

# Глава 11

## Транспорт не зонного типа

### 11.1 План

- Изолированная примесь в Si, Ge или GaAs
- Прыжковая проводимость

### 11.2 Примесные уровни энергии и примесная зона

Мы знаем, что электронные волны распространяются в периодической решетке и интерферируют, отражаясь от Брэгговских плоскостей. Эту сложную многочастичную задачу удается снова свести к одночастичной. В приближении почти свободных электронов это достигается за счет того, что сильный потенциал голых ионов решетки заменяется на слабый остаточный потенциал решетки, экранированный электронами, т.н. псевдопотенциал, который рассматривается как слабое возмущение.

При таком подходе электроны заменяются на квазичастицы, у которых энергетический спектр становится перенорми-

рованным. Так например, масса квазичастиц - т.н. эффективная масса - может быть как меньше, так и больше массы свободного электрона.

Заряд квазичастиц при этом, конечно не перенормируется. Спектр образовавшихся квазичастиц имеет разрешенные и запрещенные зоны энергии. В пределах разрешенной энергетической зоны квазичастицы распространяются как плоские волны. Конечно, плоские волны - это только результат нулевого приближения. Если учесть решеточный псевдопотенциал, то плоские волны модифицируются, в зависимости от симметрии решетки, сохраняя свою периодичность. Точнее говоря, в зависимости от точечной группы симметрии той точки обратной решетки, вблизи которой в зоне Бриллюэна находится данная группа квазичастиц. В рамках такой зонной картины мы уже обсуждали диффузное и баллистическое распространение квазичастиц. Мы при этом предполагали, что в результате актов столкновения или туннелирования через барьер электронная волна не меняет своей энергии и квазичастица остается в той же самой энергетической зоне.

Чтобы это еще раз подчеркнуть зонный характер транспорта, вспомним концепцию диффузного распространения квазичастиц. Электронные волны рассеиваются, в основном, упруго. В нормальных металлах, при низкой температуре, наиболее вероятны столкновения с примесями и дефектами решетки. Таким образом, релаксация импульса происходит в результате большого числа индивидуальных столкновений, каждое из которых не сбивает фазу электронной волны. С квазиклассической точки зрения, электрон распространяется диффузно, совершая случайное движение, но несмотря на столкновения продолжает оставаться в пределах своей энергетической зоны.

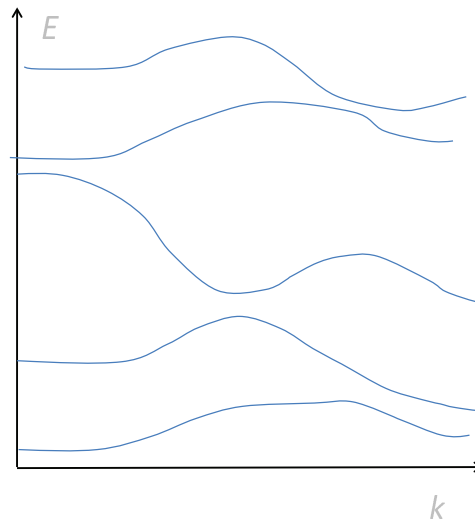


Рис. 11.1: Пример диаграммы энергетических зон

Такой тип диффузионного транспорта называется **зонным**. Помимо баллистического и диффузионного зонного транспорта, перенос заряда может происходить и другим способом. Мы далее кратко рассмотрим прыжковый транспорт, который характерен для сильно легированных полупроводников.

