

УДК 539.2

ФИЗИКА

М. И. КЛИНГЕР

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ПРОВОДИМОСТИ
ПОЛЯРОНОВ В НЕКОТОРЫХ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ *

(Представлено академиком С. В. Вонсовским 29 XII 1969)

В настоящем сообщении дана теория нестационарной проводимости $\sigma(\omega)$ поляронов в однородном (слабом) электрическом поле $E \equiv E_x \propto e^{i\omega t}$ (полярного поглощения электромагнитных волн) в 3-мерной пространственно однородной неупорядоченной системе, состоящей из пространственно (\mathbf{R}_i) и энергетически (ε_i) неэквивалентных центров локализации поляронов (в состояниях $|i\rangle$). Имеются в виду такие системы, например, при сравнительно низких концентрациях N центров и температурах T (и надлежащих других параметрах, см. ⁽¹⁾), в которых $\sigma \equiv \sigma(0)$ определяется неадиабатическими перескоками поляронов на расстояниях $R \equiv R_{ij} \equiv |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|$ между ближайшими центрами. При рассматриваемых средних расстояниях $r \equiv (3/4\pi N)^{1/3} \gg r_b$ (r_b — характерный боровский радиус электрона на центре) исходной «малой» величиной является электронный резонансный интеграл $\Delta_e(R) \propto \exp(-R/r_b)$, а параметры (электрон-фононной) связи $\Phi_0 \equiv \Phi(0)$ и $\Phi \equiv \Phi(T)$ практически не зависят от r (от R). Как и в ^(1, 2), полярон понимается в обобщенном смысле как квазичастица типа электрон (дырка) + деформация решетки (т. е. электрон + связанные с ним фононы (бозоны) любой ветви) как при слабой ($\Phi_0 \equiv \Phi(T=0) \ll 1$), так и при сильной ($\Phi_0 \gg 1$) связи, включая малые поляроны при $\Phi_0 \gg 1$ и $r_b < a$ (a — постоянная регулярной решетки). Примером таких процессов является проводимость по примеси — теория и модель подобных систем и процессов обсуждались в ^(1, 4, 5). Критерии для $\sigma \equiv \sigma(\omega = 0)$ даны в ^(1, 5) в виде $\Delta_{AV} \ll A$. При $\omega \gg A$ возможно они имеют для $\sigma(\omega)$ вид $\Delta_{AV} \ll \omega$, расширяя область (так что, возможно, N_{cr} растет с ω).

1. Основные соображения таковы. Процессы двух основных типов определяют $\sigma(\omega)$: 1) перескоки по «проводящим цепям» сквозь всю систему — «нормальная» проводимость $\Sigma(\omega)$ — определяется (в формуле Кубо) фурье-образом $K_{vv}(\omega)$ временного (t) коррелятора $K_{vv}(t)$ полярных скоростей (v_s): $\Sigma(0) = \sigma(0) \equiv \sigma$; 2) локальные поляризационные токи в отдельных кластерах $z (\geq 2)$ центров — «поляризационная» проводимость $S(\omega)$ определяется фурье-образом $K_{pp}(\omega)$ коррелятора дипольных моментов (p_x): $S(0) = 0$. Вклад $S(\omega)$ существен, если на состояниях $|k\rangle$ полярона в кластере с энергиями $U^{(k)}$ ($k = 1, 2, \dots$) существуют «большие» дипольные моменты $p_{kk'} \equiv \langle k | \hat{p}_x | k' \rangle \sim eR$ (нулевого порядка по «малому» $\Delta_e(R)$). В рассматриваемых системах с перескоковой проводимостью, когда ширина D полосы (D) флуктуаций уровней ε_i и $\omega_{ij} \equiv \varepsilon_i - \varepsilon_j$ достаточно велики, т. е. $|\omega_{ij}| \gg \Delta_e(R_{ij})$ и $D \gg \Delta_e(r)$, $P_d^2 \sim \sim (eR)^2 \gg P_{nd}^2$; P_d и P_{nd} — характерные диагональные (по k) и недиагональные диполи.

* Некоторые основные результаты были кратко изложены в обзорном докладе, прочитанном автором в сентябре 1969 г. на Международной конференции по аморфным и жидким полупроводникам в Кембридже (Англия).

