

ЭНЕРГИЯ АКТИВАЦИИ ПРЫЖКОВОЙ ПРОВОДИМОСТИ

Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, И. Я. Яичев

При малых концентрациях примесей в полупроводнике волновые функции локализованных электронов слабо перекрываются. Низкотемпературная проводимость такого полупроводника связана с прыжками электронов с занятых на незанятые примесные состояния [1]. Для определенности мы будем говорить о полупроводнике n -типа, в котором имеется N_D доноров и N_A акцепторов. При низких температурах все N_A акцепторов заряжены отрицательно, электроны имеются на $(N_D - N_A)$ донорах, а остальные N_A доноров пусты. Экспериментально установлено, что зависимость прыжковой проводимости от температуры T имеет активационный характер. В настоящей работе мы найдем энергию активации прыжковой проводимости ϵ_3 в случае малой компенсации $K = N_A/N_D \ll 1$. При малой компенсации большая часть доноров заполнена электронами и лишь небольшое количество свободно. Незаполненные донорные состояния можно рассматривать как носители тока: при переходе электрона с заполненного донора на свободный происходит движение положительной вакансии по решетке. При низких температурах все вакансии располагаются в состояниях с минимальной энергией, т. е. в непосредственной близости от отрицательно заряженных акцепторов [1, 2]. Поэтому уровень Ферми оказывается выше энергии изолированного донора на величину порядка энергии кулоновского взаимодействия акцептора с ближайшим донором. При $K \ll 1$ акцепторы расположены далеко друг от друга и поэтому перескок вакансии непосредственно от одного акцептора к другому невозможен. Для того, чтобы двигаться по кристаллу, вакансия должна оторваться от акцептора и прыгать по донорам, далеко отстоящим от акцепторов. Уровни таких доноров очень мало смешены потенциалом заряженных акцепторов и доноров. Поэтому энергия активации определяется разностью между уровнем Ферми и энергией изолированной примеси.

Для нахождения уровня Ферми при $K \ll 1$ и $T = 0$ мы пренебрежем взаимодействием доноров, находящихся в непосредственной близости от одного акцептора, с другими акцепторами. Найдем, какое количество ионизованных доноров может быть в окружении одного акцептора при некотором положительном значении μ . Уровень Ферми, как и все энергии в настоящей работе, отсчитывается вверх от уровня изолированной примеси. Во-первых, может оказаться, что около заданного акцептора нет ни одного ионизованного донора (0-комплекс). Это может быть в том случае, если вокруг акцептора доноры случайно образовали разрежение, так что добавка к энергии электрона ϵ , создаваемая отрицательным акцептором на ближайшем к нему доноре, не превосходит μ . Во-вторых, вблизи акцептора может быть ионизован один донор (1-комплекс). В-третьих, вблизи акцептора могут быть два ионизованных донора (2-комплекс). Такой комплекс, например, может возникнуть, если два донора расположены близко от акцептора, но по разные стороны от него. Можно легко убедиться, что трех ионизованных доноров около одного акцептора при положительном μ быть не может.

Химпотенциал μ определяется условием нейтральности, т. е. условием равенства концентраций 0- и 2-комплексов $N_0(\mu)$ и $N_2(\mu)$. Концентрация $N_0(\mu)$ легко находится. Действительно, 0-комплекс существует, когда на расстоянии $r_\mu = e^2 / \kappa \mu$ от фиксированного акцептора нет ни одного донора (здесь e — заряд электрона, κ — диэлектрическая проницаемость). Вероятность этого события равна $e^{-\frac{4\pi}{3} N_D r_\mu^3}$.

(Мы считаем, что корреляция в расположении примесей отсутствует и поэтому используем распределение Пуассона). Таким образом

$$N_0(\mu) = N_A \exp\left(-\frac{4\pi}{3} \frac{e^6 N_D}{\kappa^3 \mu^3}\right).$$

Точное вычисление $N_2(\mu)$ затруднительно. Поэтому вместо концентрации $N_2(\mu)$ мы будем использовать две близкие к ней величины $N_2^>(\mu)$ и $N_2^<(\mu)$, берущие ее в "вилку" ($N_2^>(\mu) > N_2(\mu) > N_2^<(\mu)$). Мы покажем, что эта "вилка" настолько узка, что соответствующая неопределенность в значении μ меньше 1%. Величина $N_2^>(\mu)$ представляет собой полную концентрацию пар доноров, у которых в ионизованном состоянии обе добавки к энергии уровней ϵ_1 и ϵ_2 превышают μ . (Мы будем называть такую пару μ -парой). Почти всегда наличие μ -пары вблизи акцептора означает существование 2-комплекса. Исключение составляет случай, когда кроме μ -пары около акцептора имеется еще один близкий донор, так что энергетически оказывается выгоднее 1-комплекс с этим донором, чем 2-комплекс с парой. Другая причина, по которой величина $N_2^>(\mu)$ несколько превышает $N_2(\mu)$, заключается в том, что около акцептора, вообще говоря, может оказаться несколько μ -пар доноров. В этом случае реально ионизована будет только наиболее энергетически выгодная μ -пара и 2-комплекс будет только один. Пусть r_1 и r_2 — радиус векторы, проведенные от акцептора до первого и второго доноров соответственно. (Эти доноры, вообще говоря, могут быть не ближайшими соседними акцепторами). Тогда при случайном

