

01

# Аналитическое описание прыжковой электропроводности компенсированных полупроводников и расчеты на примере $p\text{-Ge:Ga}$

© Н.А. Поклонский,<sup>1</sup> И.И. Аникеев,<sup>1</sup> С.А. Вырко,<sup>1</sup> А.Г. Забродский<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Белорусский государственный университет,  
220030 Минск, Беларусь

<sup>2</sup> Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
194021 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: poklonski@bsu.by

Поступило в Редакцию 29 апреля 2024 г.

В окончательной редакции 6 мая 2024 г.

Принято к публикации 13 мая 2024 г.

Предложены аналитические выражения для префактора  $\sigma_{03}$  и энергии термической активации  $\varepsilon_3$ -электропроводности  $\sigma_h = \sigma_{03} \exp(-\varepsilon_3/k_B T)$  компенсированных полупроводников  $n$ - и  $p$ -типа на постоянном токе по водородоподобным примесям. Полученные формулы применимы для описания прыжковой миграции как дырок по акцепторам, так и электронов по донорам. Для определенности рассмотрены кристаллические полупроводники  $p$ -типа в диапазоне уровней легирования, соответствующем изоляторной стороне концентрационного фазового перехода изолятор–металл (Мотта). Для упрощения считалось, что основные и компенсирующие примеси образуют единую простую нестехиометрическую кубическую решетку в кристаллической матрице. Расчет величин  $\sigma_{03}$  и  $\varepsilon_3$  основан на предварительном определении характерной температуры  $T_3$ , в области которой наблюдаются ассистированные фононами туннельные прыжки дырок между ближайшими по расстоянию акцепторами. Учтено смещение потолка  $v$ -зоны в глубь запрещенной зоны из-за формирования из возбужденных состояний нейтральных акцепторов квазинепрерывной полосы разрешенных значений энергии для дырок  $v$ -зоны. Распределение плотности состояний дырок в акцепторной зоне предполагалось гауссовым. Принималось также во внимание влияние конфигурационной и тепловой энтропии дырок в акцепторной зоне на величины  $\sigma_{03}$  и  $\varepsilon_3$ . Рассчитанные по полученным формулам величины  $\sigma_{03}$  и  $\varepsilon_3$  для умеренно компенсированного  $p\text{-Ge:Ga}$  количественно согласуются с известными экспериментальными данными на всей изоляторной стороне перехода Мотта.

**Ключевые слова:** легированный и умеренно компенсированный полупроводник, водородоподобные примеси, прыжковый режим миграции носителей заряда по примесям, стационарная прыжковая электропроводность, энергия термической активации и префактор  $\varepsilon_3$ -электропроводности, порог подвижности, кристаллы  $p\text{-Ge:Ga}$ .

DOI: 10.61011/JTF.2024.06.58124.158-24

## Введение

Температурная зависимость прыжковой электропроводности  $\sigma_h$  при прыжках дырок между ближайшими по расстоянию водородоподобными акцепторами в ковалентных полупроводниках (для определенности будем рассматривать кристаллические полупроводники  $p$ -типа) представляется в виде [1–5]:

$$\sigma_h = \frac{1}{\rho_h} = \sigma_{03} \exp\left(-\frac{\varepsilon_3}{k_B T}\right), \quad (1)$$

где  $\sigma_{03} \equiv 1/\rho_{03}$  — префактор, который определяется путем экстраполяции зависимости  $\ln \rho_h(1/T)$  к нулю обратной температуры  $1/T \rightarrow 0$  (рис. 1),  $\varepsilon_3$  — энергия термической активации прыжкового переноса дырок по акцепторам,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — абсолютная температура.

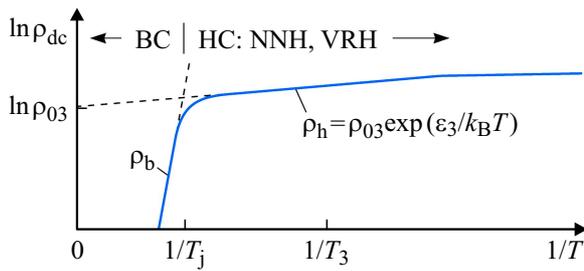
Интерес и основную сложность при использовании формулы (1) представляет вывод аналитических выраже-

ний для величин префактора  $\sigma_{03}$  и энергии термической активации  $\varepsilon_3$  в зависимости от концентрации  $N_a$  акцепторов и степени их компенсации  $K$  водородоподобными донорами. Так, для слабо легированных полупроводников согласно Шкловскому и Эфросу [3]:

$$\rho_{03} = \rho_0 \exp\left(\frac{\delta}{a_i N_a^{1/3}}\right), \quad (2)$$

где  $\rho_0$  — неизвестная степенная функция  $N_a$  и  $T$ ;  $\delta(K)$  — параметр, зависящий от степени компенсации (например,  $\delta(0.2) \approx 1.78$ ,  $\delta(0.5) \approx 1.81$ ,  $\delta(0.8) \approx 1.98$ );  $a_i$  — радиус локализации легкой дырки на одиночном акцепторе.

При температурах и уровнях легирования, удовлетворяющих неравенству  $0.3 < e^2 N_a^{2/3} a_i / 4\pi \varepsilon_r \varepsilon_0 T < 1$ , зависимость энергии термической активации  $\varepsilon_3$  от концентрации акцепторов  $N_a$  и степени их компенсации  $K$  для



**Рис. 1.** Удельное электрическое сопротивление кристаллического полупроводника  $p$ -типа на постоянном токе  $\rho_{dc}$  в аррениусовском масштабе. При температуре  $T = T_j$  зонная  $\sigma_{bj} = 1/\rho_{bj}$  и прыжковая  $\sigma_{hj} = 1/\rho_{hj}$  электропроводности равны;  $T_3 \approx T_j/3$  — температура, при которой определяется термическая энергия активации прыжковой электропроводности; BC (band conduction) — зонная электропроводность, HC (hopping conduction) — прыжковая электропроводность, NNH (nearest neighbor hopping) — ассистированные фононами туннельные прыжки дырок между ближайшими по расстоянию акцепторами в зарядовых состояниях (0) и (-1) с энергией активации  $\epsilon_3$ ; VRH (variable range hopping) — оптимизированные по энергии активации и длине прыжки дырок между акцепторами.

слабо легированных полупроводников имеет вид [3]:

$$\epsilon_3 = \frac{e^2 N_a^{1/3}}{4\pi \epsilon_r \epsilon_0} F(K), \quad (3)$$

где  $e$  — элементарный заряд,  $\epsilon_r$  — относительная статическая диэлектрическая проницаемость (определяется электронами  $v$ -зоны на фоне ионных остовов кристаллической матрицы),  $\epsilon_0$  — электрическая постоянная,  $F(K)$  — функция степени компенсации  $K$  (например,  $F(0.2) \approx 0.71$ ,  $F(0.5) \approx 0.73$ ,  $F(0.8) \approx 1.12$ ).

Однако расчеты по формуле (3) дают значения величины  $\epsilon_3$  большие, чем экспериментально наблюдаемые. Кроме того, эта формула применима только в области низких концентраций основных примесей, в которой еще не наблюдается перекрытие их волновых функций, т.е. она не учитывает вклад в  $\epsilon_3$ -проводимость расщепления уровней энергии близко расположенных основных примесей („молекулярных пар“).

Ранее в [6–8] была предложена модель расчета концентрационных зависимостей префактора  $\sigma_{03}$  и энергии термической активации  $\epsilon_3$  в кристаллических полупроводниках  $p$ - и  $n$ -типа. Полагалось, что атомы примесей образуют в кристаллической матрице единую простую кубическую нестехиометрическую решетку. Прыжки дырок происходят при термически активированном „выравнивании“ уровней энергии акцепторов в зарядовых состояниях (0) и (-1), в то время как компенсирующие их доноры блокируют часть узлов примесной решетки.

Однако в работах [6–8] при расчетах величин  $\sigma_{03}$  и  $\epsilon_3$  не был обоснован выбор характерной температуры, при которой реализуются прыжки дырок между ближайшими атомами основной примеси. Позднее в [9]

было получено аналитическое выражение для величины  $T_3 = T_j/3$  как характерной температуры, в области которой реализуются прыжки по ближайшим соседям (NNH). Здесь  $T_j$  — температура перехода от „свободного“ движения дырок  $v$ -зоны к их прыжковой миграции между акцепторами в зарядовых состояниях (0) и (-1). Помимо этого, в [6–8] не учитывался сдвиг потолка  $v$ -зоны в глубь запрещенной из-за формирования квазинепрерывного спектра энергий вследствие объединения возбужденных состояний акцепторов при достаточно высокой их концентрации. Отметим также, что вклад в величины  $\sigma_{03}$  и  $\epsilon_3$  могут вносить конфигурационная и тепловая энтропии (см., например, [10–12]). Заметим, что в [6–8,13] влияние на величины  $\epsilon_3$  и  $\sigma_{03}$  степени компенсации не изучалось.