Рассмотрим примесь замещения в решетке Si или Ge (IV группа)

Задача об уровне энергии электронов вблизи примеси сводится к задаче об одном электроном в водородоподобном состоянии. Поле заряда примесного атома уменьшается в  $\kappa$  раз, где  $\kappa$  - статическая диэлектрическая проницаемость материала. Радиус боровской орбиты в полупроводнике увеличен по сравнению с нормальным металлом из-за малости эффектив-

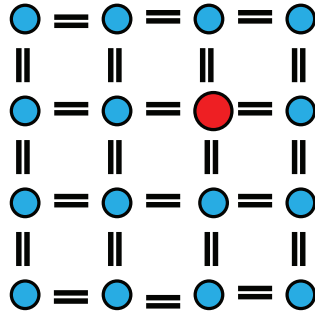


Рис. 11.2: Одиночная примесь в решетке

ной массы  $m^*$  и большой величины  $\kappa$ :

$$a_B^* = \frac{\hbar^2 \kappa}{m^* e^2}. \quad (11.1)$$

Энергия связи в основном состоянии в атоме водорода

$$\varepsilon_0 = \frac{me^4}{\hbar^2} = 13\text{эВ}, \quad (11.2)$$

а в состоянии локализованном на примеси в полупроводнике энергия связи электрона на несколько порядков меньше

$$\varepsilon_0^{\text{imp}} = \frac{m^* e^4}{\hbar^2 \kappa^2}. \quad (11.3)$$

Для примесного атома в полупроводнике  $m^* = (10^{-1} - 10^{-2})m_e$ ,  $\kappa \sim 10 - 20$ . Получаем  $\varepsilon_0^{\text{imp}} \sim (10^{-4} - 10^{-5})\varepsilon_0 \sim 1\text{мэВ}$ .

### Типичные примеры:

Si:P	0.044эВ
Si:As	0.049эВ

Ge:P	0.0127эВ
Ge:Sb	0.096эВ

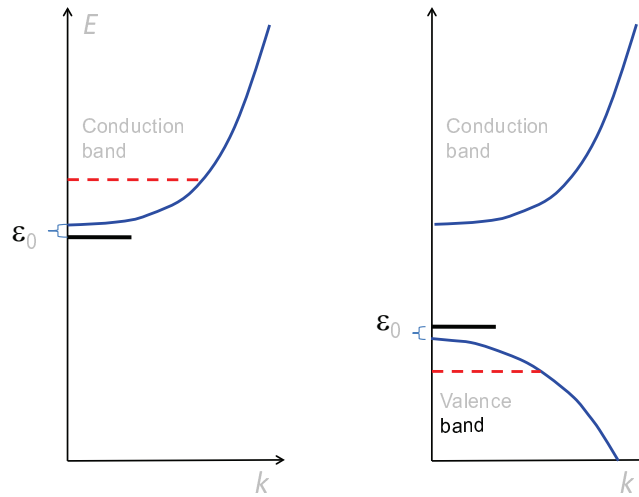


Рис. 11.3: Примеры примесных уровней энергии для одиночных донорной и акцепторной примесей

### Q: Где расположен этот уровень энергии ?

В зависимости от типа проводимости полупроводника, примесный уровень может быть расположен либо под дном зоны проводимости, либо над потолком валентной зоны. В обоих случаях - в области щели. При увеличении количества примесей примесный уровень энергии расплывается в зону. Хотя волновые функции локализованных на них электронов перекрываются слабо, но все же вероятности перехода между донорными состояниями ненулевые.

При таком положении уровня Ферми, как изображено на картинке (т.е. при такой высокой концентрации собственных носителей), мы имеем фактически металл и не заметим влияния примесных уровней. Но ситуация драматически изменится в случае если концентрация носителей мала.

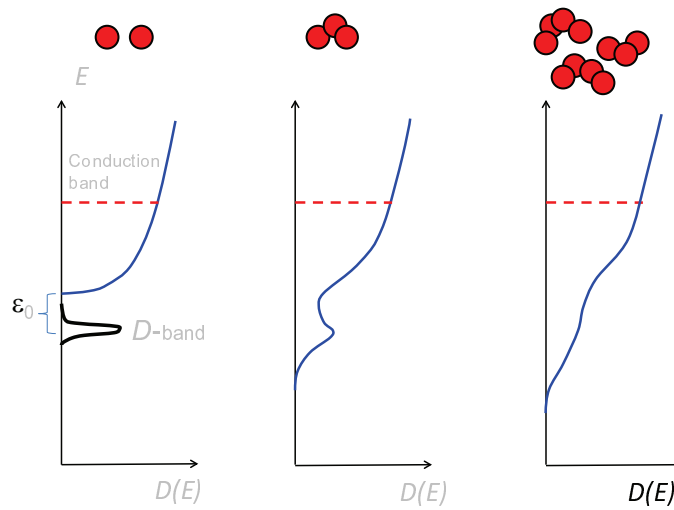


Рис. 11.4: Примесная зона донорных состояний для случая большой концентрации примесей  $n_i$ , которая увеличивается на трех панелях слева направо

