times \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{\gamma r_\perp^2 r_{\lambda,\lambda'}}{(r_{\lambda,\lambda'} - r_\parallel) r_\parallel}\right) \end{aligned} \quad (10)$$

уменьшается в e раз по сравнению со значением (9); площадь поперечного сечения интересующей области равна $S(\xi) \approx \pi r_\perp^2 \approx \pi 2\gamma^{-1} r_{\lambda,\lambda'} \xi (1 - \xi)$, где $\xi = r_\parallel / r_{\lambda,\lambda'}$, $\xi \in \left[\frac{R}{2R+w}, \frac{R+w}{2R+w}\right]$, \mathbf{r}_\perp , \mathbf{r}_\parallel — перпендикулярная и параллельная отрезку $r_{\lambda,\lambda'}$ составляющие вектора $\mathbf{r} = \mathbf{r}_\perp + \mathbf{r}_\parallel$ (начало отсчета совпадает с центром одной из гранул, например, λ). Площадь поперечного сечения межгранульной области интегрирования, отвечающая $\xi \approx 1/2$, равна $S_m \approx \pi r_\perp^2 \approx \pi \gamma^{-1} R$. Соответственно, объем межгранульной области интегрирования равен $V_b = r_{\lambda,\lambda'} \int_{R/2R+w}^{R+w/2R+w} S d\xi \approx S_m w$; т. е. можно считать, что межгранульная область представляет собой цилиндр с высотой w и площадью основания S_m .

Вклад в интеграл неортогональности $s_{\lambda,\lambda'}$ также вносит интегрирование по двум эффективным контактным областям (шаровым сегментам с высотой γ^{-1} и площадью $S_c \approx S_m \approx \pi \gamma^{-1} R$; $V_c \approx S_c \gamma^{-1}$ — объем эффективной контактной области), в области которых произведение $\psi_\lambda \psi_{\lambda'}$ можно считать постоянным $\psi_\lambda \psi_{\lambda'} \approx \psi_\lambda(R) \psi_{\lambda'}(R+w) = \psi_\lambda(R+w) \psi_{\lambda'}(R) \approx (A \sin(\alpha R)/R)^2 \exp(-\gamma w_{\lambda,\lambda'})$ и равным (9).