Цель настоящей работы — предложить модель для количественного описания прыжковой проводимости по ближайшим примесям, включая поведение величин префактора  $\sigma_{03}$  и энергии термической активации  $\epsilon_3$  с изменением уровня легирования и степени компенсации в умеренно компенсированных полупроводниках на изоляторной стороне фазового перехода изолятор–металл (Мотта), а также сравнить выполненные по ней аналитические и численные расчеты с экспериментальными данными [14–23] для кристаллов  $p$ -Ge:Ga. Выбор материала для сравнения обусловлен тем, что в нем можно осуществить однородное и контролируемое введение основных примесей — акцепторов (галлия) и компенсирующих доноров посредством нейтронного трансмутационного легирования тепловыми реакторными нейтронами с последующим отжигом радиационных дефектов. Физико-технологические аспекты такого легирования применительно к германию различного изотопного состава представлены в [24–26].

## 1. Модель примесной решетки в кристаллической матрице для расчета $\epsilon_3$ -электропроводности

Рассмотрим кристаллический полупроводник  $p$ -типа, легированный водородоподобными акцепторами с концентрацией  $N_a = N_{a,0} + N_{a,-1}$  и компенсированный водородоподобными донорами с концентрацией  $N_d = KN_a$ . Здесь  $N_{a,0}$  и  $N_{a,-1}$  — концентрации акцепторов в зарядовых состояниях (0) и (-1) соответственно,  $0 < K < 1$  — степень компенсации акцепторов донорами. Все компенсирующие доноры находятся в зарядовом состоянии (+1). Условие электрической нейтральности кристалла при концентрации дырок  $v$ -зоны  $p \ll K(1 - K)N_a$  имеет вид:  $N_{a,-1} = KN_a$ . Отсюда следует:  $N_{a,0} = (1 - K)N_a$ .

В кристаллическом полупроводнике  $p$ -типа плотность стационарного прыжкового тока  $J_{hp} = J_{0,-1}$  дырок между ближайшими по расстоянию акцепторами в зарядо-

вых состояниях (0) и (−1) имеет вид [7]:

$$J_{hp} = eN_{hp} \left[ M_h E - D_h \frac{d}{dx} \ln \left( \frac{N_{a,0}}{N_{a,-1}} \right) \right] = \sigma_h E - eD_h \frac{dN_{a,0}}{dx},$$

где  $N_{hp} = N_{a,0}N_{a,-1}/N_a = K(1-K)N_a$  — эффективная концентрация прыгающих по акцепторам дырок,  $M_h$  — прыжковая дрейфовая подвижность дырок,  $E$  — направленная вдоль оси  $x$  напряженность внешнего электрического поля в полупроводнике,  $D_h$  — коэффициент прыжковой диффузии дырок;  $\sigma_h = eN_{hp}M_h$ .

В кристаллическом полупроводнике  $n$ -типа плотность стационарного прыжкового тока  $J_{hn} = J_{0,+1}$  электронов между ближайшими по расстоянию донорами в зарядовых состояниях (0) и (+1) имеет вид [6]:

$$J_{hn} = eN_{hn} \left[ M_h E + D_h \frac{d}{dx} \ln \left( \frac{N_{d,0}}{N_{d,+1}} \right) \right] = \sigma_h E + eD_h \frac{dN_{d,0}}{dx},$$

где  $N_{hn} = N_{d,0}N_{d,+1}/N_d$  — эффективная концентрация прыгающих по донорам электронов,  $M_h$  и  $D_h$  — прыжковая дрейфовая подвижность и коэффициент прыжковой диффузии электронов;  $\sigma_h = eN_{hn}M_h$ .

Отметим, что выражения для плотностей прыжковых токов дырок по акцепторам ( $J_{hp}$ ) и электронов по донорам ( $J_{hn}$ ) в целом подобны выражениям (см., например, [27,28]) для плотностей токов делокализованных дырок  $v$ -зоны и электронов  $c$ -зоны.

Прыжковую электрическую проводимость  $\sigma_h$  на постоянном токе измеряют при постоянных внешнем давлении  $P$ , температуре  $T$  и постоянном числе акцепторов  $N_a V$  и доноров  $KN_a V$  в кристаллическом образце объемом  $V$ . Прыжковая миграция дырок в акцепторной зоне характеризуется энергией активации  $\varepsilon_3$ . В этих условиях выражение для  $\sigma_h$  по аналогии с уравнением Аррениуса (см., например, [29]) можно представить в виде

$$\sigma_h = \tilde{\sigma}_{03} \exp[-(h_3 - s_3 T)/k_B T], \quad (4)$$

где  $h_3(T) = \varepsilon_3(T) + P v_3(T)$  — средняя по объему  $V$  образца энтальпия,  $\varepsilon_3(T)$  — средняя энергия, необходимая для реализации элементарного акта термически активированного туннелирования дырки между двумя акцепторами в зарядовых состояниях (0) и (−1),  $v_3(T)$  — среднее изменение суммарного „объема“ двух акцепторов при прыжке дырки между ними,  $s_3(T) = s_{3t}(T) + s_{3m}$  — сумма средней тепловой энтропии  $s_{3t}(T)$  активации прыжков дырки и конфигурационной энтропии  $s_{3m}$  дырок на акцепторах (ее величина практически не зависит от температуры).

Температурные зависимости величин  $\varepsilon_3(T)$ ,  $v_3(T)$  и  $s_3(T)$  связаны уравнением (см., например, [30,31]):

$$T(\partial s_{3t}/\partial T)_{P,NV} = (\partial \varepsilon_3/\partial T)_{P,NV} + P(\partial v_3/\partial T)_{P,NV}, \quad (5)$$

где  $NV = (N_a + N_d)V$  — число примесей в образце объемом  $V$ .

Из (4) при учете (5) получаем

$$-k_B[\partial \ln(\sigma_h/\tilde{\sigma}_{03})/\partial(1/T)]_{P,NV} = h_3(T) = \varepsilon_3(T) + P v_3(T), \quad (6)$$

т.е. производная по  $1/T$  от логарифма отношения  $\sigma_h/\tilde{\sigma}_{03}$  пропорциональна энтальпии  $h_3(T)$  термической активации прыжковой  $\varepsilon_3$ -электропроводности.

С высокой точностью среднее изменение суммарного „объема“  $v_3(T)$  двух акцепторов в зарядовых состояниях (0) и (−1) при прыжке дырки между ними пренебрежимо мало, так что из (4) имеем

$$\sigma_h = \sigma_{03} \exp[-(\varepsilon_3 - s_{3t} T)/k_B T], \quad (7)$$

где конфигурационная энтропия  $s_{3m}$  включена в префактор  $\sigma_{03} = \tilde{\sigma}_{03} \exp(s_{3m}/k_B)$ .

Следуя [8,32], предположим для упрощения расчетов, что легирующие и компенсирующие примеси образуют в кристаллической матрице нестехиометрическую простую кубическую решетку с периодом трансляции  $d_{im}$ . Примем, что  $d_{im}$  — длина прыжка дырки между акцепторами, и рассмотрим два варианта примесной решетки с периодами трансляции:

$$1) d_{im1} = 2R_{im1} = 2[4\pi(1+K)N_a/3]^{-1/3} \\ \approx 1.24[(1+K)N_a]^{-1/3},$$

где  $R_{im1}$  — радиус сферической области, приходящейся на один атом примеси в решетке;

$$2) d_{im2} = B_c^{1/3} R_{im1} = B_c^{1/3}[4\pi(1+K)N_a/3]^{-1/3} \\ \approx 0.867[(1+K)N_a]^{-1/3}$$

— расстояние между акцепторами, равное перколяционному радиусу сферической области, приходящейся на один акцептор при учете доноров, блокирующих прыжки дырок. Здесь  $B_c \approx 2.735$  — безразмерный параметр — среднее число „прыжковых“ связей на один акцептор [3,33–36]. При перколяционном радиусе  $d_{im2}$  зарядовое состояние (−1) акцептора, будучи активированным и „оторванным“ от иона донора, способно мигрировать прыжковым образом по акцепторам через кристалл. В целом величина  $d_{im2}$  отражает эффект самоизбегающих блужданий (по терминологии [37]) дырок по акцепторам.

Для примесей, формирующих в кристаллическом полупроводнике нестехиометрическую простую кубическую „решетку“ с периодом трансляции  $d_{im}$ , температуру  $T_j$  перехода от миграции дырок по состояниям  $v$ -зоны к прыжковой миграции дырок между акцепторами (по аналогии с работой [9]) определим из теоремы вириала при концентрации дырок  $v$ -зоны  $p \ll KN_a$  в виде

$$T_j = \frac{1}{3k_B} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_r\varepsilon_0 R_{ch}}, \quad (8)$$

где  $R_{ch}$  — радиус сферической области, приходящейся на ион примеси в кристалле. По варианту 1) величина

$R_{ch1} = [(4\pi/3)2KN_a]^{-1/3} \approx 0.62(2KN_a)^{-1/3}$ ; по варианту 2)  $R_{ch2} = (B_c^{1/3}/2)[(4\pi/3)2KN_a]^{-1/3} \approx 0.434(2KN_a)^{-1/3}$ ;  $2KN_a = N_{a,-1} + N_d$  — концентрация ионов водородоподобных примесей в кристаллической матрице.

