Доклады Академии наук СССР
1970. Том 193, № 3

УДК 539.2 *ФИЗИКА*

М. И. КЛИНГЕР

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ПОПЕРЕЧНОЙ ПРОВОДИМОСТИ И ХОЛЛОВСКОГО ЭФФЕКТА ПОЛЯРОНОВ В НЕКОТОРЫХ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СТРУКТУРАХ *

(Представлено академиком С. В. Вонсовским 16 I 1970)

1. В настоящем сообщении изложена теория поляронов поперечной проводимости $\sigma_t(\omega) = \sigma_t'(\omega) + i\sigma_t''(\omega)$ и холловского угла в 3-мерной, вообще говоря, неупорядоченной системе n (в 1 см^3) центров локализации поляронов (в локальных состояниях $|i\rangle$), в которых статическая проводимость, $\sigma \equiv \sigma_{xx}(\omega = 0)$ и $\sigma_t \equiv \sigma_t(0) = \sigma_t'(0)$, определяются неадиабатическими перескоками. Внешние однородные скрещенные электрическое и магнитное поля обозначены $E \equiv E_x \propto e^{i\omega t}$ и $H \equiv H_z$, причем $H \ll H_0 \equiv \hbar c / |e| r^2$, $r \equiv \left(\frac{3}{4\pi} N\right)^{1/3}$. Рассматриваются поляроны (в обобщенном смысле термина ([3])) как слабой ($\Phi_0 \ll 1$), так и сильной ($\Phi_0 \gg 1$) связи, включая малые поляроны; $\Phi_0 \equiv \Phi(T = 0)$ — параметр электрон-фононной связи; $\Phi \equiv \Phi(T) \geqslant \Phi_0$. Конкретные примеры: проводимость поляронов (включая малые) по примеси (ic); перескоковая проводимость малых поляронов по узлам основной решетки (sp). Модель таких систем описана в ([1]) (см. ниже п. 2) **. Как и для $\sigma(\omega) \equiv \operatorname{Re} \sigma_{xx}(\omega)$, в ([1, 8]) теория описывает также случай вырожденных поляронов, но при не слишком высоких концентрациях N_c носителей тока, $N_c < N(1 - K_0)$ при $K_0 \sim \exp(-I / 2T) \ll \ll 1$ и $I \gg T$, когда хаббардовское межполяронное отталкивание еще не является доминирующим фактором и его характерная энергия $I > 2\zeta$; ζ — химический потенциал поляронов, отсчитанный (как и их энергетические уровни) от основного уровня на изолированном центре. По существу, используется блоховская модель сильной связи с «малым» электронным резонансным интегралом $\Delta_e(R)$.

Теория основана на подходе и соображениях ([1–3]) — вычисляются $\sigma_t'(\omega)$ (в случаях, которые не обсуждались в ([2])) и $\sigma_t''(\omega)$ посредством адекватной расшифровки формул Кубо для $\sigma_t(\omega)$ (и $\sigma_{xx}(\omega)$), содержащих, вообще говоря, также усреднение $\langle ... \rangle_{Av}$ по флуктуациям локальных уровней $\{\varepsilon_i\}$ в полосе (D) с шириной D и конфигурациям $\{\mathbf{R}_i\}$ и $\{R_{ij} \equiv |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|\}$. Как и $\sigma_{xx}(\omega)$, $\sigma_t(\omega) = \Sigma_t(\omega) + S_t(\omega)$: $\Sigma_t(\omega)$ и $S_t(\omega)$ определяются соответственно «антисимметричными» ($x \leftrightarrow y$) корреляторами $K^{(a)}_{v_x v_y}(t)$ скоростей $\hat{v}_x$) и $(\omega^2 K^{(a)}_{p_x p_y}(t))$ диполей $(\hat{p}_x)$; $S_t(0) = 0$. Расшифровка формул Кубо для $\sigma_t(\omega)$ произведена методами ([1]) при усреднении $\langle ... \rangle_{Av}$. Для (sp) $\sigma_t(\omega) = \Sigma_t(\omega)$ и $S_t(\omega) = 0$.