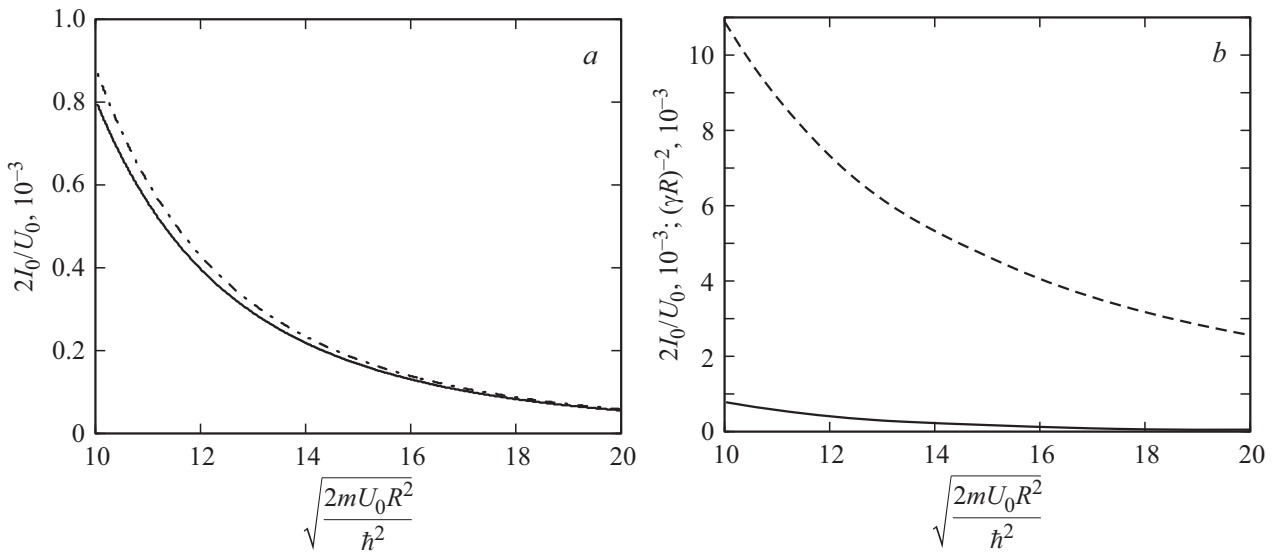


Рис. 1. *a* — сплошная линия — график зависимости предэкспоненциального множителя I_0 резонансного интеграла $I_{\lambda,\lambda'}$ (14) от безразмерного параметра $\sqrt{\frac{2mU_0R^2}{\hbar^2}}$; здесь $I_0 \approx \frac{U_0}{2} \frac{1}{\left(1 - \frac{\sin(2\alpha R)}{2\alpha R}\right)} \left(\frac{\sin(\alpha R)}{\gamma R}\right)^2$. Для глубокой квантовой ямы предэкспоненциальный множитель I_0 становится равен $I_0 \approx \frac{U_0}{2} \left(\frac{\sin(\alpha R)}{\gamma R}\right)^2$ (штрихпунктирная линия). *b* — сплошная линия — график зависимости предэкспоненциального множителя I_0 резонансного интеграла $I_{\lambda,\lambda'}$ (14) от безразмерного параметра $\sqrt{\frac{2mU_0R^2}{\hbar^2}}$; где $I_0 \approx \frac{U_0}{2} \frac{1}{\left(1 - \frac{\sin(2\alpha R)}{2\alpha R}\right)} \left(\frac{\sin(\alpha R)}{\gamma R}\right)^2$. Для сравнения приведен график зависимости $(\gamma R)^{-2}$ от $\sqrt{\frac{2mU_0R^2}{\hbar^2}}$ (пунктирная линия).

Таким образом, оценка интеграла неортогональности дает

$$s_{\lambda,\lambda'} = \langle \psi_{\lambda'} | \psi_{\lambda} \rangle = \int_V \psi_{\lambda'} \psi_{\lambda} d\mathbf{r} \approx \psi_{\lambda'} \psi_{\lambda} \int_{V_b+2V_c} d\mathbf{r} \approx \left(\frac{A \sin(\alpha R)}{R}\right)^2 \exp(-\gamma w_{\lambda,\lambda'}) (V_b + 2V_c), \quad (11)$$

где $V_b + 2V_c = S_m(w + 2\gamma^{-1})$ — объем цилиндра с площадью основания S_m и высотой $w + 2\gamma^{-1}$, параллельной отрезку $r_{\lambda,\lambda'}$.

В случае глубоких квантовых ям неравенство $|\langle \psi_{\lambda} | \hat{U}_{\lambda} | \psi_{\lambda'} \rangle| > |e\varphi(\mathbf{r}_{\lambda}) s_{\lambda,\lambda'}|$ выполняется и резонансный интеграл равен

$$I_{\lambda,\lambda'} = \langle \psi_{\lambda} | \hat{U}_{\lambda} | \psi_{\lambda'} \rangle \approx \langle \psi_{\lambda} | \hat{U}_{\lambda} | \psi_{\lambda'} \rangle = -U_0 \int_{V_{\lambda}} \psi_{\lambda} \psi_{\lambda'} d\mathbf{r} \approx -U_0 \psi_{\lambda}(R) \psi_{\lambda'}(R+w) V_c, \quad (12.1)$$

где V_{λ} — объем наногранулы, отвечающей квантовой яме λ , по которому ведется интегрирование; с учетом (9) выражение для резонансного интеграла имеет вид

$$I_{\lambda,\lambda'} \approx -U_0 \left(\frac{A \sin(\alpha R)}{R}\right)^2 \exp(-\gamma w_{\lambda,\lambda'}) V_c. \quad (12.2)$$

Оценки интеграла неортогональности (11) и резонансного интеграла (12.2) дают возможность представить неравенство (8) $|\langle \psi_{\lambda} | \hat{U}_{\lambda} | \psi_{\lambda'} \rangle| > |e\varphi(\mathbf{r}_{\lambda}) s_{\lambda,\lambda'}|$ в виде условия на глубину квантовой ямы $U_0 V_c > |e\varphi(\mathbf{r}_{\lambda})| (V_b + 2V_c)$, т. е.

$$U_0 > \frac{e^2}{\kappa(d+w)} \frac{(w + 2\gamma^{-1})}{\gamma^{-1}} \sim \frac{e^2}{\kappa d} \gamma w, \quad (13)$$

где характерная энергия разброса уровней за счет случайных кулоновских полей порядка $|e\varphi(\mathbf{r}_{\lambda})| \sim \frac{e^2}{\kappa(d+w)}$, w — среднее расстояние между поверхностями ближайших гранул, $\gamma w \gg 1$.

С учетом выражений для коэффициента A (5) и объема шарового сегмента (эффективной контактной области) $V_c \approx \pi \gamma^{-2} R$ резонансный интеграл (12.2) принимает вид

$$I_{\lambda,\lambda'} \approx -\frac{U_0}{2} \frac{1}{\left(1 - \frac{\sin(2\alpha R)}{2\alpha R}\right)} \left(\frac{\sin(\alpha R)}{\gamma R}\right)^2 \exp(-\gamma w_{\lambda,\lambda'}). \quad (14)$$

Согласно (14), для сферических наногранул резонансный интеграл $I_{\lambda,\lambda'} = I_0 \exp(-w_{\lambda,\lambda'} \gamma)$ экспоненциально убывает с ростом расстояния $w_{\lambda,\lambda'}$ между поверхностями гранул λ и λ' .