При температурах  $T < T_j$  условие электрической нейтральности кристалла имеет вид

$$N_{a,-1} = N_a \int_{-\infty}^{+\infty} f_{-1} G_a d(E_a - I_a) = N_a \langle f_{-1} \rangle = KN_a, \quad (9)$$

где  $f_{-1}$  — вероятность нахождения акцептора в зарядовом состоянии  $(-1)$  с уровнем энергии  $E_a > 0$  в акцепторной зоне,  $G_a$  — плотность распределения уровней энергии  $E_a$  относительно значения энергии термической ионизации  $I_a = e^2/8\pi\epsilon_r\epsilon_0 a_p$  одиночного акцептора с борновским радиусом  $a_p$  орбиты дырки.

Для концентрации электрически нейтральных акцепторов при  $T < T_j$  имеем

$$N_{a,0} = N_a \int_{-\infty}^{+\infty} f_0 G_a d(E_a - I_a) = N_a \langle f_0 \rangle = (1 - K)N_a, \quad (10)$$

где  $f_0$  — вероятность нахождения произвольного акцептора с уровнем энергии  $E_a$  в зарядовом состоянии  $(0)$ .

Далее, следуя [38], считаем, что уровни энергии акцепторов в запрещенной зоне имеют нормальную (гауссову) плотность распределения

$$G_a = \frac{1}{\sqrt{2\pi}W_a} \exp\left(-\frac{(E_a - I_a)^2}{2W_a^2}\right), \quad (11)$$

где  $W_a$  — эффективная ширина акцепторной зоны (рис. 2).

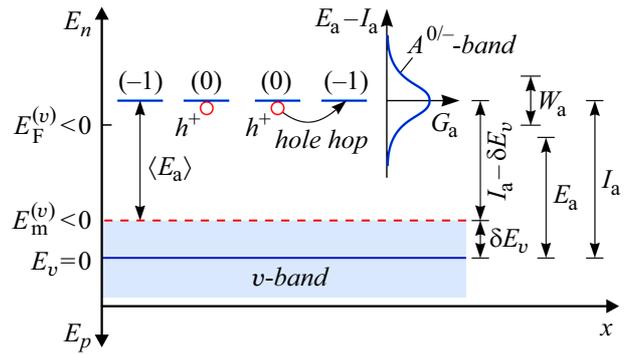
Вероятность того, что произвольный акцептор с уровнем энергии  $E_a > 0$  выше потолка  $v$ -зоны ( $E_v = 0$ ) ионизован

$$f_{-1} = 1 - f_0 = \left[1 + \beta_a \exp\left(\frac{E_a + E_F^{(v)}}{k_B T}\right)\right]^{-1}. \quad (12)$$

Здесь  $\beta_a$  — фактор вырождения уровня энергии водородоподобного акцептора,  $E_F^{(v)} < 0$  — уровень Ферми в запрещенной зоне, отсчитываемый от потолка  $v$ -зоны нелегированного кристалла,  $\xi - k_B T \ln \beta_a = E_F^{(v)} + I_a$  — уровень Ферми, отсчитанный от уровня энергии  $I_a$  одиночного акцептора.

При учете кулоновского взаимодействия ионизованного акцептора (в зарядовом состоянии  $(-1)$ ) только с ионами в первой координационной сфере нестехиометрической кубической примесной решетки ширина акцепторной зоны равна [39]

$$W_a = \left(\sum_{i=1}^6 P_i U_i^2\right)^{1/2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 d_{im}} \left(\frac{12K}{1+K}\right)^{1/2}, \quad (13)$$



**Рис. 2.** Энергия электрона  $E_n$  и энергия дырки  $E_p$  в зависимости от координаты  $x$  на одноэлектронной зонной диаграмме полупроводника  $p$ -типа:  $E_v = 0$  — потолок валентной зоны нелегированного кристалла; „hole hop“ — термически активированный прыжок дырки ( $h^+$ ) между акцепторами  $(0)$  и  $(-1)$  в центре акцепторной зоны  $A^{0/-}$ ;  $I_a > 0$  — энергия термической ионизации одиночного акцептора,  $E_F^{(v)} < 0$  — уровень Ферми,  $E_m^{(v)} < 0$  — порог подвижности для дырок  $v$ -зоны,  $\delta E_v = -E_m^{(v)} > 0$  — сдвиг потолка  $v$ -зоны в глубь запрещенной зоны полупроводника из-за объединения возбужденных состояний примесей,  $W_a$  — среднеквадратичная флуктуация уровней энергии акцепторов.

где  $P_i = 2K/(1+K)$  — вероятность того, что около выделенного иона примеси любой из шести узлов примесной решетки в первой координационной сфере занят ионизованным акцептором или донором;  $1/(1+K)$  — доля акцепторов в узлах примесной решетки;  $|U_i| = e^2/4\pi\epsilon_r\epsilon_0 d_{im}$  — модуль кулоновской энергии взаимодействия выделенного иона с одним из расположенных на расстоянии  $d_{im} = 2R_{im}$  ближайших ионов в решетке из легирующих и компенсирующих примесей. При получении формулы (13) учтено, что средняя по кристаллу энергия кулоновского взаимодействия выделенного иона примеси с ионами в ближайших к нему шести узлах примесной решетки равна нулю:

$$\sum_{i=1}^6 P_i U_i = 0.$$

Среднее значение энергии термической ионизации среднестатистического акцептора в зарядовом состоянии  $(0)$ , т. е. из центра акцепторной зоны (рис. 2) [40]:

$$\langle E_a \rangle = I_a \left(1 - \frac{a_p}{R_{im}}\right) = I_a - \delta E_v, \quad (14)$$

где  $I_a$  — уровень энергии одиночного водородоподобного акцептора,  $R_{im} = d_{im}/2$  — радиус сферической области в полупроводнике, приходящейся на один атом примеси,  $\delta E_v = I_a a_p / R_{im} > 0$  — уменьшение энергии термической ионизации акцептора в зарядовом состоянии  $(0)$  из-за перекрытия возбужденных состояний нейтральных акцепторов при увеличении их концентрации и образования квазинепрерывной полосы разрешенных значений энергии для дырок  $v$ -зоны.

При температуре  $T_3 = T_j/3$ , когда  $W_a \gg k_B T_3$  и

$$f_0 f_{-1} \rightarrow k_B T_3 \delta(E_a + k_B T_3 \ln \beta_a + E_F^{(v)}),$$

где  $\delta(E_a + k_B T_3 \ln \beta_a + E_F^{(v)})$  — дельта-функция Дирака, величина  $\xi = k_B T_3 \ln \beta_a + I_a + E_F^{(v)}$  находится из уравнения электронейтральности (9) в виде

$$2K \approx 1 - \operatorname{erf}(\xi/\sqrt{2}W_a), \quad (15)$$

где  $\operatorname{erf}(\cdot)$  — функция ошибок.

Прыжковая теплоемкость  $C_h = -d\langle E_h \rangle/dT$ , приходящаяся на одну дырку в акцепторной зоне  $A^{0/-}$  есть производная по абсолютной температуре  $T$  от средней энергии  $\langle E_h \rangle$  электронейтрального акцептора и имеет вид (см. Приложение):

$$C_h = \frac{1}{(1-K)k_B T^2} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} E_a^2 G_a f_0 f_{-1} d(E_a - I_a) - \frac{\xi_h}{K(1-K)} \left( \int_{-\infty}^{+\infty} E_a G_a f_0 f_{-1} d(E_a - I_a) \right)^2 \right], \quad (16)$$

где  $\xi_h \geq 1$  — безразмерный параметр [38]:

$$\frac{1}{\xi_h} = \frac{k_B T M_h}{e D_h} = \frac{1}{K(1-K)} \int_{-\infty}^{+\infty} G_a f_0 f_{-1} d(E_a - I_a). \quad (17)$$

Для узкой акцепторной зоны, когда  $W_a \ll k_B T_3$  и  $G_a \rightarrow \delta(E_a - I_a)$ , из уравнения (9) с учетом (11), (12) получаем  $\xi = k_B T_3 \ln \beta_a + E_F^{(v)} + I_a \approx -k_B T_3 \ln[K/(1-K)]$ . В этом случае из (17) с учетом (11)–(13) следует, что  $\xi_h \approx 1$  и  $C_h = 0$ .