2. Усреднение $\langle ... \rangle_{Av}$ в целом одна из основных и наиболее трудных проблем в рассматриваемой теории переноса в неупорядоченных системах

---

* Некоторые основные результаты были кратко доложены автором в сентябре 1969 г. в обзорном докладе на Международной конференции по аморфным и жидким полупроводникам (г. Кембридж).

** Обозначения и модель системы, здесь используемые, те же, что и в ([1, 3]). В частности, $\mathscr{E}$ — поляронная энергия активации перескоковой дрейфовой подвижности, $\mathscr{E} \approx {}^1/_2 \omega_{ph} \Phi_0$ при $\Phi_0 \gg 1$. Здесь ω_{ph} — характерная частота существенных фононов. Ниже $\hbar = 1$ и $k_B = 1$, $T_{ph} \equiv \omega_{ph} / 2$.

(специальное ее обсуждение выходит за рамки статьи, ср. ([5])) и пока не имеет общего строгого решения для 3-мерных систем (для 1-мерного случая см., например, ([9])). Поэтому и имея в виду оценку ω- и T-зависимостей и порядка величины $\sigma_t(\omega)$, используется приближенная модель усреднения, которая фактически учитывает «случайный» характер ε_i и распределения $g_q(\varepsilon_1 \ldots \varepsilon_q)$ уровней ε_i полярона ($q \geqslant 1$). Для неупорядоченных систем типа (ic) эта модель фактически включает следующие предположения: 1) подавляющее большинство возможных конфигураций $\{\mathbf{R}_i\}$ соответствует «проводящим цепям» при $R_{ij} \sim r$; 2) «плавные» примесные потенциалы $|v(r)| \gg |\Delta_e(r)|$ (полоса (D) есть полоса «классического» концентрационного уширения), так что распределения $g_q(\varepsilon_1\varepsilon_2 \ldots \varepsilon_q)$ практически не связаны с флуктуациями $\Delta_e(R)$: усреднения по $\{\varepsilon_i\}$ (при $R_{ij} = \lambda_0 r$) и по $\{\mathbf{R}_i\}$ статистически независимы; 3) для оценки средних величин типа $\chi_q \equiv \equiv \langle\Delta_e(R_{12}) \ . \ . \ . \ \Delta_e(R_{q,1})\rangle_{\{R_i\}}$, описывающих члены q-го порядка (по $\Delta_e(R)$) в разложениях, определяющих $\sigma_{\mu\nu}(\omega)$, вводится аппроксимация высших корреляционных функций «газа» центров (в «проводящих цепях») $P_q(R_{12} \ldots R_{q,1}) \approx P_2(R_{12}) \ldots P_2(R_{q-1,q})P_2(R_{q1})$, применяемая в теории разреженных газов (здесь поскольку $r \gg r_B$), так что $\chi_q \approx \Delta^q{}_{AV}$, где $\Delta_{AV} = = \langle\Delta_e(R_{12})\rangle_{AV} \equiv \Delta_{AV}(r) = \Delta_e(R_0)$ и $R_0 = \lambda_0 r$, $\lambda_0 \sim 1$ (во всяком случае, $\Delta^{(q)}_{AV} \equiv (\chi_q)^{1/q}$ не больше, чем Δ_{AV}). Поскольку $P_2(R)$ явно не найдена (и прямое вычисление Δ_{AV} и λ_0 пока не проведено), Δ_{AV} (и λ_0) считаем параметром теории, зависимость которого от r находится из сравнения $d\sigma_{xx}/dr$ ($\propto d\Delta_{AV}/dr$) с соответствующими опытными данными, что и замыкает в принципе схему расчета. (Из сравнения $d\sigma_{xx}/dr$ и $d\sigma_t/dr$ с опытными данными можно также проверить справедливость предположений, что $\Delta^{(3)}_{AV} \approx \Delta_{AV}$ и что $\Delta_{AV} = \Delta_e(\lambda_0 r)$ при $\lambda_0 \sim 1$.)