Оценим предэкспоненциальный множитель I_0 резонансного интеграла. Из условия непрерывности логарифмической производной волновой функции на границе

квантовой ямы следует, что $k_2 = -k_1 \operatorname{ctg}(k_1)$, где $k_1 = \alpha R$, $k_2 = \gamma R$. Решение системы из двух трансцендентных уравнений $k_2 = -k_1 \operatorname{ctg}(k_1)$ и $k_1^2 + k_2^2 = 2mU_0R^2/\hbar^2$ ($\alpha^2 + \gamma^2 = 2mU_0/\hbar^2$), дает значения энергий, отвечающих связанным состояниям в сферической прямоугольной квантовой яме (см., например, [24]). Из решения следует, что в случае глубокой квантовой ямы $2mU_0R^2/\hbar^2 \gg \pi^2$ для основного состояния имеем $k_1 = \alpha R \rightarrow \pi$, $k_2 = \gamma R \rightarrow \sqrt{2mU_0R^2/\hbar^2}$; при этом резонансный интеграл (14) принимает вид (рис. 1, а)

$$I_{\lambda,\lambda'} \approx -\frac{U_0}{2} \left(\frac{\sin(\alpha R)}{\gamma R} \right)^2 \exp(-\gamma w_{\lambda,\lambda'}) \\ = -\frac{1}{4} \frac{\hbar^2}{mR^2} (\sin(\alpha R))^2 \exp(-\gamma w_{\lambda,\lambda'}). \quad (15)$$

Соответственно, в случае сферических наногранул предэкспоненциальный множитель

$$I_0 = \frac{U_0}{2} \left(\frac{\sin(\alpha R)}{\gamma R} \right)^2 = \frac{1}{4} \frac{\hbar^2}{mR^2} (\sin(\alpha R))^2 \quad (16)$$

резонансного интеграла $I_{\lambda,\lambda}$ (15) существенно уменьшается с увеличением линейного размера гранул (рис. 1, а); при этом фактор ослабления предэкспоненциального множителя I_0 равен $(\sin(\alpha R)/\gamma R)^2$ (рис. 1, б).

4. Частотная зависимость бесфононной проводимости

Переход от суммирования к интегрированию в выражении для проводимости (4) можно осуществить через функцию распределения $P(w_{\lambda\lambda'})$ величин расстояний между поверхностями гранул [25]

$$\sum_{\lambda,\lambda'} \dots \rightarrow \frac{V_0}{d^3} g_0^2 \int_B^A d\varepsilon_{\lambda}^0 \int_{\varepsilon_{\lambda}^0}^A d\varepsilon_{\lambda'}^0 \int P(w_{\lambda\lambda'}) dw_{\lambda\lambda'} d\tilde{\Omega} \dots, \quad (17)$$

$$P(w_{\lambda\lambda'}) = \frac{p(w_{\lambda\lambda'})}{\int p(w_{\lambda\lambda'}) dw_{\lambda\lambda'} d\tilde{\Omega}} = \frac{1}{4\pi} \frac{p(w_{\lambda\lambda'})}{\int p(w_{\lambda\lambda'}) dw_{\lambda\lambda'}},$$

где g_0 — одночастичная плотность состояний в расчете на центр, принимаемая равной постоянной величине, $p(w_{\lambda\lambda'})$ — плотность вероятности того, что расстояние между поверхностями соседних гранул равно $w_{\lambda\lambda'}$, $\tilde{\Omega}$ — сферический угол. Одночастичную плотность состояний в расчете на центр следует рассматривать, как плотность вероятности того, что энергия основного состояния в грануле равна ε_{λ}^0 .

Как и в теории бесфононной проводимости для систем с точечными центрами локализации, учет кулоновского взаимодействия между электронами, локализованными на рассматриваемой паре центров (гранул), вместе с законом сохранения энергии $\varepsilon_{\lambda,\lambda'}^+ = \varepsilon_{\lambda,\lambda'}^- + \hbar\omega$ при низких температурах приводят к тому, что разность средних

чисел заполнения отлична от нуля и равна единице $n_F(\varepsilon_{\lambda,\lambda'}^-) - n_F(\varepsilon_{\lambda,\lambda'}^+) = 1$ при $\mu - \hbar\omega - \frac{e^2}{\kappa r_{\lambda,\lambda'}} < \varepsilon_{\lambda,\lambda'}^- < \mu$.

С учетом (17) для вещественной части бесфононной проводимости получаем

$$\sigma_1^{\text{res}}(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2 g_0^2}{3\hbar d^3} \int_{w_{\omega}}^{\infty} \left(\hbar\omega + \frac{e^2}{\kappa(d + w_{\lambda\lambda'})} \right) \\ \times \frac{(d + w_{\lambda\lambda'})^2 I_{\lambda\lambda'}^2 P(w_{\lambda\lambda'})}{\sqrt{(\hbar\omega)^2 - 4I_{\lambda\lambda'}^2}} dw_{\lambda\lambda'}, \quad (18)$$