Для широкой акцепторной зоны, когда  $W_a \gg k_B T_3$  и

$$f_0 f_{-1} \rightarrow k_B T \delta(E_a + k_B T_3 \ln \beta_a + E_F^{(v)}),$$

уравнение (9) при учете (11), (12) принимает вид  $2K \approx 1 - \operatorname{erf}(\xi/\sqrt{2}W_a)$ . В этом случае из (17) имеем  $\xi_h \approx K(1-K)\gamma\sqrt{2\pi} \exp(\xi^2/2W_a^2)$  и  $C_h = qT_3$ , где  $\gamma = W_a/k_B T_3 \gg 1$  и  $q$  — некоторая постоянная.

Безразмерный параметр  $\xi_h \geq 1$  характеризует различие в степени влияния флуктуаций электростатической потенциальной энергии в кристалле из-за его легирования на коэффициент прыжковой диффузии и дрейфовую прыжковую подвижность дырок в акцепторной зоне. Для узкой акцепторной зоны ( $W_a \ll k_B T_3$ ) параметр  $\xi_h = 1$  и  $D_h/M_h = k_B T_3/e$ .

Средняя тепловая энтропия  $s_{3t} = s_{3t}(T)$  активации прыжков дырки между акцепторами есть (см. формулу (П6) из Приложения)

$$s_{3t} = \int_0^T \frac{C_h(T')}{T'} dT', \quad (18)$$

где  $C_h$  — прыжковая теплоемкость, приходящаяся на одну дырку в акцепторной зоне по формуле (16).

Приходящаяся на один акцептор в кристаллической матрице полупроводника объемом  $V$  конфигурационная энтропия распределения электрически нейтральных состояний водородоподобных акцепторов числом  $N_{a,0}V = (1-K)N_aV$  по всем акцепторам есть (см. формулу (П9) из Приложения):

$$s_{3m} = -k_B \ln[K^K(1-K)^{1-K}], \quad (19)$$

где  $0 < K < 1$ .

Отметим, что конфигурационная энтропия  $s_{3m}$  по формуле (19) совпадает с предложенной в работе [12] формулой для энтропии, описывающей число способов размещения „свободных“ дырок  $v$ -зоны по акцепторам при концентрации дырок  $p \ll K(1-K)N_a$ .

## 2. Формулы для префактора $\sigma_{03}$ и энергии активации $\varepsilon_3$

Усредненная по всем возможным ориентациям нестехиометрической примесной решетки относительно направления напряженности внешнего электрического поля прыжковая проводимость  $\sigma_h = 1/\rho_h$  с учетом тепловой энтропии  $s_{3t} = s_{3t}(T)$  по формуле (18) и конфигурационной энтропии  $s_{3m}$  по формуле (19) дается выражением (ср. [6–8]):

$$\begin{aligned} \sigma_h &= \frac{e^2 K^{1-K} (1-K)^K N_a d_{im}^2 \Gamma_h}{12(1+K)\xi_h k_B T} \\ &= \tilde{\sigma}_{03} \exp\left(-\frac{h_3 - s_{3t}}{k_B T}\right) = \sigma_{03} \exp\left(-\frac{\varepsilon_3 - s_{3t}}{k_B T}\right), \end{aligned} \quad (20)$$

где  $\sigma_h = eN_{hp}M_h$  — удельная прыжковая электропроводность в направлении внешнего электрического поля,  $N_{hp} = K(1-K)N_a$  — эффективная концентрация прыгающих между акцепторами дырок,  $d_{im}$  — длина прыжка дырки; здесь учтено, что  $\sigma_{03} = \tilde{\sigma}_{03} \exp(s_{3m}/k_B)$  (см. формулы (4) и (7)), а также  $D_h/M_h = \xi_h k_B T/e$  — отношение коэффициента диффузии прыгающих дырок к их дрейфовой прыжковой подвижности [38];  $s_3(T) = s_{3m} + s_{3t}(T)$ .

Специально отметим, что в формуле (20) учтены прыжки дырок только по ребрам примесной кубической решетки при произвольной ее ориентации по отношению к направлению напряженности внешнего электрического поля в макроскопическом образце полупроводника [6,7].

Входящая в формулу (20) средняя по примесной решетке частота прыжков дырки:

$$\begin{aligned} \Gamma_h &\approx \frac{1}{\tau_3 K(1-K)} \int_{-\infty}^{+\infty} G_a f_0 f_{-1} d(E_a - I_a) \\ &= \frac{1}{\tau_3 \xi_h} \equiv \Gamma_3 \exp\left(-\frac{\varepsilon_3 - s_{3t}}{k_B T}\right), \end{aligned} \quad (21)$$

где  $\Gamma_3 = 1/\tau_F \equiv 1/\tau_3$  — частота туннелирования дырки между акцепторами в зарядовых состояниях (0) и (-1). В формулу (21) входит уровень Ферми  $E_F^{(v)}$ . Для его нахождения условие электрической нейтральности (9) может быть разрешено относительно величины  $\xi - k_B T \ln \beta_a = E_F^{(v)} + I_a$ . Тогда получаем значение уровня Ферми  $E_F^{(v)} = \xi - k_B T \ln \beta_a - I_a < 0$  относительно потолка  $v$ -зоны нелегированного кристаллического полупроводника  $p$ -типа (рис. 2).

В рамках теории молекулярного иона водорода  $H_2^+$  время туннелирования дырки между двумя акцепторами (индексы 1 и 2), находящимися на расстоянии  $d_{im}$  при разности между их уровнями энергии  $\Delta_{a12} = E_{a2} - E_{a1} = \sqrt{3} \delta E_{at}$  можно оценить, следуя [41], так:

$$\tau_3 = \tau_F = \frac{\pi \hbar}{\delta E_{at}} \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta_{a12}}{\delta E_{at}}\right)^2} = \frac{2\pi \hbar}{\delta E_{at}}, \quad (22)$$

где  $2\pi \hbar = h$  — постоянная Планка,  $\delta E_{at}(E_F^{(v)})$  — уширение (расщепление) уровней энергии  $E_{at} = E_m^{(v)} - E_F^{(v)}$  двух акцепторов из-за туннелирования между ними дырки:

$$\delta E_{at} = 4E_{at} \frac{A - BS}{1 - S^2},$$

$$A = (1 + \rho) \exp(-\rho); \quad B = [1 - (1 + \rho) \exp(-2\rho)]/\rho,$$

$$\rho = d_{im}/a_t, \quad S = (1 + \rho + \rho^2/3) \exp(-\rho). \quad (23)$$

Здесь по варианту 1)  $d_{im1} \approx 1.24[(1 + K)N_a]^{-1/3}$  и по варианту 2)  $d_{im2} \approx 0.867[(1 + K)N_a]^{-1/3}$ ;  $a_t = e^2/8\pi\epsilon_r\epsilon_0 E_{at}$ .

Для префактора (предэкспоненциального множителя) в температурной зависимости (7) из выражения (20) с учетом (21) получаем

$$\sigma_{03} = \frac{\tilde{\sigma}_{03}}{K^K(1-K)^{1-K}} = \frac{e^2 K^{1-K} (1-K)^K N_a d_{im}^2 \Gamma_3}{12(1+K)\xi_h k_B T}, \quad (24)$$

где время туннелирования дырки  $1/\Gamma_3 = \tau_3 = \tau_F$  определяется по (22), коэффициент  $\xi_h \geq 1$  дается формулой (17).

Интегральная энергия активации  $\epsilon_3$  прыжковой электропроводности получается из (21) с учетом (20) в виде

$$\epsilon_3 = -k_B T \ln(\Gamma_h/\Gamma_3) + s_{3t} T = k_B T \ln \xi_h + s_{3t} T > 0. \quad (25)$$

Из (25) с учетом (17) следует, что  $\epsilon_3 \rightarrow 0$  в пределе нулевой температуры ( $T \rightarrow 0$ ), что, впрочем, очевидно и из физических соображений [42].

Отметим, что из (25) получается выражение для дифференциальной энергии термической активации  $\epsilon'_3$  прыжковой электропроводности в виде

$$\epsilon'_3 = -k_B \frac{d \ln(\sigma_h/\sigma_{03})}{d(1/T)} = \frac{d(\epsilon_3/T)}{d(1/T)},$$

так что  $\epsilon'_3 = \epsilon_3$ , если  $\epsilon_3$  не зависит от температуры в области  $T_3 \approx T_j/3$  (рис. 1).

Далее предположим, что величина  $2\Delta_{at}/\sqrt{3} = \Delta_{a12}/2$  примерно равна расщеплению уровней энергии двух акцепторов  $\delta E_{at}$  по (23) при резонансе, т. е.  $2\Delta_{at}/\sqrt{3} = \delta E_{at}$ . Тогда частота прыжков дырки между квазистационарными уровнями энергии акцепторов с учетом (21) имеет вид

$$\Gamma_h(\Delta_{at}) \approx \frac{\Gamma_3}{K(1-K)} \int_{-\infty}^{+\infty} G_a f_0(E_a + \Delta_{at}) f_{-1}(E_a - \Delta_{at}) \times d(E_a - I_a) = \Gamma_3 \exp\left(-\frac{\epsilon_3(\Delta_{at}) - s_{3t} T}{k_B T}\right), \quad (26)$$

где

$$f_0(E_a + \Delta_{at}) = \{1 + \beta_a^{-1} \exp[-(E_F^{(v)} + E_a + \Delta_{at})/k_B T]\}^{-1}$$

— вероятность заполнения дыркой акцептора с уровнем энергии  $E_a + \Delta_{at}$ ;

$$f_{-1}(E_a - \Delta_{at}) = \{1 + \beta_a \exp[(E_F^{(v)} + E_a - \Delta_{at})/k_B T]\}^{-1}$$

— вероятность того, что акцептор с уровнем энергии  $E_a - \Delta_{at}$  ионизован; при  $\Delta_{at} \rightarrow 0$  имеем:  $f_{-1} = 1 - f_0$  для всех значений  $E_a$ .