распределении примесей имеем

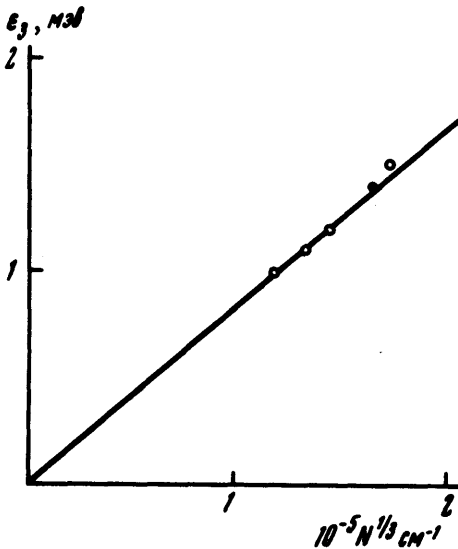
$$N_2^>(\mu) = N_A N_D^2 \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \theta\{\epsilon_1(r_1, r_2) - \mu\} \theta\{\epsilon_2(r_1, r_2) - \mu\}. \quad (1)$$

$$|r_2| \geq |r_1|$$

Здесь ϵ_1 и ϵ_2 — добавки к энергиям электронов на донорах за счет потенциала акцептора и второго донора

$$\epsilon_1 = \frac{e^2}{\kappa|r_1|} - \frac{e^2}{\kappa|r_1 - r_2|}; \quad \epsilon_2 = \frac{e^2}{\kappa|r_2|} - \frac{e^2}{\kappa|r_1 - r_2|}. \quad (2)$$

Мы считаем, что характерные r_1 , r_2 и $|r_1 - r_2|$ велики по сравнению с боровским радиусом электрона на доноре, так что сдвиг уровня можно считать классическим. Функция $\theta(x) = 1$ при $x > 0$ и $\theta(x) = 0$ при $x < 0$. Вторая вычисленная нами величина $N_2^<(\mu)$ представляет собой концентрацию μ -пар, образованных двумя ближайшими к своему акцептору донорами. Докажем, что $N_2^<(\mu) < N_2^>(\mu)$. Действительно, наличие μ -пары из двух ближайших доноров есть лишь достаточное, но не необходимое условие существования 2-комплекса. 2-комплекс может существовать, например, если два ближайших донора вообще не составляют μ -пару, но μ -пара образована первым и третьим донором.



Зависимость энергии активации прыжкового сопротивления ϵ_3 от концентрации основных примесей для наименее легированных из исследованных в работах [4, 5] образцов \circ — $n = \text{Ge}$, \bullet — $p = \text{Ge}$

Эта ситуация возможна, когда первый и второй ближайшие доноры находятся по одну сторону от акцептора, а третий по другую. Таким образом, $N_2^<(\mu) < N_2^>(\mu)$. Для $N_2^<(\mu)$ мы имеем:

$$N_2^<(\mu) = N_A N_D^2 \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 e^{-\frac{4\pi}{3} N_D r_2^3} \theta\{\epsilon_1(r_1, r_2) - \mu\} \theta\{\epsilon_2(r_1, r_2) - \mu\}. \quad (3)$$

$$|r_2| \geq |r_1|$$

Решая с помощью ЭВМ уравнения $N_2^<(\mu) = N_0(\mu)$ и $N_2^>(\mu) = N_0(\mu)$, мы получим значения μ , отличающиеся меньше, чем на 1%. С этой точностью имеем

$$\epsilon_3 = \mu = \alpha \frac{e^2 N_D^{1/3}}{\kappa}; \quad \alpha = 0,99. \quad (4)$$

В работе Миллера и Абрагамса [3] получено, что $\alpha = 1,61$. Это существенное отличие связано с тем, что авторы [3] не принимали во внимание 0- и 2-комплексы. Экспериментальное значение α , полученное с помощью рисунка, $\alpha_{\text{эксп}} = 0,93 \pm 0,01$, что удовлетворительно согласуется с (4).

Физико-технический институт
им. А.Ф.Иоффе
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
13 июля 1971 г.

Литература

- [1] N.F.Mott, W.D.Twose. *Advances Phys.*, **10**, 107, 1961; Перевод УФН, **79**, 691, 1963.
- [2] N.F.Mott. *Canad. J. Phys.*, **34**, 1356, 1956.
- [3] A.Niller, E.Abrahams. *Phys. Rev.*, **120**, 745, 1960.
- [4] H.Fritzsche. *J. Phys. Chem. Solids*, **6**, 69, 1958.
- [5] H.Fritzsche. *Phys. Rev.*, **99**, 406, 1955.