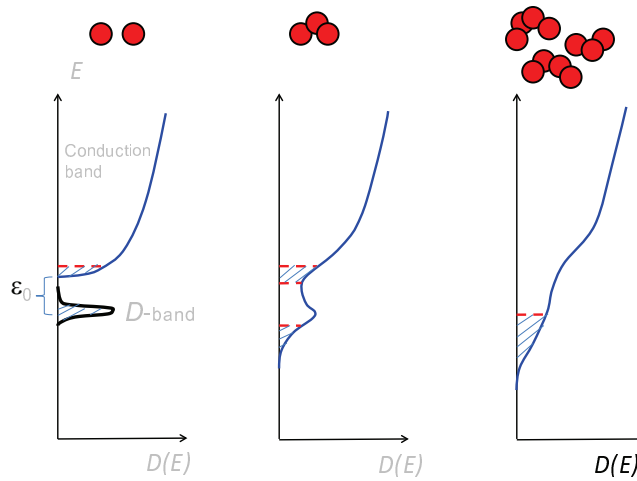


Рис. 11.5: Заполнение примесной зоны донорных состояний для случая малой концентрации примесей

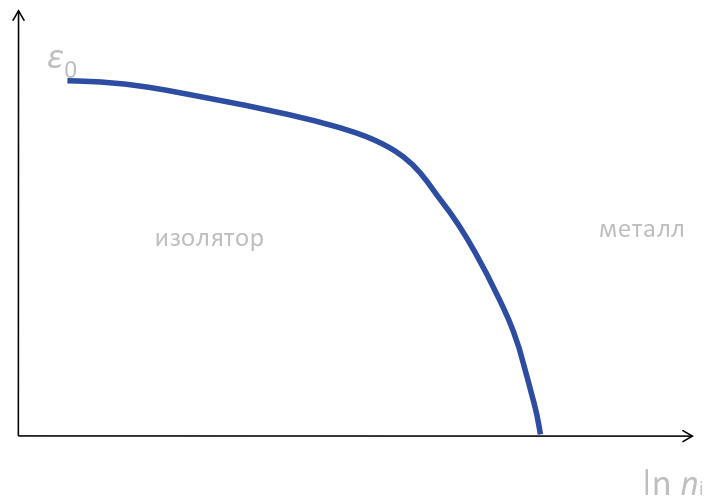


Рис. 11.6: Схематический график уменьшение щели по мере увеличения  $n_i$

Слева направо, концентрация примесных центров  $n_i$  увеличивается. Как видно из рисунка, при малых  $n_i$ , примесная зона отделена от зоны проводимости щелью порядка  $\epsilon_0$ . По мере увеличения  $n_i$  зона проводимости сливается с примесной зоной, а энергетическая щель, отделяющая носители в примесной зоне и зоне проводимости, закрывается. Как видно, в первых двух случаях мы имеем полупроводник, а в последнем случае - получили металл! Мы изменяли только потенциал примесей (амплитуду случайного потенциала) и игнорировали взаимодействие между электронами. Это переход изолятор-металл в модели Андерсона.

Поэтому можно схематически изобразить эволюцию щели с концентрацией примесей следующим образом, как показано на рисунке (11.6).