Теперь принятая модель аналогична модели Андерсона из ([6]), если распространить ее для вычисления $\sigma_{\mu\nu}(\omega)$ (при $\omega \geqslant 0$ и конечной электрон-фононной связи). Эта аналогия дает возможность применить результаты рассмотрения ([6]) к оценке усредняемых членов разложения $\Sigma_{\mu\nu}(\omega)$ и основного, перескокового, члена $\Sigma_{\mu\nu}{}^h(\omega)$. Критерии (малые параметры) теории, следующие из таких оценок, таковы: для малых поляронов (как для (ic), так и для (sp)) они даны в §§ 3, 10 ([1]). Для иных поляронов слабой или сильной связи в случае (ic) (и аналогичных) основной критерий имеет вид $\Delta_{AV} \ll \eta_0 D$, $\eta_0 \sim 1$ (ср. § 10 ([1])). При $\omega \gg D$, возможно, этот критерий есть $\Delta_{AV} \ll \omega$, так что критическая концентрация N_{cr} росла бы с ростом ω, см. ([1]) *.

2. Составляющая $\Sigma_t(\omega)$ определяется фазово-коррелированными перескоками по 3 ($\Sigma_t(3; \omega)$) или 4 ($\Sigma_t(4; \omega)$) центрам (см. ([1-3])). Здесь достаточно подробнее обсудить $\Sigma_t(3; \omega)$ по следующим соображениям: 1) по приближенным оценкам (при одинаковых по величине Δ_{AV}, $\mathscr{E}$ и D)

$$|\Sigma_t^{'(")}(4; \omega)|_{\max} |\Sigma_t^{'(")}(3; \omega)|^{-1} (\lesssim) \Delta_{AV} [\max\{D; \mathscr{E}\}]^{-1} \exp(-\beta\Delta W^{'(")})$$

(см. ([1, 2]) и ниже), причем $\Delta W^{'(")} < W^{'(")}$, см. (2) (для (sp) при разумных предположениях относительно коэффициентов V_f электрон-фононного взаимодействия ([1]) фактически можно полагать, что $\beta\Delta W^{'(")} \ll 1$ при $T \gg \gg \Delta^{(p)}_{AV} = \Delta_{AV} \exp(-\Phi)$, что и используется в ([1, 2])): в любом случае, ω- и T-зависимости для $\Sigma_t^{'(")}(4; \omega)$ и $\Sigma_t^{'(")}(3; \omega)$ здесь имеют аналогичный характер (количественно формулы ([2]) относятся к случаю $\beta\Delta W^{'(")} < 1$ и $\beta W_D{}^{'(")} < 1$, см. (1), (2)); 2) $\Sigma_t(\omega) \simeq \Sigma_t(3; \omega)$ не только для (sp) в подходящих (например, гексагональных) решетках, но, как можно ожидать,

* Для (ic) в принятой модели также следует, что, по крайней мере в некотором интервале $K' < K < 1 - K''$ ($K' \ll 1$ и $K'' \ll 1$), ζ содержит член $\zeta_0 = \zeta_0(K; T)$, постоянный (или слабо убывающий) с T^{-1}; ζ_0 определяет соответствующую энергию активации W_D для $\sigma_{xx}(\omega)$; например, $K' \approx K'' \approx \exp(-D/T)$ при $D \gg T$ в ([5]) (при $K \to 1$, видимо, $\zeta_0 \to 0$, т. е. $\beta\zeta \simeq \text{const}$ по T). Для оценок можно использовать приближения типа $g_2(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \approx g_1(\varepsilon_1)g_1(\varepsilon_2)$ (при $R_{12} \sim r \gg r_B$).

и для (ic) (и аналогичных случаев), когда существуют «цепи проводимости» (сквозь всю систему центров) по тройкам центров при $R_{ij} \sim r$. В дальнейших оценках полагается, что $\Delta_{AV}^{(p)} < T$ и $\{D, \mathscr{E}\} \gg T$. Структура полученных общих выражений для $\Sigma_t(3;\omega)$ довольно проста. В частности, при $\omega/2T \leqslant 1$ $\Sigma_t'(3;\omega) \simeq \Sigma_t(3) \equiv \Sigma_t(3;0)$ и $\Sigma_t''(3;\omega)/\beta\omega$ определяются выражениями типа