где $2I_{\lambda\lambda'}(w_{\omega}) = \hbar\omega$, $w_{\omega} = \gamma^{-1} \ln(2I_0/\hbar\omega)$, $I_{\lambda\lambda'} = I_0 \exp(-w_{\lambda\lambda'}\gamma)$, d — средний диаметр гранулы, определяющий изменение дипольного момента системы при электронных переходах, κ — диэлектрическая проницаемость среды. Из-за гибридизации волновых функций изолированной пары центров и соответствующего ей отталкивания уровней, наибольший вклад в бесфононную проводимость при частотах $\omega < \omega_c$ вносят пары центров, для которых расстояние между поверхностями $w_{\lambda\lambda'}$ (длина туннелирования) удовлетворяет неравенствам $w_{\omega} < w_{\lambda\lambda'} < w_{\omega} + \gamma^{-1}$; при $w_{\lambda\lambda'} < w_{\omega}$ отталкивание уровней становится большим $\hbar\omega$, так что переходы невозможны, а с увеличением межцентрового расстояния в паре экспоненциально уменьшается перекрытие волновых функций состояний. Нижний предел интегрирования в выражении (18) равен w_{ω} при условии $\omega < \omega_c$ и нулю в случае $\omega \geq \omega_c$, где критическая частота $\omega_c = 2I_0/\hbar$. При частотах $\omega \geq \omega_c$ длина туннелирования w_{ω} становится порядка длины затухания γ^{-1} волновой функции в области барьера; формально при $\omega = \omega_c$ длина w_{ω} обращается в нуль.

Отметим, что проводимость определяется переходами между ближайшими соседями (гранулами) в области высоких частот, для которых $w_{\omega} < d$ (т.е. $\omega > \omega_c \exp(-\gamma d)$, где $\gamma d \gg 1$). В низкочастотном диапазоне, отвечающем $w_{\omega} > d$, проводимость определяется переходами между удаленными (не ближайшими) соседями через промежуточные виртуальные состояния, которые обусловлены гибридизацией состояний группы соседних гранул [20–22]. С ростом частоты переход к режиму проводимости между ближайшими соседями происходит при частотах, отвечающих $w_{\omega} \sim d$. Вследствие уменьшения предэкспоненциального множителя резонансного интеграла I_0 для гранулированных систем переход к режиму проводимости с постоянной длиной прыжка происходит при существенно меньших частотах, чем в случае систем с водородоподобными центрами локализации.

Согласно (18), в рассматриваемом случае плотной упаковки гранул, выражение для вещественной части низкотемпературной бесфононной проводимости, вычисленной в парном приближении с учетом как квантового отталкивания уровней, так и кулоновского взаимодей-

ствия между электронами, принимает вид

$$\sigma_1^{\text{res}}(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2 g_0^2}{3\hbar d} (\hbar\omega + U) \times \int_{w_\omega}^{\infty} P(w_{\lambda\lambda'}) \frac{I_{\lambda\lambda'}^2}{\sqrt{(\hbar\omega)^2 - 4I_{\lambda\lambda'}^2}} dw_{\lambda\lambda'}, \quad (19)$$

где $U \approx e^2/kd$ — характерная энергия кулоновского взаимодействия электронов внутри пар. Выражение (19) дает обобщение теории резонансной прыжковой проводимости, учитывающей квантовую корреляцию состояний и кулоновское взаимодействие, на случай систем с центрами локализации конечных размеров. Отметим, что полученное выражение (19) по структуре сходно с выражением для резонансной проводимости систем с точечными центрами локализации. В (19) кроме множителя $\hbar\omega + U$ (где U слабо зависит от частоты) есть и зависящий от частоты интеграл, по виду сходный с интегралом $\int_{r_\omega}^{\infty} \frac{I_{\lambda\lambda'}^2}{\sqrt{(\hbar\omega)^2 - 4I_{\lambda\lambda'}^2}} dr_{\lambda\lambda'} = \frac{\hbar\omega}{4}$ в теории для точечных центров локализации; $r_\omega = a \ln(\omega_c/\omega)$ — характерная длина прыжка на частоте ω , a — радиус локализации состояний, $\omega_c = 2I_0/\hbar$ — критическая частота, I_0 — предэкспоненциальный множитель резонансного интеграла $I_{\lambda\lambda'} = I_0 \exp(-r_{\lambda\lambda'}/a)$, а $r_{\lambda\lambda'}$ — расстояние между центрами λ, λ' , (межцентровое расстояние в паре) [7,8].

5. Особенности поведения частотной зависимости бесфононной проводимости

Из обобщения теории резонансной прыжковой проводимости неупорядоченных систем с точечными центрами на системы с областями локализации конечных размеров (массивы наногранул или квантовых точек) следует, что в области промежуточных частот, $d > w_\omega > \gamma^{-1}$, при условии слабой (неэкспоненциальной) зависимости $P(w)$ частотная зависимость бесфононной проводимости имеет универсальной степенной вид $\sigma_1^{\text{res}}(\omega) \sim \omega^s$, где $s \approx 1$.