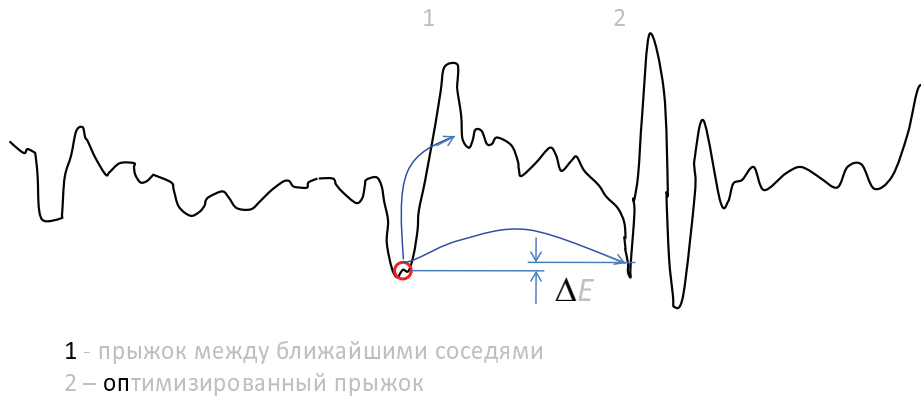


Рис. 11.7: Схематическое изображение изменения случайного потенциала примесей по одной из пространственных координат

### 11.3 Прыжковая проводимость по примесным уровням

Рассмотрим как происходит транспорт заряда в состоянии изолятора. Ясно, что плоских волн в нем нет и их распространение невозможно, т.е. невозможен транспорт зонного типа. На рисунке (11.7) схематически изображен пространственный рельеф примесного уровня энергии по одной из координат.

Вероятность прыжка между соседними состояниями (Мотт 1968)

$$P = p_1 \exp\left(-\frac{\epsilon_1}{kT}\right) \quad (11.4)$$

При высоких температурах прыжки происходят между соседними локализованными состояниями и в этом Андерсоновском изоляторе температурная зависимость проводимости имеет простой активационный характер  $\sigma \propto \exp(-\Delta/kT)$ . При низких

температурах прыжок на ближайший соседний уровень оказывается маловероятным. Длина прыжка и разность энергии  $\Delta E$  коррелированы, поскольку критерием является максимальная вероятность прыжка.

Рассмотрим прыжок с участием фонона. Вероятность, очевидно, пропорциональна числу фононов. Кроме того, она должна зависеть от интеграла перекрытия и от разности уровней. Пусть, например, электрон хочет прыгнуть на расстояние  $r$  и разность энергий начального и конечного состояний равна  $\delta E$ . Вероятность такого прыжка:

$$p(r) = \nu_{\text{ph}} \exp\left(\frac{-2r}{\xi} - \frac{\delta E}{kT}\right), \quad (11.5)$$

где

$$|\Psi| \propto \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right) \text{ на каждом локализованном центре,} \quad (11.6)$$

$\xi$  - радиус локализации в состоянии Андерсоновского изолятора и  $r$  - текущая координата (переменная).

Прыжки происходят с участием фононов. Под  $\nu_{\text{ph}}$  подразумевается как вероятность перехода (квадрат матричного элемента  $e - ph$  взаимодействия), так и плотность фононных состояний.

Интересный и дискутируемый вопрос:

**Q: могут ли прыжки совершаться без фононов, за счет взаимодействия между электронами?**

**A: да, могут за счет перераспределения энергии между электронами.**

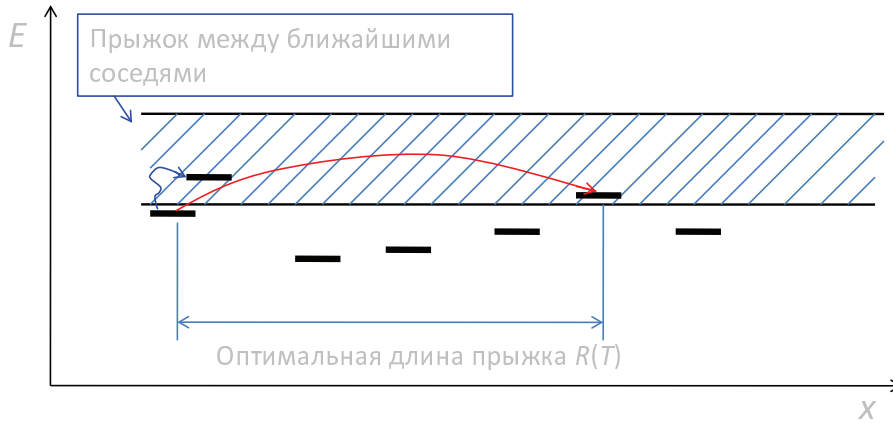


Рис. 11.8: Сравнение прыжка между ближайшими соседями и оптимизированного прыжка с переменной длиной