Из формулы (26) следует энергия активации

$$\epsilon_3(\Delta_{at}) = -k_B T \ln[\Gamma_h(\Delta_{at})/\Gamma_3] + s_{3t} T. \quad (27)$$

Формула (27) для слабо легированного кристалла ( $2\Delta_{at}/\sqrt{3} = \delta E_{at} \ll k_B T_3$ ) переходит в формулу (25).

Отметим, что в сильно легированных умеренно компенсированных полупроводниках вблизи концентрационного фазового перехода Мотта дырки мигрируют в энергетической полосе акцепторной зоны шириной  $2\Delta_{at} = \delta E_{at}$  в окрестности уровня Ферми  $E_F^{(v)}$  между (квази)резонансными парами акцепторов [43]. Тогда, аналогично подходу Друде–Лоренца (см., например, [27,28]), туннельная электрическая проводимость  $\sigma_{tun}$  по акцепторам в пределе широкой акцепторной зоны  $W_a$  и низкой температуры, т. е. когда  $W_a \gg k_B T$ , имеет вид [43]:

$$\sigma_{tun} = \frac{e^2 K(1-K) N_a \tau_{tun}}{2m_{p\sigma}} \Xi_a \Theta_{tun} = \frac{1}{\rho_{tun}}, \quad (28)$$

где  $\tau_{tun} = \pi \hbar / \delta E_{at}$  — время туннелирования дырки между двумя акцепторами в зарядовых состояниях (0) и (-1), находящимися на расстоянии  $d_{im}$  при совпадении их уровней энергии ( $E_{a1} = E_{a2}$ ) (см. формулу (23));  $\Xi_a = 1/(1+K)$  — доля акцепторов в узлах примесной решетки,  $m_{p\sigma}$  — эффективная масса электропроводности дырки  $v$ -зоны;  $\Theta_{tun}$  — доля пар акцепторов в зарядовых состояниях (0) и (-1), уровни энергии  $E_a$  которых отстоят от уровня Ферми ( $-E_F^{(v)} > 0$ ) на величину  $\pm \Delta_{at} = \pm 0.5 \delta E_{at}$ ,

т.е.  $(-E_F^{(v)} - \Delta_{at} - I_a) \leq E_a - I_a \leq (-E_F^{(v)} + \Delta_{at} - I_a)$  дается соотношением:

$$\Theta_{\text{tun}} = \frac{1}{2K(1-K)} \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{E_F^{(v)} + \Delta_{at} + I_a}{\sqrt{2}W_a} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{E_F^{(v)} - \Delta_{at} + I_a}{\sqrt{2}W_a} \right) \right] < 1. \quad (29)$$

В выражении (29) учено, что часть  $(1-K)$  акцепторов занята дырками, а часть  $K$  — свободна.

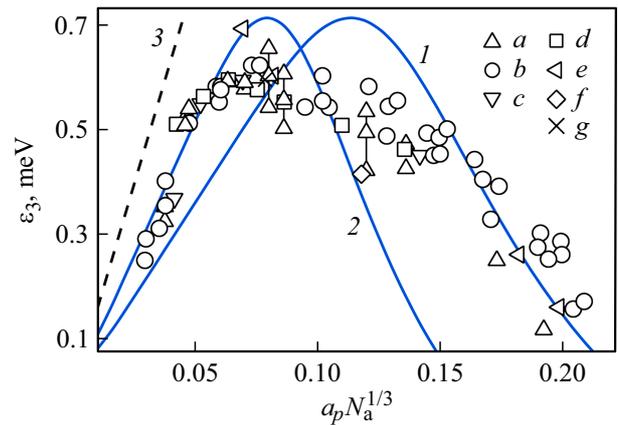
### 3. Сравнение расчетов с данными экспериментов по $p\text{-Ge:Ga}$

Из экспериментальных работ по  $p\text{-Ge:Ga}$  выбирались данные для образцов с умеренными степенями компенсации  $0.15 < K < 0.85$  и концентрациями галлия  $N_a < N_M$ , где  $N_M \approx 1.85 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  — концентрация, соответствующая переходу Мотта при  $K \approx 0.35$  (см., например, [43,44]).

При расчетах энергии термической активации  $\varepsilon_3$  и префактора  $\rho_{03}$  в кристаллах  $p\text{-Ge:Ga}$  использовались следующие значения параметров: относительная диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon_r = 15.4$  [45]; фактор вырождения уровня энергии атома галлия  $\beta_a = 4$  [46]; энергия термической ионизации одиночного атома галлия  $I_a = 11.32 \text{ meV}$  [47,48]; эффективная масса электропроводности дырки  $v$ -зоны  $m_{p\sigma} = 0.26m_0$  [43,49];  $m_0$  — масса электрона в вакууме;  $a_p = e^2/8\pi\varepsilon_r\varepsilon_0I_a = 4.13 \text{ nm}$ .

Отметим, что экспериментально наблюдаемые [50] значения температуры  $T_{je}$  для кристаллов  $p\text{-Ge:Ga}$  со степенью компенсации галлия  $K = 0.3$  есть:  $T_{je} = 4.03 \text{ K}$  для концентрации  $N_a = 3.57 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ;  $T_{je} = 5.02 \text{ K}$  для  $N_a = 7.59 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ;  $T_{je} = 8.03 \text{ K}$  для  $N_a = 3.10 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ;  $T_{je} = 11.20 \text{ K}$  для  $N_a = 1.49 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Расчеты температур  $T_{j1}$  и  $T_{j2}$  по формуле (8) для вариантов 1) и 2) дают значения:  $T_{j1} = 3.49 \text{ K}$  и  $T_{j2} = 4.99 \text{ K}$  для  $N_a = 3.57 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ;  $T_{j1} = 4.49 \text{ K}$  и  $T_{j2} = 6.41 \text{ K}$  для  $N_a = 7.59 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ;  $T_{j1} = 7.17 \text{ K}$  и  $T_{j2} = 10.25 \text{ K}$  для  $N_a = 3.10 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ;  $T_{j1} = 12.10 \text{ K}$  и  $T_{j2} = 17.30 \text{ K}$  для  $N_a = 1.49 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Итак, расчеты  $T_j$  по формуле (8) для двух вариантов периодов примесной решетки в целом согласуются с экспериментальными данными [50].

На рис. 3 представлена зависимость энергии термической активации  $\varepsilon_3$  прыжковой электропроводности в кристаллах  $p\text{-Ge:Ga}$  от концентрации галлия при  $K = 0.35$ . Расчет проводился по формуле (27) при температуре  $T_j/3$  для расстояний между примесями  $d_{im1} \approx 1.24[(1+K)N_a]^{-1/3}$  (кривая 1);  $d_{im2} \approx 0.867[(1+K)N_a]^{-1/3}$  (кривая 2). Штриховой линией 3 на рис. 3 показан расчет  $\varepsilon_3 \approx 0.7e^2N_a^{1/3}/4\pi\varepsilon_r\varepsilon_0$  по модели [3] для  $K = 0.35$ . Видно, что расчет по (27) в целом согласуется с экспериментальными данными [14–23], при этом приближение  $d_{im1}$  лучше описывает восходящую часть экспериментальной зависимости

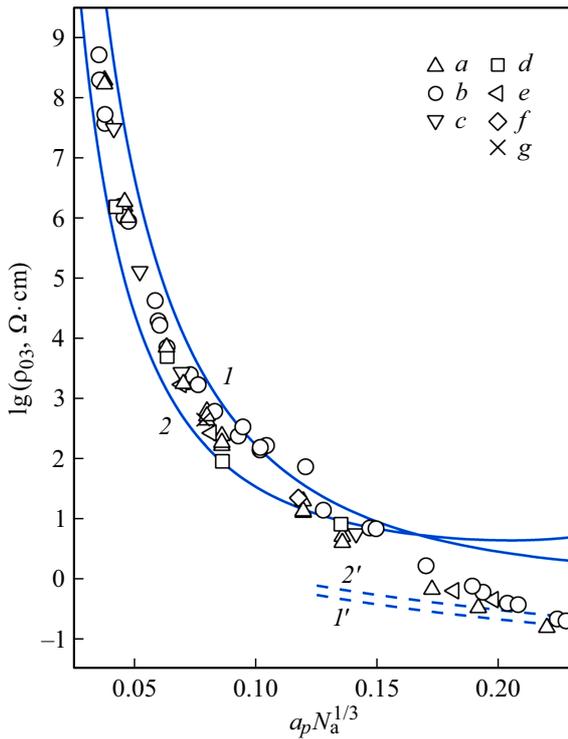


**Рис. 3.** Зависимость энергии активации  $\varepsilon_3$  прыжковой проводимости в  $p\text{-Ge:Ga}$  от концентрации акцепторов  $N_a$  в единицах  $a_p N_a^{1/3}$ , где  $a_p$  — боровский радиус дырки на атоме галлия. Сплошные линии — расчет по формуле (27) для  $K = 0.35$  при температуре  $T_j/3$  для  $d_{im1} \approx 1.24[(1+K)N_a]^{-1/3}$  (кривая 1) и  $d_{im2} \approx 0.867[(1+K)N_a]^{-1/3}$  (кривая 2); штриховая линия 3 — расчет по модели [3]; точки — эксперимент:  $a$  — [14,15],  $b$  — [16–18],  $c$  — [19],  $d$  — [20],  $e$  — [21],  $f$  — [22],  $g$  — [23].