Действительно, в области промежуточных частот, считая, что ширина распределения $P(w)$ велика по сравнению с γ^{-1} , вынесем функцию $P(w_{\lambda\lambda'})$ в (19) за знак интеграла в точке $w_{\lambda\lambda'} = w_\omega$; здесь $P(w)$ — медленно меняющаяся функция в окрестности w_ω . С учетом равенства $\int_{w_\omega}^{\infty} \frac{I_{\lambda\lambda'}^2}{\sqrt{(\hbar\omega)^2 - 4I_{\lambda\lambda'}^2}} dw_{\lambda\lambda'} = \frac{\gamma^{-1}\hbar\omega}{4}$ получаем

$$\sigma_1^{\text{res}}(\omega) = \frac{\pi^2 e^2 \gamma^{-1} g_0^2}{3d} \left(\hbar\omega + \frac{e^2}{kd} \right) \omega P(w_\omega). \quad (20)$$

Согласно (20), характерная частотная зависимость и величина проводимости зависят от размеров областей

локализации (средний диаметр гранул $d = 2R$). Для характерных значений $I_0/U_0 \sim 10^{-4}$, $\sqrt{2mU_0R^2/\hbar^2} \sim 10$, $m = 0.1m_0$ (m_0 — масса свободного электрона), $U_0 \sim 300 \text{ meV}$ оценка критической частоты и радиуса наногранулы дает $\nu_c = 2I_0/\hbar \sim 10 \text{ GHz}$ ($I_0 \sim 0.03 \text{ meV}$) и $R \approx 100 \text{ \AA}$; при этом частота перехода от линейной к квадратичной частотной зависимости проводимости, определяемая равенством $\hbar\omega_{\text{cr}} = e^2/kd$, порядка $\nu_{\text{cr}} = \omega_{\text{cr}}/2\pi \sim 1 \text{ THz}$ (при $\kappa = 10$ имеем $e^2/kd \approx 4 \text{ meV}$). Соответственно, вплоть до критической частоты $\omega_c = 2\pi\nu_c = 2I_0/\hbar$ кулоновское взаимодействие между электронами на резонансной паре центров локализации играет определяющую роль, $e^2/kd > \hbar\omega_c$, и частотная зависимость бесфононной проводимости принимает вид

$$\sigma_1^{\text{res}}(\omega) = \frac{\pi^2 e^4 \gamma^{-1} g_0^2}{3kd^2} \omega P(w_\omega); \quad (21)$$

здесь $\omega_c > \omega > \omega_c \exp(-\gamma d)$ (т.е. $\gamma^{-1} < w_\omega < d$).

Согласно (21), в промежуточной области частот, $d > w_\omega > \gamma^{-1}$, на проводимость влияет функция распределения $P(w)$, что может приводить к отклонениям от линейной частотной зависимости проводимости (универсальности). Отметим, что учет размеров гранул в случае высокочастотной релаксационной проводимости также дает частотную зависимость вида $\sigma_1^{\text{rel}}(\omega) \sim \omega P(\tilde{w}_\omega)$ (здесь $\tilde{w}_\omega = (2\gamma)^{-1} \ln(\omega_{\text{ph}}/\omega)$, ω_{ph} — характерная фононная частота, $\omega_{\text{ph}} \sim 10^{12} - 10^{13} \text{ rad/sec}$) [20].

Поскольку средний диаметр гранул d существенно превышает расстояния между поверхностями соседних гранул $w_{\lambda\lambda'}$, изменение дипольного момента системы при электронных переходах в высокочастотной области не зависит от частоты и определяется средним диаметром гранулы; при этом в выражении для проводимости массива наногранул не фигурируют логарифмические множители вида $\ln(\omega_{\text{c,ph}}/\omega)$, связанные с частотной зависимостью длины прыжка r_ω .

В окрестности частоты $\omega \sim \omega_c$ выражение (19) предсказывает замедление роста вещественной части проводимости с частотой и асимптотический выход на насыщение через область уменьшения $\sigma_1(\omega)$ при $\omega > \omega_c$.

В области частот $e^2/kd > \hbar\omega > \hbar\omega_c$ частотная зависимость проводимости (19) принимает вид

$$\sigma_1^{\text{res}} = \frac{4\pi^2 e^2 g_0^2}{3\hbar d} \frac{e^2}{kd\hbar\omega} \int_0^\infty P(w_{\lambda\lambda'}) I_{\lambda\lambda'}^2 dw_{\lambda\lambda'} \approx \frac{2\pi^2 e^2 g_0^2 \gamma^{-1}}{3\hbar d} \frac{e^2}{kd\hbar\omega} P(\gamma^{-1}) I_0^2, \quad (22)$$

где $\int_0^\infty dw P(w) I^2(w) \approx (2\gamma)^{-1} P(\gamma^{-1}) I_0^2$. Согласно (22), в области промежуточных частот аппроксимация частотной зависимости проводимости степенной функцией приводит к отрицательному значению показателя