## 11.4 Прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка

Видно что в прыжковой проводимости имеются два конкурирующих фактора:

Большая длины прыжка  $R$  позволяет найти состояние с энергией, более близкой к энергии начального состояния. Но, большее  $R$  подразумевает меньшее значение интеграла перекрытия. Значение  $R$ , которое оптимизирует произведение двух факторов:

$$R \propto T^{-1/4}. \quad (11.7)$$

С этим оптимальным значением  $R$  получаем т.н. прыжковую проводимость с переменной длиной прыжка:

$$\sigma_{\text{hop}} = \sigma_0 \exp \left[ - \left( \frac{T_0}{T} \right)^{1/4} \right] \quad (11.8)$$

Мы получили т.н. Моттовский закон прыжковой проводимости для 3D случая. Проблема только найти оптимальное  $R(T)$ .

Поучительно повторить не оригинальные Моттовские рассуждения, а качественные рассуждения Амбегаокара [U. Ambegaokar, V. I. Halperin, J. S. Langer, Phys.Rev. В **14**, 2612 (1971) и Майка Поллака (M. Pollak, Journal of Non-Crystalline Solids, **11**, 1 (1972)], с помощью которых они получили это Моттовское выражение. Проблема заключается в нахождении такого оптимального расстояния  $R$ , которое обеспечивает максимальное значение  $p$ . В сферическом объеме пространства с радиусом  $r$  имеется  $(4\pi/3)r^3 D(E_F)$  состояний, где  $D(E_F)$  - плотность состояний на уровне Ферми в единице объема. Среднее расстояние между уровнями равно:

$$\langle \delta E \rangle = \left[ \frac{4\pi r^3}{3} D(E_F) \right]^{-1} \quad (11.9)$$

Если подставить (11.9) в (11.5) и продифференцировать по  $r$ , то получим, что максимум  $p$  достигается при длине прыжка

$$R = \left( \frac{9\xi}{8\pi D(E_F) k_B T} \right)^{1/4} \quad (11.10)$$

и, соответственно, при средней энергии прыжка

$$\langle \delta E \rangle = 0.20 k_B (T_0 T^3)^{1/4}. \quad (11.11)$$

При этом вероятность оптимального прыжка равна:

$$p = \nu_{\text{ph}} \exp \left[ \left( \frac{T_1}{T} \right)^{1/4} - \left( \frac{T_2}{T} \right)^{1/4} \right] = \nu_{\text{ph}} \exp \left[ \left( \frac{T_0}{T} \right)^{1/4} \right], \quad (11.12)$$

где  $k_B T_0 \approx 18/D(E_F)\xi^3$ .

Физический смысл последнего выражения прозрачен:  $T_0$  пропорциональна количеству локализованных состояний в единице объема пространства и среднему интервалу по энергии между локализованными состояниями. К численному значению префактора в последней формуле следует относиться с осторожностью. Он зависит от деталей модели и в книге у Шкловского-Эфроса равен 21.6, а не 18.