$$\beta N_c \frac{H}{H_0} \Big\langle \sum_{23} \Delta_e^0(R_{12}) \Delta_e^0(R_{23}) \Delta_e^0(R_{31}) \sum_{\varepsilon_1\varepsilon_2\varepsilon_3} \varphi(\zeta - \varepsilon_1)\varphi(\zeta-\varepsilon_2) \times$$

$$\times \left\{ J_1(\omega_{12};\omega_{13})(1 - f_\infty(\varepsilon_3)) - \frac{1}{2} J_2(\omega_{12};\omega_{13}) f_\infty(\varepsilon_3) \right\} \Big\rangle_{AV},$$

где $\Delta_e^0(R_{12}) \equiv [\Delta_e(R_{12})]_{H=0}$; $\varphi(x) \equiv [2e^{\beta x/2} + e^{-\beta x/2}]^{-1}$; $f_\infty(\varepsilon) = [1 + {}^1/_2 e^{\beta(\varepsilon-\zeta)}]^{-1}$; $\beta \equiv 1/T$ (для простоты речь идет о случае невырожденных состояний $|i\rangle$), $J_\alpha(x, y)$ — вклад «исключенных» (суммированием) фононных переменных вида, типичного для характеристик подобных многофононных процессов, например, интеграл ($\equiv J(\omega)$) в $\sigma \equiv \sigma_{xx}(0)$ из (79) ([1]) *. В частности, при $\Phi_0 \gg 1$ $J_1''(\omega_{12};\omega_{13}) \approx J_2''(\omega_{12};\omega_{13}) \sim |2\mathscr{E} + \omega_{13}|^{-1} J(\omega_{12})$ в $\Sigma_t''(3;\omega)$. Для краткости оценки и основные зависимости при $\beta\omega/2 \leqslant 1$ даны для $u_t \equiv \Sigma_t(3)/|e|N_c$ и $\Delta_t \equiv \Sigma_t''(3;\omega)/|e|\omega N_c$. (Оценки $\Sigma_t'(3;\omega)$ в ([2]) при $\Phi_0 \gg 1$ и высоких T даны для случая $T > D$, когда $\exp(-\beta W_D') \simeq 1$). Как u_t, так и Δ_t обнаруживают T-зависимости активационного типа, похожие на таковые для $u \equiv \sigma/|e|N_c$ (в ([1, 2, 8]) даны для случая $T > D$, когда $\exp(-\beta W_D) \simeq 1$), с учетом того, что в любом случае здесь $u \propto \exp(-\beta W_D)$, $W_D \lesssim D$. Энергии активации для u_t (W') и для Δ_t (W'') различны в различных интервалах T и Φ_0. Вообще говоря (включая случай вырожденных $|i\rangle$ состояний) **,

$$u_t \propto f'(T)\exp(-\beta W'); \quad u_t \propto c_1' f_1'(T) e^{-\beta W_1'} + c_1'' f_2'(T) e^{-\beta W_2'}$$
$$\text{при } \Phi_0 \gg 1, \quad T > T_0, \tag{1}$$

где $W_1' = W_D' = {}^1/_3\mathscr{E}$ и $f_1'(T) = T^{-2}$; $W_2' = W_D' + \mathscr{E}$ и $f_2'(T) = T^{-1}$; при $\Phi_0 \gg 1$ и $T < T_1$ $W' = W'_{(\mathrm{opt})} \equiv W'_D + \omega_{\mathrm{opt}}$ и $f'(T) = T^{-1}$ для (opt) (доминирующая связь полярона с оптическими фононами) или $W' = W'_{\mathrm{ac}} \equiv W_D'$ и $f'(T) = \mathrm{const}$ для (ac) (в связи доминируют акустические фононы); при $\Phi_0 \leqslant 1$ и $T \leqslant T_{ph}$ $W' = W'_{(\mathrm{opt})} \equiv W'_D + \omega_{\mathrm{opt}}$, но $W' = W'_{(\mathrm{ac})}$ и $f'_{(\mathrm{ac})}(T) = \mathrm{const}$. В частности, в u_t $c_1'/c_1'' = 0$ для состояний s-типа и невырожденных поляронов. Формулы (1), при $\Phi_0 \gg 1$ и $T > T_0$ обобщают таковые для (sp) в идеальной решетке на случай любых поляронов сильной связи в неупорядоченной решетке с учетом дополнительного активационного множителя $\exp(-\beta W_D')$. (Видимо, ситуация аналогична при всех $T \gg T_1$.) Для Δ_t имеем