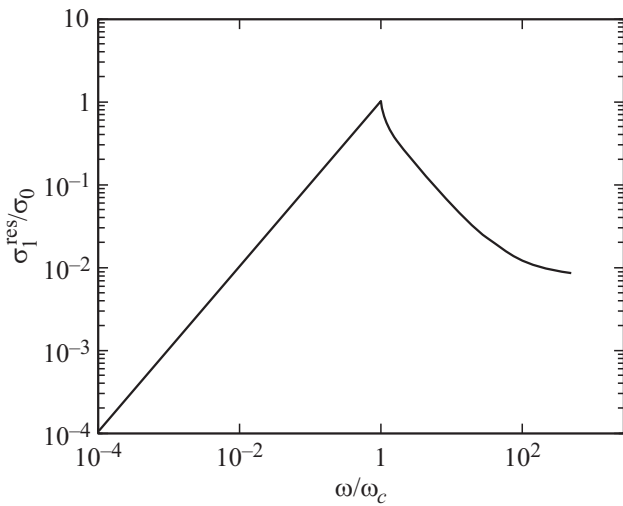


Рис. 2. Частотная зависимость вещественной части бесфононной проводимости массива наногранул, вычисленная на основе выражения (19) при условии $P(w) = \text{const}$; здесь $\sigma_0 = \frac{\pi^2 e^4 \gamma^{-1} g_0^2}{3\kappa d^2} \omega_c P$.

степени s . Немонотонность $\sigma_1^{\text{res}}(\omega)$ с ростом частоты при $\omega \sim \omega_c$ обусловлена тем, что при более низких частотах $\omega < \omega_c$ пары центров, для которых расстояние между поверхностями $w_{\lambda\lambda'} < w_\omega$, из-за отталкивания уровней, вклада в проводимость давать не могут; в то время как при более высоких частотах $\omega > \omega_c$ такого пространственного ограничения на расстояние между поверхностями гранул $w_{\lambda\lambda'}$ нет ($\hbar\omega > 2I_{\lambda\lambda'}$).

Из выражения (19) можно оценить величину бесфононной проводимости в области насыщения, $\hbar\omega > e^2/\kappa d$,

$$\begin{aligned} \sigma_{1,\text{sat}}^{\text{res}} &= \frac{4\pi^2 e^2 g_0^2}{3\hbar d} \int_0^\infty P(w_{\lambda\lambda'}) I_{\lambda\lambda'}^2 dw_{\lambda\lambda'} \\ &\approx \frac{2\pi^2 e^2 g_0^2 \gamma^{-1}}{3\hbar d} P(\gamma^{-1}) I_0^2, \end{aligned} \quad (23)$$

при этом выражение (23) можно представить в виде $\sigma_{1,\text{sat}}^{\text{res}} \approx \frac{\pi^2 e^2 g_0^2 \gamma^{-1}}{3d} P(\gamma^{-1}) \omega_c I_0$.

Согласно (21), бесфононная проводимость в окрестности критической частоты $\omega \sim \omega_c$, равна $\sigma_1^{\text{res}}(\omega_c) = \frac{\pi^2 e^4 \gamma^{-1} g_0^2}{3\kappa d^2} \omega_c P(w_\omega \approx \gamma^{-1})$, то есть $\frac{\sigma_1^{\text{res}}(\omega_c)}{\sigma_{1,\text{sat}}^{\text{res}}} \approx \frac{e^2}{\kappa d I_0}$; при этом $\sigma_1^{\text{res}}(\omega_c) > \sigma_{1,\text{sat}}^{\text{res}}$. Действительно, для характерных значений $I_0/U_0 \sim 10^{-4}$, $U_0 \sim 300$ meV предэкспоненциальный множитель резонансного интеграла порядка $I_0 \sim 0.03$ meV ($v_c = 2I_0/\hbar \sim 10$ GHz); значение радиуса наногранулы $R \approx 100$ Å отвечает $e^2/\kappa d \approx 4$ meV, т.е. $\sigma_1^{\text{res}}(\omega_c)/\sigma_{1,\text{sat}}^{\text{res}} \approx e^2/\kappa d I_0 \sim 10^2$. Следовательно, в области частот $\omega \sim \omega_c$ можно ожидать отклонений от универсальности, связанных с ослаблением частотной зависимости проводимости и ее немонотонности; при этом для характерных значений параметров при

$v > e^2/\hbar\kappa d \sim 1$ THz можно ожидать насыщения проводимости. На рис. 2 представлена частотная зависимость бесфононной проводимости на переменном токе, вычисленная на основе выражения (19) при $P(w) = \text{const}$ (случай малых энергетических потерь $s \approx 1$). Важной особенностью выражения (19) является немонотонность частотной зависимости проводимости; в области частот $\omega > \omega_c$ проводимость уменьшается с ростом частоты.