Зная вероятность перейдем теперь к оценке проводимости. Коэффициент диффузии  $\mathcal{D} = v_F l / d$ . Для определенности рассмотрим двумерную систему  $d = 2$ . Из хорошо известного нам соотношения из классической теории

$$\sigma = ne\mu \equiv e^2 \mathcal{D} \frac{dn}{dE}$$

В классическом пределе высоких температур  $n(E) \propto n_0 \exp(-E/k_B T)$  и  $dn/dE = n_0/k_B T$ . Отсюда получаем Эйнштейновское соотношение для диффузии  $\mu = e\mathcal{D}/k_B T$  и еще раз видим, что подвижность  $\mu$  связана с константой диффузии  $\mathcal{D}$ . В нашем случае,  $\mathcal{D} = pR^2$ . Действительно, по определению, коэффициент диффузии равен среднему квадрату расстояния, на которое диффундирует частица в единицу времени. В результате получаем

$$\begin{aligned} \sigma &= ne\mu \\ &= e^2 D(E_F) R^2 p \\ &= \sigma_{\text{hop}} \exp \left[ -(T_0/T)^{1/4} \right], \end{aligned} \quad (11.13)$$

где  $\sigma_{\text{hop}} = e^2 D(E_F) R^2 \nu_{ph}$ ,  $D(E_F) \equiv (dn/dE)|_{E_F}$  и где я считал концентрацию электронов, способных к прыжку, как  $n = k_B T D(E_F)$ . Уравнение (11.13) называется “Моттовский закон 1/4”.

Уравнение (11.13) легко обобщается на системы любой размерности  $d$ :

$$\sigma \propto \exp \left[ -(T_0/T)^{1/(d+1)} \right], \quad (11.14)$$

так что для 2D систем получаем закон  $T^{-1/3}$ .

## 11.5 Многоэлектронная задача о прыжковой проводимости. Кулоновская щель

До сих пор в этом разделе мы пренебрегали взаимодействием между электронами. Попробуем выйти за эти рамки и учесть простейший эффект межэлектронного взаимодействия. Вероятность туннелирования электрона зависит от наличия свободного места для искомого конечного состояния и от энергии конечного состояния  $E_f$ . Энергия  $E_f$  зависит не только от заданного пространственного рельефа случайного потенциала, но и от экранирования его окружающими электронами. Эту многоэлектронную задачу обычно решают методом приближения, вводя экранированный потенциал и рассматривая выделенный электрон в поле потенциала экранированного всеми остальными электронами.

В нашей конкретной задаче  $E_f$  зависит от расположения других состояний, соседних с конечным состоянием, а также от того, заполнены они или нет. Потенциальная энергия кулоновского взаимодействия электрона в желаемом конечном состоянии зависит т.о. от того, заняты ли соседние состояния, создающие поле в месте расположения конечного состояния. Иначе говоря, для того, что вероятность туннелирования возросла, соседние электроны должны раздвинуться. При попытке туннелирования с энергией на уровне Ферми  $E_f = E_F$  возмож-

11.5. Многоэлектронная задача о прыжковой проводимости. Кулоновская щель<sup>15</sup>

ности раздвинуться нет, но она появляется по мере удаления энергии конечного состояния от уровня Ферми. В результате, в плотности состояний возникает т.н. “мягкая” кулоновская щель:

$$D(\varepsilon) \equiv \frac{dN}{d\varepsilon} \propto (\varepsilon - \mu)^2, \quad (11.15)$$

которая в двумерной системе приводит к закону Эфроса-Шкловского:

$$\sigma \propto \exp \left[ -(T_0/T)^{1/2} \right]. \quad (11.16)$$

Ясно, чтобы экспериментально наблюдать различные механизмы прыжковой проводимости и различать законы  $T^{1/2}$ ,  $T^{1/3}$  и  $T^{1/4}$ , надо проводить измерения температурной зависимости сопротивления (проводимости) в широком диапазоне температур, не уже чем две декады.





# Литература

- [1] А.Л. Эфрос, Б.И. Шкловский, Электронный свойства ильно легированных полупроводников
- [2] A.L. Efros, B.I. Shklovskii, Coulmb interaction in disordered systems with localized electronic states, in: *Electron-Electron Ineractions in Disordered Systems* (North-Holland, Elsevier Science Publishers BV, 1985).
- [3] Н. Мотт, Э. Дэвис, *Электронные процессы в некристаллических веществах*, (М., Мир, 1982)