$$\Delta_t \propto f''(T)\exp(-\beta W''), \tag{2}$$

где: при $\Phi_0 \gg 1$ и $T > T_0$ (видимо, аналогично при всех $T \gg T_1$) $W'' = W_D'' + \mathscr{E}$ и $f''(T) = T^{-1/2}$; при $\Phi_0 \gg 1$ и $T < \{T_1; T_{ph}\}$ $W'' = W''_{(\mathrm{opt})} \equiv W''_D + \omega_{\mathrm{opt}}$ или $W'' = W''_{(\mathrm{ac})} \equiv W''_D$ и $f''_{(\mathrm{ac})}(T) = T^0$; при $\Phi_0 \leqslant 1$ и $T \leqslant T_{ph}$ $W'' = W''_{(\mathrm{opt})}$ или $W'' = W''_{(\mathrm{ac})}$ при $f''_{(\mathrm{ac})}(T) = T^{-1}$. Энергии ак-

* Для (ic) (при $|\omega_{ij}| = |\varepsilon_i - \varepsilon_j| \gg |\Delta_e(R_{ij})|$ для большей части переходов) «вычитание» вклада недиссипативных переходов ([1]), содержащееся в $J_\alpha(x, y)$, фактически сводится к таковому в матрице полярон-фононного взаимодействия (возмущения) $\mathscr{H}_1$: при этом перенос «туннельно-зонного» типа также имеет черты перескоковой диффузии.

В ([2]) в случае (ic) использовано «вычитание», адэкватное для случая (sp); это не изменяет оценок при $\Phi_0 \gg 1$ в (16), (17), но дает неточную оценку для U_h при $\Phi_0 \leqslant 1$ в (18): использование «вычитания», адэкватного для (ic), приводит в U_h к замене $\beta \to \omega_{ph}^{-1}$ при $D \leqslant T$ или $\beta \to D^{-1}$ при $D \gg T$ (ср. ([1])).

** Соотношение двух членов (т. е. $\sim c_1'$ и $\sim c_1''$) для $\Sigma_t(4;\omega=0) \equiv \Sigma_t(4)$ может отличаться от таковой для $\Sigma_t(3)$.

тивации W_D, W_D' и W_D'' обусловлены флуктуациями уровней ε_i и существенно определяются членами типа ζ_0 в ζ: $W_D \equiv W_D[\zeta_0] \lesssim D$ и то же для W_D' и W_D'', причем $\Delta' \equiv W_D' - W_D \geqslant 0$ и $\Delta'' \equiv W_D'' - W_D \geqslant 0$. По-видимому, $\beta\Delta'^{('')} \ll 1$ (при $T \gg \Delta_{AV}^{(p)}$) для (ic) (по крайней мере для невырожденных $|i\rangle$-состояний). Определяя угол Холла $\theta(\omega) \equiv \theta(3;\ \omega) \equiv \Sigma_t(3;\ \omega)\,/\,\Sigma_{xx}(0) \equiv \theta'(\omega) + i\theta''(\omega)$, имеем следующие (примерные) оценки: при $\Phi_0 \ll 1$ и $T \ll T_0$ (и однофононных процессах),

$$|\theta'(0)|_{(ac)} \lesssim \frac{H}{H_0}\frac{\Delta_{AV}}{T}\left(\frac{\omega_{ph}}{D}\right)^2 e^{-\beta\Delta'} q_1 \quad \text{при} \quad q_1 < 1,$$

$$|\theta''(\omega)|_{(ac)} \lesssim \pi\beta\omega\frac{H}{H_0}\frac{\Delta_{AV}}{T} e^{-\beta\Delta''}; \tag{3}$$

$$\theta'(0)| \lesssim \frac{H}{H_0}\frac{\Delta_{AV}}{\mathscr{E}} e^{-\beta\Delta'}\chi, \quad |\theta''(\omega)| \lesssim \beta\omega\frac{H}{H_0}\frac{\Delta_{AV}}{\max\{\mathscr{E};\ D\}} e^{-\beta\Delta''} \quad \text{при } \Phi_0 \gg 1,$$