Немонотонность частотной зависимости проводимости $\sigma_1(\omega)$ гранулированной системы в окрестности частоты $\omega \sim \omega_c$ может быть связана с подавлением гибридизации электронных состояний; при этом с ростом частоты основной вклад в проводимость начинают вносить пары центров, в которых электрон не успевает гибридизоваться. Для заданной пары центров λ, λ' гибридизация характеризуется частотой Раби $\omega_R = 2I(w_{\lambda\lambda'})/\hbar$. Согласно (18), на частоте $\omega < \omega_c$ основной вклад в проводимость дают пары с межгранульными расстояниями $w_\omega < w_{\lambda\lambda'} < w_\omega + \gamma^{-1}$. Вместе с тем для пар с межцентровыми расстояниями $w_{\lambda\lambda'} > w_\omega$ имеем $\omega > \omega_R$; при этом эффекты, связанные с гибридизацией локализованных состояний, становятся несущественны. В этом случае матричный элемент в выражении для проводимости

$$\begin{aligned} \sigma_1^{\text{res}}(\omega) &= \frac{\pi e^2 \omega}{V_0} \sum_{\substack{\{\lambda\lambda'\} \\ \lambda \neq \lambda'}} |\langle \psi_{\lambda'} | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \psi_\lambda \rangle|^2 \\ &\times (n_F(\varepsilon_{\lambda'}) - n_F(\varepsilon_\lambda)) \delta \left(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'} - \frac{e^2}{\kappa r_{\lambda'\lambda}} - \hbar\omega \right) \end{aligned} \quad (24)$$

равен

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\lambda'} | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \psi_\lambda \rangle &\approx \int_{V_b+2V_c} \psi_{\lambda'} \psi_{\lambda'} \cos \theta dr \\ &\approx \psi_{\lambda'} \psi_\lambda \Big|_{V_b+2V_c} (V_b + 2V_c) R \cos \theta, \end{aligned} \quad (25.1)$$

где $d\mathbf{r} = S dr_{\parallel}$, $\Delta H_{\lambda,\lambda'} = \varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'} - \frac{e^2}{\kappa r_{\lambda'\lambda}}$ — изменение энергии при одноэлектронном переходе из состояния λ' в состояние λ , $\varepsilon_\lambda, \varepsilon_{\lambda'}$ — самосогласованные энергии электрона, отвечающие состояниям λ и λ' , θ — угол между векторами \mathbf{n} и $\mathbf{r}_{\lambda\lambda'}$; с учетом (9) имеем

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\lambda'} | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \psi_\lambda \rangle &\approx \left(\frac{A \sin(\alpha R)}{R} \right)^2 \exp(-\gamma w_{\lambda,\lambda'}) \\ &\times S_m(w_{\lambda,\lambda'} + 2\gamma^{-1}) R \cos \theta. \end{aligned} \quad (25.2)$$

При низких температурах в качестве начального состояния можно выбрать основное состояние системы; тогда все состояния с энергиями $\varepsilon_{\lambda'} < \mu$ заняты, а с энергиями $\varepsilon_\lambda > \mu$ свободны. Разность чисел заполнения отлична от нуля и равна единице, $n_F(\varepsilon_{\lambda'}) - n_F(\varepsilon_\lambda) = 1$, при условии $\varepsilon_{\lambda'} < \mu$, $\varepsilon_\lambda = \varepsilon_{\lambda'} + \frac{e^2}{\kappa r_{\lambda'\lambda}} + \hbar\omega > \mu$, т.е. при выполнении неравенств $\mu - \hbar\omega - \frac{e^2}{\kappa r_{\lambda'\lambda}} < \varepsilon_{\lambda'} < \mu$.

С учетом (17), для резонансной проводимости имеем

$$\sigma_1^{\text{res}}(\omega) = \frac{\pi e^2 g_0^2 \omega}{d^3} \int_{-(\hbar\omega + \frac{e^2}{\kappa d})}^0 d\varepsilon_{\lambda'} \int d\varepsilon_{\lambda} \int d\tilde{\Omega} dw_{\lambda\lambda'} \times P(w_{\lambda\lambda'}) |\langle \psi_{\lambda'} | (\mathbf{n}, \mathbf{r}) | \psi_{\lambda} \rangle|^2 \delta \left(\varepsilon_{\lambda} - \varepsilon_{\lambda'} - \frac{e^2}{\kappa r_{\lambda\lambda'}} - \hbar\omega \right), \quad (26)$$

где $\int (\cos \theta)^2 d\tilde{\Omega} = 4\pi/3$; энергия отсчитывается от уровня Ферми $\mu = 0$. Плотность состояний в (26) можно записать в факторизованном виде, поскольку вклад в бесфононную проводимость вносят переходы вне кулоновской щели; при этом плотность состояний близка к затравочной g_0 . Интегрируя (26), с учетом (25.2) получаем

$$\sigma_1^{\text{res}}(\omega) = \frac{\pi^2 e^2 g_0^2 \gamma^2}{3d} \left(\frac{I_0}{U_0} \right)^2 \left(\hbar\omega + \frac{e^2}{\kappa d} \right) \omega \times \int_0^{\infty} P(w) (w + 2\gamma^{-1})^2 \exp(-2\gamma w) dw, \quad (27)$$

где $\int_0^{\infty} P(w) (w + 2\gamma^{-1})^2 \exp(-2\gamma w) dw \approx P(\gamma^{-1})/4\gamma^3$; при этом выражение для вещественной части бесфононной проводимости принимает вид

$$\sigma_1^{\text{res}}(\omega) = \frac{\pi^2 e^2 \gamma^{-1} g_0^2}{3d} \left(\frac{I_0}{2U_0} \right)^2 \left(\hbar\omega + \frac{e^2}{\kappa d} \right) \omega P(\gamma^{-1}). \quad (28)$$

Таким образом, с учетом подавления гибридизации состояний в области частот $\omega > \omega_c$ фактор уменьшения проводимости равен $I_0^2/U_0^2 \sim 10^{-7}$ (рис. 1, a, b).