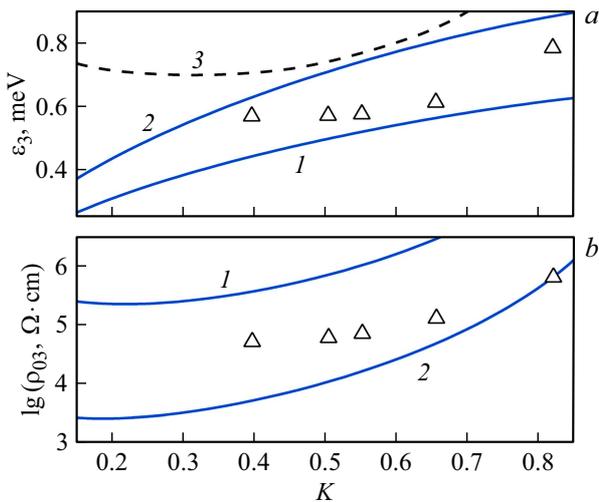
на рис. 3, а приближение  $d_{im2}$  — нисходящую. Модель же [3] дает завышенные значения энергии активации  $\varepsilon_3$  прыжковой проводимости и применима лишь для восходящего участка экспериментальной зависимости при слабых уровнях легирования.

На рис. 4 сплошными линиями показаны рассчитанные зависимости предэкспоненциального множителя (префактора)  $\rho_{03} = 1/\sigma_{03}$  по (24) для удельного прыжкового сопротивления  $\rho_h = 1/\sigma_h$  от концентрации  $N_a$  атомов галлия в  $p\text{-Ge:Ga}$ . Расчет проводился при степени компенсации  $K = 0.35$  и температуре  $T_j/3$  для расстояний между всеми примесями  $d_{im1} \approx 1.24[(1+K)N_a]^{-1/3}$  (кривая 1) и  $d_{im2} \approx 0.867[(1+K)N_a]^{-1/3}$  (кривая 2). Штриховыми линиями на этом рисунке показаны зависимости туннельного сопротивления  $\rho_{\text{tun}}$  по формуле (28) модели [43] для расстояний между примесями  $d_{im1} \approx 1.24[(1+K)N_a]^{-1/3}$  (кривая 1') и  $d_{im2} \approx 0.867[(1+K)N_a]^{-1/3}$  (кривая 2'). Видно, что при приближении к переходу Мотта экспериментальные значения удельного сопротивления приближаются к расчетам по модели [43].

Отметим, что при расчетах туннельного удельного сопротивления  $\rho_{\text{tun}}$  в расщепление  $\delta E_{at}$  уровней энергии акцепторов по формуле (23) входит боровский радиус  $a_t = e^2/8\pi\varepsilon_r\varepsilon_0E_{at}$ . Радиус  $a_t$  соответствует уровню энергии  $E_{at} = E_m^{(v)} - E_F^{(v)} > 0$  туннелирования дырки между двумя акцепторами, где  $E_m^{(v)} = -\delta E_v < 0$  (см. формулу (14)). Величина  $a_t$  несколько отличается от величины боровского радиуса  $a_p = e^2/8\pi\varepsilon_r\varepsilon_0I_a$  орбиты дырки одиночного акцептора, использованного при расчетах  $\rho_{\text{tun}}$  в статье [43] для компенсированных сильно легированных полупроводников  $p$ -типа. Однако, рассчитанные значения  $\rho_{\text{tun}}$  при радиусе орбиты  $a_t$  для умеренно



**Рис. 4.** Зависимость удельного сопротивления  $\rho_{03} = 1/\sigma_{03}$  в  $p\text{-Ge:Ga}$  от концентрации акцепторов  $N_a$  в единицах  $a_p N_a^{1/3}$ , где  $a_p$  — борковский радиус дырки на атоме галлия. Сплошные линии — расчет по формуле (24) для  $K = 0.35$  при температуре  $T_j/3$  для  $d_{im1} \approx 1.24[(1+K)N_a]^{-1/3}$  (кривая 1) и  $d_{im2} \approx 0.867[(1+K)N_a]^{-1/3}$  (кривая 2); штриховые линии — расчет по формуле (28) модели [43] для  $d_{im1} \approx 1.24[(1+K)N_a]^{-1/3}$  (кривая 1') и  $d_{im2} \approx 0.867[(1+K)N_a]^{-1/3}$  (кривая 2'); точки — эксперимент:  $a$  — [14,15],  $b$  — [16–18],  $c$  — [19],  $d$  — [20],  $e$  — [21],  $f$  — [22],  $g$  — [23].



**Рис. 5.** Зависимости энергии активации  $\varepsilon_3$  (a) и удельного сопротивления  $\rho_{03}$  (b) прыжковой проводимости в  $p\text{-Ge:Ga}$  от степени компенсации  $K$ . Сплошные линии — расчет  $\varepsilon_3$  по формуле (27) и  $\rho_{03}$  по формуле (24) для  $N_a = 2.66 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  при температуре  $T_j/3$  для  $d_{im1} \approx 1.24[(1+K)N_a]^{-1/3}$  (кривая 1) и  $d_{im2} \approx 0.867[(1+K)N_a]^{-1/3}$  (кривая 2); штриховая линия 3 — расчет по модели [3]; точки — эксперимент [15].

компенсированных кристаллов  $p\text{-Ge:Ga}$  вблизи перехода Мотта практически не отличаются от расчетов  $\rho_{\text{tun}}$  при радиусе  $a_p$ .

На рис. 5 представлены зависимости энергии активации  $\varepsilon_3$  (a) и предэкспоненциального множителя  $\rho_{03} = 1/\sigma_{03}$  (b) прыжковой проводимости в германии от степени компенсации  $K$  атомов галлия с концентрацией  $N_a = 2.66 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . Показаны расчеты  $\varepsilon_3$  по формуле (27) и  $\rho_{03}$  по формуле (24) при температуре  $T_j/3$  для расстояний между примесями  $d_{im1} \approx 1.24[(1+K)N_a]^{-1/3}$  (кривая 1) и  $d_{im2} \approx 0.867[(1+K)N_a]^{-1/3}$  (кривая 2). Штриховой линией 3 на рис. 5, a показан расчет  $\varepsilon_3$  по модели [3] для  $N_a = 2.66 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . Видно, что расчет  $\varepsilon_3$  по (27) в целом согласуется с экспериментальными данными [15], а по модели [3] дает завышенные значения.

### Заключение

Проведен аналитический расчет параметров прыжковой электропроводности по водородоподобным примесям в кристаллических полупроводниках в режиме NNN на примере материала  $p$ -типа. Принципиальным отличием предлагаемого способа расчета параметров прыжковой проводимости является способ нахождения положения порога дрейфовой подвижности для дырок  $v$ -зоны. Этот порог обусловлен образованием из возбужденных состояний электронейтральных акцепторов квазинепрерывной полосы разрешенных значений энергии для дырок  $v$ -зоны, которая уменьшает величину термической энергии ионизации основных примесей.

Предполагалось, для простоты, что в кристаллической матрице легирующие и компенсирующие примеси формируют единую нестехиометрическую простую кубическую решетку. Рассмотрены два варианта кубической решетки с различными периодами трансляции. Принималось также, что ширина акцепторной зоны определяется кулоновским взаимодействием ионов примесей первой координационной сферы нестехиометрической примесной решетки.