где $\chi = \left\{c_1' \exp\left(-\frac{\beta\mathscr{E}}{3}\right)\sqrt{\frac{\mathscr{E}}{T}} + c_1''\sqrt{\frac{T}{\mathscr{E}}}\right.$ при $T > T_0$; χ_0 при $T \ll T_1\}$, $\chi_0^{(ac)} \sim \beta\omega_{ph}$, причем при $\Phi_0 \gg 1$ $\operatorname{sgn}\theta(\omega) = \operatorname{sgn} e$, по крайней мере, для состояний s-типа и не очень сильном фермиевском вырождении (для $\theta(4;\ \omega)$ или при $\Phi_0 \ll 1$ ситуация более сложна). Для актуальных параметров, например $H \cdot H_0^{-1} = 10^{-2}$, $\omega = 10^6$ гц; $T = 10^\circ$ K, $\omega_{ph} = 10^{-3}$ эв, $\Delta_{AV}/T = 10^{-2}$ и $\omega_{ph}/D = 10^{-1}$ при $\Phi_0 \ll 1$(ic), θ' и $\theta''(\omega)$ очень малы (много меньше, чем в [7]), $\theta' < 10^{-6}$ и $|\theta''(\omega)| < 10^{-10}$. Если определить угол Холла как $\nu(\omega) \equiv \Sigma_t(3;\ \omega)\,/\,\sigma(\omega)$, то $|\nu(\omega)|$ может быть только меньше, так как $\sigma(\omega) \geqslant \Sigma(\omega)$ [3].

3. Предварительные оценки не дают оснований полагать, что $|S_t(\omega)|$ может преобладать над $|\Sigma_t(\omega)|$ и определять $\sigma_t(\omega)$ (в отличие от ситуации для $\sigma(\omega)$ в [3]). Поскольку это так (т. е. отсутствует вклад «больших» поляронных диполей ($\sim er$) в нечетную проводимость $\sigma_t(\omega)$), можно считать, что оценки (1)—(3) определяют $\sigma_t(\omega)$ и надлежаще определенный угол Холла и что данная теория, видимо, не приводит к обоснованию формулы для вклада $\sigma_t^H(\omega)$ (в $\sigma_t''(\omega)$), полученной [7] для частного случая (ic) при $\Phi_0 \ll 1$ и $\omega \ll T$ в рамках полуинтуитивного теоретико-диффузионного подхода. В последнем предполагается, что $\sigma_t^H(\omega)$ обусловлено трехцентровыми перескоками, хотя фактически $\sigma_t^H(\omega)$ скорее «поляризационного» типа и имеет при $\Phi_0 \ll 1$ безактивационный туннельный (неперескоковый) характер (см. [3]). Возможно, в этом объяснение того, что в [7] для $\sigma_H(\omega)$ получены большие величины, не согласующиеся с данной теорией (см. выше) и с соответствующими опытами (см. [10]).

Институт полупроводников
Академии наук СССР
Ленинград

Поступило
20 XII 1969

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] M. Klinger, Reports Progr. Phys., 31, 225 (1968). [2] M. Klinger, Phys. Stat. Solid., 31, 515 (1969). [3] М. Клингер, ДАН, 193, № 2 (1970). [4] И. Лифшиц, УФН, 84, 617 (1964). [5] A. Miller, E. Abrahams, Phys. Rev., 120, 745 (1960). [6] P. W. Anderson, Phys. Rev., 109, 1492 (1958). [7] T. Holstein, Phys. Rev., 124, 1329 (1961). [8] М. Клингер, ДАН, 183, 311 (1968). [9] Ю. Бычков, А. Дыхне, ЖЭТФ, 51, 1914 (1966). [10] M. Amitay, M. Pollak, J. Phys. Soc., Japan, Suppl., 21, 549 (1966).