6. Заключение

Обобщение теории бесфононной проводимости систем с точечными примесными центрами на системы с областями локализации конечных размеров (массивы наногранул или квантовых точек) показало, что в промежуточной области частот, $d > w_{\omega} > \gamma^{-1}$, проводимость зависит от функции распределения величин расстояний между поверхностями гранул $P(w)$; это может приводить к отклонениям от линейной частотной зависимости вещественной части проводимости. В окрестности частоты $\omega \sim \omega_c$ для неупорядоченных гранулированных систем следует ожидать отклонений от универсальности ($s \approx 1$) частотной зависимости проводимости $\sigma_1(\omega)$ и ее немонотонности; при этом с увеличением размера гранул немонотонность $\sigma_1(\omega)$ должна проявляться при меньших частотах. Такое поведение частотной характеристики обусловлено тем, что для случая гранулированных систем частота ω_c заметно уменьшается по сравнению со значениями, характерными для систем

точечных (водородоподобных) центров локализации, в связи с уменьшением предэкспоненциального множителя резонансного интеграла I_0 .

Список литературы

- [1] F. Kremer, A. Schonhals. Broadband dielectric spectroscopy. Springer, Berlin, N.Y. (2003). 729 p.
- [2] I.P. Zvyagin. In: Charge Transport in Disordered Solids with Applications in Electronics / Ed. S. Baranovski. John Wiley & Sons, Chichester (2006). P. 339.
- [3] И.П. Звягин. Кинетические явления в неупорядоченных полупроводниках. Изд-во МГУ, М. (1984). 192 с.
- [4] M. Pollak, T.H. Geballe. Phys. Rev. **122**, 1742 (1961).
- [5] I.G. Austin, N.F. Mott. Adv. Phys. **18**, 41 (1969).
- [6] A.L. Efros. Philos. Mag. B **43**, 829 (1981).
- [7] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. ЖЭТФ **81**, 406 (1981).
- [8] N.F. Mott. Philos. Mag. **22**, 7 (1970).
- [9] M. Lee, M.L. Stutzmann. Phys. Rev. Lett. **87**, 056402 (2001).
- [10] E. Helgren, N.P. Armitage, G. Gruner. Phys. Rev. B **69**, 014201 (2004).
- [11] M. Hering, M. Scheffler, M. Dressel, H. Lohneysen. Phys. Rev. B **75**, 205203 (2007).
- [12] J.A. Reedijk, L.J. Adriaanse, H.B. Brom, L.J. de Jongh, G. Schmid. Phys. Rev. B **57**, R15116 (1998).
- [13] И.П. Звягин, М.А. Ормонт. Вестн. МГУ. Физика, астрономия, **4**, 44 (2008).
- [14] М.А. Ормонт, И.П. Звягин. ФТП **49**, 4, 449 (2015).
- [15] М.А. Ормонт. ФТП **49**, 10, 1314 (2015).
- [16] М.А. Ормонт, И.П. Звягин. ФТП **52**, 2, 161 (2018).
- [17] М.А. Ормонт, И.П. Звягин. ФТТ, **60**, 5, 880 (2018).
- [18] A. Chandra Bose, P. Balaya, P. Thangadurai, S. Ramasamy. J. Phys. Chem. Solids **64**, 659 (2003).
- [19] H.B. Brom, M.A.J. Michels. Phil. Mag. B **81**, 941 (2001).
- [20] I.P. Zvyagin. In: Abstracts to 14 Int. Symp. „Nanostructures: Physics and Technology“, St.Petersburg, Russia, 2006. P. 226.
- [21] I.P. Zvyagin. Phys. Stat. Solidi C **3**, 300 (2006).
- [22] I.P. Zvyagin, R. Keiper. Phil. Mag. B **81**, 997 (2001).
- [23] В.Л. Бонч-Бруевич, И.П. Звягин, Р. Кайпер, А.Г. Миронов, Р. Эндерлайн, Б. Эссер. Электронная теория неупорядоченных полупроводников. Наука, М. (1981). 384 с.
- [24] А.С. Давыдов. Квантовая механика, Изд-во физ.-мат. лит., М. (1963).
- [25] I.P. Zvyagin, M.A. Ormont. In: Reviews and Short Notes to Int. Conf. „Nanomeeting-2007“ / Eds V.E. Borisenko, S.V. Gaponenko, V.S. Gurin. Minsk (2007). P. 85.

Редактор Т.Н. Василевская