Для определения величин  $\sigma_{03}$  и  $\varepsilon_3$  предварительно находилась температура  $T_3$ , в области которой наблюдаются термически активированные туннельные прыжки дырок между ближайшими по расстоянию акцепторами в зарядовых состояниях (0) и (−1). Учитывалось, что при увеличении уровня легирования в „молекулярных“ парах акцепторов в зарядовых состояниях (0) и (−1) происходит расщепление уровней энергии одной пары на величину  $\delta E_{at}$ . Считалось, что миграция дырок по состояниям акцепторов происходит в энергетической полосе шириной  $\sqrt{3}\delta E_{at}$  вблизи уровня Ферми в примесной зоне. Впервые в расчетах прыжковой  $\varepsilon_3$ -электропроводности принималось во внимание влияние на параметры  $\sigma_{03}$  и  $\varepsilon_3$  тепловой и конфигурационной энтропии.

Получено количественное описание поведения величин префактора  $\sigma_{03}$  и энергии термической активации

$\varepsilon_3$  прыжковой электропроводности с изменением уровня легирования и степени компенсации полупроводника на изоляторной стороне перехода Мотта.

Численный расчет величин  $\sigma_{03}$  и  $\varepsilon_3$  по предложенным формулам (24) и (27) проводился для кристаллов  $p$ -Ge:Ga. Результаты расчетов значений  $\sigma_{03}$  и  $\varepsilon_3$  согласуются с известными экспериментальными данными для умеренно компенсированных и хорошо характеризованных кристаллов  $p$ -Ge:Ga, полученных в ходе нейтронного трансмутационного легирования.

## Благодарности

Работа выполнена при поддержке государственной программы научных исследований Республики Беларусь „Материаловедение, новые материалы и технологии“.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Приложение

### Прыжковая теплоемкость дырок в акцепторной зоне и тепловая энтропия

Для вычисления прыжковой теплоемкости  $C_h$  по [39] используем соотношение

$$\frac{d\langle f_0 \rangle}{dT} = \frac{\partial \langle f_0 \rangle}{\partial T} + \frac{\partial \langle f_0 \rangle}{\partial E_F^{(v)}} \frac{dE_F^{(v)}}{dT} = 0, \quad (\text{П1})$$

где  $\langle f_0 \rangle = 1 - \langle f_{-1} \rangle = 1 - K$  — средняя по объему кристалла вероятность того, что случайно выбранный в кристаллической матрице акцептор находится в зарядовом состоянии (0) дается формулами (10)–(12);  $T$  — абсолютная температура,  $E_F^{(v)} < 0$  — уровень Ферми, отсчитанный от потолка  $v$ -зоны.

Соответствующие частные производные:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_0}{\partial T} &= \frac{\partial}{\partial T} \left[ 1 + \beta_a^{-1} \exp \left( -\frac{E_a + E_F^{(v)}}{k_B T} \right) \right]^{-1} \\ &= -\frac{E_a + E_F^{(v)}}{k_B T^2} f_0 f_{-1}, \end{aligned}$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial E_F^{(v)}} = \frac{\partial}{\partial E_F^{(v)}} \left[ 1 + \beta_a^{-1} \exp \left( -\frac{E_a + E_F^{(v)}}{k_B T} \right) \right]^{-1} = \frac{f_0 f_{-1}}{k_B T}. \quad (\text{П2})$$

Из (П1) с учетом (П2) находим

$$\frac{dE_F^{(v)}}{dT} = \frac{\xi_h}{K(1-K)T} \int_{-\infty}^{+\infty} E_a G_a f_0 f_{-1} d(E_a - I_a) + \frac{E_F^{(v)}}{T}, \quad (\text{П3})$$

где величина  $\xi_h$  задается формулой (17).

Температурная зависимость средней энергии электрически нейтрального акцептора:

$$\langle E_h \rangle = \frac{1}{1-K} \int_{-\infty}^{+\infty} E_a G_a f_0 d(E_a - I_a),$$

определяет теплоемкость (на одну дырку в акцепторной  $A^{0/-}$ -зоне; см. рис. 2):

$$\begin{aligned} C_h &= -\frac{d\langle E_h \rangle}{dT} = \frac{-1}{1-K} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} E_a G_a \frac{\partial f_0}{\partial T} d(E_a - I_a) \right. \\ &\quad \left. + \frac{dE_F^{(v)}}{dT} \int_{-\infty}^{+\infty} E_a G_a \frac{\partial f_0}{\partial E_F^{(v)}} d(E_a - I_a) \right] > 0. \quad (\text{П4}) \end{aligned}$$

Далее, используя соотношения (П2) и (П3), из (П4) получаем формулу (16):

$$C_h = \frac{1}{(1-K)k_B T^2} \left[ Q_1 - \frac{\xi_h Q_2}{K(1-K)} \right], \quad (\text{П5})$$

где

$$\begin{aligned} Q_1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} E_a^2 G_a f_0 f_{-1} d(E_a - I_a), \\ Q_2 &= \left( \int_{-\infty}^{+\infty} E_a G_a f_0 f_{-1} d(E_a - I_a) \right)^2. \end{aligned}$$

Средняя тепловая энтропия  $s_{3t} = s_{3t}(T)$  активации прыжков дырки между двумя акцепторами в зарядовых состояниях (0) и (-1) с учетом (П5) есть (см. также [39]):

$$s_{3t} = \int_0^T \frac{C_h(T')}{T'} dT'. \quad (\text{П6})$$

### Конфигурационная энтропия размещения дырок по акцепторам

Рассмотрим кристаллический полупроводник  $p$ -типа единичного объема, содержащий  $N_a = N_{a,0} + N_{a,-1}$  водородоподобных акцепторов в зарядовых состояниях (0) и (-1) и  $N_d = KN_a$  водородоподобных доноров в зарядовых состояниях (+1), где  $0 < K < 1$  — степень компенсации. Условие электронейтральности кристаллического образца имеет вид  $N_{a,-1} = N_d = KN_a$ . Расчет конфигурационной энтропии  $S_{3m}$  распределения электрически нейтральных состояний акцепторов  $N_{a,0} = (1-K)N_a$  по всем акцепторам дает (в единицах постоянной Больцмана  $k_B$ ):

$$\frac{S_{3m}}{k_B} = \ln \left( \frac{N_a!}{N_{a,0}!(N_a - N_{a,0})!} \right). \quad (\text{П7})$$

Для вычисления величины  $S_{3m}$  используем формулу Стирлинга  $\ln(X!) = X \ln(X) - X$ , где  $X \gg 1$  и тогда из (П7) получаем (ср. [10–12]):

$$\frac{S_{3m}}{k_B} = N_a \left[ \ln \left( \frac{N_a}{N_a - N_{a,0}} \right) + \frac{N_{a,0}}{N_a} \ln \left( \frac{N_a - N_{a,0}}{N_{a,0}} \right) \right]. \quad (\text{П8})$$

Учтем, что  $N_{a,0} = (1 - K)N_a$ , и тогда из (П8) получаем формулу (19) для конфигурационной энтропии  $s_{3m} = S_{3m}/N_a$ , приходящейся на один акцептор в кристалле:

$$\frac{s_{3m}}{k_B} = -\ln[K^K(1 - K)^{1-K}]. \quad (\text{П9})$$

## Список литературы

- [1] H. Fritzsche. *Phys. Rev.*, **99** (2), 406 (1955). DOI: 10.1103/PhysRev.99.406
- [2] N.F. Mott, W.D. Twose. *Adv. Phys.*, **10** (38), 107 (1961). DOI: 10.1080/00018736100101271
- [3] B.I. Shklovskii, A.L. Efros. *Electronic Properties of Doped Semiconductors* (Springer, Berlin, 1984), DOI: 10.1007/978-3-662-02403-4
- [4] H. Böttger, V.V. Bryksin. *Hopping Conduction in Solids* (Akademie, Berlin, 1985), DOI: 10.1515/9783112618189
- [5] *Hopping Transport in Solids*, ed. by M. Pollak, B. Shklovskii (Amsterdam, North Holland, 1991). DOI: 10.1016/c2009-0-12721-6
- [6] N.A. Poklonski, S.A. Vyrko, A.G. Zabrodskii. *Semicond. Sci. Technol.*, **25** (8), 085006 (2010). DOI: 10.1088/0268-1242/25/8/085006
- [7] N.A. Poklonski, S.A. Vyrko, A.G. Zabrodskii. *Solid State Commun.*, **149** (31–32), 1248 (2009). DOI: 10.1016/j.ssc.2009.05.031
- [8] Н.А. Поклонский, С.Ю. Лопатин, А.Г. Забродский. *ФТТ*, **42** (3), 432 (2000). [N.A. Poklonskii, S.Yu. Lopatin, A.G. Zabrodskii. *Phys. Solid State.*, **42** (3), 441 (2000). DOI: 10.1134/1.1131228]
- [9] N.A. Poklonski, S.A. Vyrko, O.N. Poklonskaya, A.G. Zabrodskii. *J. Appl. Phys.*, **110**, 123702 (2011). DOI: 10.1063/1.3667287
- [10] Дж. Хониг. В сб.: *Задачи по термодинамике и статистической физике*, под ред. П. Ландсберга (Мир, М., 1974), с. 459. [J.M. Honig. In: *Problems in Thermodynamics and Statistical Physics*, ed. by P.T. Landsberg, ch. 19 (Pion, London, 1971)]
- [11] C.R.A. Catlow. *Phys. Status Solidi A*, **46** (1), 191 (1978). DOI: 10.1002/pssa.2210460123
- [12] А.А. Узаков, А.Л. Эфрос. *ФТП*, **21** (5), 922 (1987). [A.A. Uzakov, A.L. Efros. *Sov. Phys. Semicond.*, **21** (5), 562 (1987).]
- [13] Y. Kajikawa. *Int. J. Mod. Phys. B*, **34** (8), 2050069 (2020). DOI: 10.1142/S0217979220500691
- [14] H. Fritzsche, M. Cuevas. *Phys. Rev.*, **119** (4), 1238 (1960). DOI: 10.1103/PhysRev.119.1238
- [15] H. Fritzsche, M. Cuevas. *Proc. Int. Conf. on Semicond. Phys., Prague, 1960* (Pub. Czech. Acad. Sci., Prague, 1961), p. 222–224.
- [16] А.Г. Забродский, А.Г. Андреев, М.В. Алексеенко. *ФТП*, **26** (3), 431 (1992). [A.G. Zabrodskii, A.G. Andreev, M.V. Alekseenko. *Sov. Phys. Semicond.*, **26** (3), 244 (1992).]
- [17] А.Г. Андреев, В.В. Воронков, Г.И. Воронкова, А.Г. Забродский, Е.А. Петрова. *ФТП*, **29** (12), 2218 (1995). [A.G. Andreev, V.V. Voronkov, G.I. Voronkova, E.A. Petrova, A.G. Zabrodskii. *Semiconductors*, **29** (12), 1162 (1995).]
- [18] A.G. Zabrodskii, A.G. Andreev, S.V. Egorov. *Phys. Status Solidi B*, **205** (1), 61 (1998). DOI: 10.1002/(SICI)1521-3951(199801)205:1<61::AID-PSSB61>3.0.CO;2-S
- [19] J.A. Chroboczek, H. Fritzsche, C.-L. Jiang, M. Pollak, R.L. Wild. *Phil. Mag. B*, **44** (6), 685 (1981). DOI: 10.1080/01418638108223772
- [20] А.Р. Гаджиев, И.С. Шлимак. *ФТП*, **6** (8), 1582 (1972). [A.R. Gadzhiev, I.S. Shlimak. *Sov. Phys. Semicond.*, **6** (8), 1364 (1973).]
- [21] О.П. Ермолаев, Т.Ю. Микунчик. *ФТП*, **38** (3), 285 (2004). [O.P. Ermolaev, T.Yu. Mikul'chik. *Semiconductors*, **38** (3), 273 (2004). DOI: 10.1134/1.1682325]
- [22] Л.В. Говор, В.П. Доброго, Н.А. Поклонский. *ФТП*, **18** (11), 2075 (1984). [L.V. Govor, V.P. Dobrego, N.A. Poklonskii. *Sov. Phys. Semicond.*, **18** (11), 1292 (1984).]
- [23] H.C. Thomas, B. Covington. *J. Appl. Phys.*, **48** (8), 3434 (1977). DOI: 10.1063/1.324188
- [24] A.G. Zabrodskii, M.V. Alekseenko. *Proc. of the 23rd Int. Conf. on the Physics of Semiconductors, Berlin, Germany, 21–26 July 1996*, Vol. 4 (World Scientific, Singapore, 1996), p. 2681–2684.
- [25] K.M. Itoh, E.E. Haller, J.W. Beeman, W.L. Hansen, J. Emes, L.A. Reichertz, E. Kreysa, T. Shutt, A. Cummings, W. Stockwell, B. Sadoulet, J. Muto, J.W. Farmer, V.I. Ozogin. *Phys. Rev. Lett.*, **77** (19), 4058 (1996). DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.4058
- [26] И.С. Шлимак. *ФТТ*, **41** (5), 794 (1999). [I.S. Shlimak. *Phys. Solid State*, **41** (5), 716 (1999).]
- [27] K.W. Böer, U.W. Pohl. *Semiconductor Physics* (Springer, Cham, 2023), DOI: 10.1007/978-3-031-18286-0
- [28] M. Grundmann. *The Physics of Semiconductors: An Introduction Including Nanophysics and Applications* (Springer, Cham, 2021), DOI: 10.1007/978-3-030-51569-0
- [29] В. Штиллер. *Уравнение Аррениуса и неравновесная кинетика* (Мир, М., 2000) [W. Stiller. *Arrhenius Equation and Non-Equilibrium Kinetics: 100 Years* (Teubner, Leipzig, 1989)]
- [30] А.И. Горшков. *ЖТФ*, **46** (8), 1718 (1976). [A.I. Gorshkov. *Sov. Phys. Tech. Phys.*, **21** (8), 991 (1976).]
- [31] D. Kondepudi, I. Prigogine. *Modern Thermodynamics: From Heat Engines to Dissipative Structures* (Wiley, Chichester, 2015), DOI: 10.1002/9781118698723
- [32] Н.А. Поклонский, И.И. Анিকেев, С.А. Вyrko. *ЖПС*, **90** (5), 676 (2023). [N.A. Poklonski, I.I. Anikeev, S.A. Vyrko. *J. Appl. Spectrosc.*, **90** (5), 970 (2023). DOI: 10.1007/s10812-023-01620-9]
- [33] Z. Xun, D. Hao, R.M. Ziff. *Phys. Rev. E*, **105** (2), 024105 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevE.105.024105
- [34] S. Baranovskii, O. Rubel. *Ch. 9. Charge Transport in Disordered Materials*. In: *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials*, ed. by S. Kasap, P. Capper (Springer, Cham, 2017), p. 193–218. DOI: 10.1007/978-0-387-29185-7\_9
- [35] S.D. Baranovskii. *Phys. Status Solidi B*, **251** (3), 487 (2014). DOI: 10.1002/pssb.201350339
- [36] C.D. Lorenz, R.M. Ziff. *J. Chem. Phys.*, **114** (8), 3659 (2001). DOI: 10.1063/1.1338506

- [37] В.И. Алхимов. ТМФ, **191** (1), 100 (2017). DOI: 10.4213/tmf9154 [V.I. Alkhimov. Theor. Math. Phys., **191** (1), 558 (2017). DOI: 10.1134/S0040577917040079]
- [38] N.A. Poklonski, S.A. Vyrko, A.I. Kovalev, A.N. Dzeraviah. J. Phys. Commun., **2** (1), 015013 (2018). DOI: 10.1088/2399-6528/aa8e26
- [39] Н.А. Поклонский, С.Ю. Лопатин. ФТТ, **43** (12), 2126 (2001). [N.A. Poklonski, S.Yu. Lopatin. Phys. Solid State, **43** (12), 2219 (2001). DOI: 10.1134/1.1427945]
- [40] Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, И.И. Анিকেев, А.Г. Забродский. ФТП, **56** (11), 1046 (2022). DOI: 10.21883/FTP.2022.11.54254.9945 [N.A. Poklonski, S.A. Vyrko, I.I. Anikeev, A.G. Zabrodskii. Semiconductors, **56** (11), 823 (2022). DOI: 10.21883/SC.2022.11.54957.9945]
- [41] A.A. Kocherzhenko, F.C. Grozema, S.A. Vyrko, N.A. Poklonski, L.D.A. Siebbeles. J. Phys. Chem. C, **114** (48), 20424 (2010). DOI: 10.1021/jp104673h
- [42] A.G. Zabrodskii. Phil. Mag. B, **81** (9), 1131 (2001). DOI: 10.1080/13642810108205796
- [43] N.A. Poklonski, I.I. Anikeev, S.A. Vyrko, A.G. Zabrodskii. Phys. Status Solidi B, **260** (4), 2200559 (2023). DOI: 10.1002/pssb.202200559
- [44] Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, А.Г. Забродский. ФТТ, **46** (6), 1071 (2004). [N.A. Poklonski, S.A. Vyrko, A.G. Zabrodskii. Phys. Solid State, **46** (6), 1101 (2004). DOI: 10.1134/1.1767252]
- [45] T.G. Castner, N.K. Lee, H.S. Tan, L. Moberly, O. Symko. J. Low Temp. Phys., **38** (3–4), 447 (1980). DOI: 10.1007/BF00114337
- [46] J.S. Blakemore. *Solid State Physics* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2004), DOI: 10.1017/CBO9781139167871
- [47] O. Madelung. *Semiconductors: Data Handbook* (Springer, Berlin, 2004), DOI: 10.1007/978-3-642-18865-7
- [48] Т.М. Лифшиц. ПТЭ, **1**, 10 (1993). [T.M. Lifshits. Instrum. Exp. Tech., **36** (1), 1 (1993).]
- [49] И.М. Цидильковский. *Зонная структура полупроводников* (Наука, М., 1978)
- [50] A.G. Zabrodskii, A.G. Andreev. Int. J. Mod. Phys. B, **8** (7), 883 (1994). DOI: 10.1142/S0217979294000427