В основу теории положена адекватная расшифровка формулы Кубо для $\sigma(\omega) = \Sigma(\omega) + S(\omega)$, следуя подходу и методам ⁽¹⁾ (² § 3, 10). «Нормальная» проводимость $\Sigma(\omega) \simeq \Sigma^h(\omega) \approx |e|N_c\mu_0\beta W_h(\omega, T)$ ($|e|N_c\mu_0$) * определяется эффективной вероятностью $W_h(\omega, T) = W_h(\omega)E_\beta^{-1}(\omega) \equiv z\Delta^2_{AV}V_h(\omega)E_\beta^{-1}(\omega)$ некоррелированных 2-узельных перескоков (в 1 сек.); здесь $\beta \equiv 1/T$; $E_\beta(\omega) = 1/2\omega \operatorname{cth} \beta\omega/2$; $\Delta_{AV} \equiv \Delta_{AV}(r) = \Delta_e(R_0)$ и $R_0 \sim r$; $V_h(\omega) \propto \exp(-\beta W_D)$ и энергия активации W_D ($\leq D$) обусловлена флуктуациями (ε_i) (в ^{(1), (5)} для случая $T > D$) $\exp(-\beta W_D)$ ($\simeq 1$ не выписан явно). Характерные особенности $\Sigma(\omega; T)$ (активационное поведение с T и немонотонность с ω) и их смысл обсуждаются в ^{(1), (2)}. В частности, при $\Phi_0 \gg 1$, $T < \omega/2$ и $T < \mathcal{E}/2$ $\Sigma(\omega)$ (при $\omega \sim \omega_0^{ij}$) определяется усредненным $\langle \dots \rangle_{AV}$ разложением $V_h(\omega)$ по его семиинвариантам и есть суперпозиция (перекрывающихся при $|\omega_{ij}| \ll \omega_0$) почти-гауссовых пиков при $\omega = \omega_0^{ij} \equiv \omega_0 + \omega_{ij}$ и $\omega_0 = 4\mathcal{E} \approx 2\omega_{ph}\Phi_0$: приближенно $\Sigma(\omega) \sim |e|N_c\mu_0\Delta^2_{AV} (\omega\delta_0)^{-1} \langle \exp[-(\omega - \omega_0^{ij})^2/2\delta_0^2] \rangle_{AV}$.

2. Вообще говоря, $S(\omega) = S^I(\omega) + S^{II}(\omega)$: $S^I(\omega)$ и $S^{II}(\omega)$ соответствуют движению полярона около дефекта (по ближайшим $z(\geq 2)$ узлам решетки при $R = \text{const}$) и по кластерам из $z(\geq 2)$ центров; при $\Omega \equiv |\omega_{ij}/\Delta_e(R_{ij})| \ll 1$ $S^I(\omega)$ обсуждена в деталях в ⁽²⁾. (В ⁽²⁾ может быть $P_d^2 \sim (eR)^2$ при $z \geq 2$, если $\Omega \gg 1$, или при $z > 2$, если $\Omega \ll 1$ и основной уровень U^1 вырожден.) Как и $S^I(\omega)$, $S^{II}(\omega) = S_b^{II}(\omega) + S_h^{II}(\omega)$ содержит вклады $S_h^{II}(\omega)$ активационных перескоков и $S_b^{II}(\omega)$ безактивационного «туннельного» (зонного типа) переноса при рассеянии полярнов фононами с характерным временем релаксации τ_D (одним — при $z = 2$) **.

В рассматриваемом для $S^{II}(\omega)$ случае ($\Omega \gg 1$) оценки и $(\omega; T)$ -зависимости $S^{II}(\omega; T)$ определяются фактически вкладом отдельных характерных пар ($z = 2$) центров, по крайней мере, если их характерные размеры $r_{ef} \leq r$ или качественно сходны (см. ниже). В таком «парном» приближении $S_b^{II}(\omega) \simeq S_d^{II}(\omega)$ (ср. ⁽²⁾) $S_d^{II}(\omega)$ соответствует «туннельному» (не перескоковому) движению («больших» диполей P_d) полярнов в полосе «релаксационного» уширения ($\sim \tau_D^{-1}$) основного уровня ($U^{(1)}$), так что $S_d^{II}(\omega) \propto P_d^2$, но $S_b^{II}(\omega) - S_d^{II}(\omega) \propto P_{nd}^2$ и $P_{nd}^2 \ll P_d^2$. Концентрация таких пар (содержащих по одному из N_c полярнов) $n \propto N_c$: приближенно, видимо, $n \approx NN_c$. При $\beta\omega/2 \ll 1$ $S_b^{II}(\omega) \simeq S_d^{II}(\omega)$ описывается формулой дебаевского вида, что следует из

$$S_b^{II}(\omega) \simeq nE_\beta^{-1}(\omega) \left\langle \sum_2 \sum_{\varepsilon_1\varepsilon_2} \chi_D^{(12)} P_d^2(\omega_{12}) \left(\operatorname{ch} \frac{\beta U^{(1)}}{2} \right)^{-2} \right\rangle_{AV}, \quad \chi_D^{(12)}(\omega) \equiv \frac{\omega^2 \tau_D(\omega)}{1 + \omega^2 \tau_D^2(\omega)}; \quad (1)$$

$$S_b^{II}(\omega) \approx e^2 n E_\beta^{-1}(\omega) \left\langle \sum_2 \bar{\chi}_D^{(12)}(\omega) G(|\omega_{12}| < D_0; R_{12}) R_{12}^2 \right\rangle_{AV}, \\ \bar{\chi}_D^{(12)}(\omega) \equiv \{\chi_D^{(12)}(\omega)\} \quad \text{при} \quad |\omega_{12}| = D_0 < \{2T; D\}, \quad (2)$$

* Обозначим: N_c — концентрация носителей тока; ω_{ph} и ω_M — характерная и максимальная частоты фононов (существенной ветви); (ac) и (opt) — акустические и оптические фононы; $\omega_{ph}^{(ac)} = \pi s_0 (\max\{r_B; a\})^{-1}$, $\omega_M^{(ac)} \equiv \omega_D = \pi s_0/a$ (s_0 — скорость звука) в длинноволновом приближении, количественно адекватном при $r_B \gg a$; $\omega_M^{(opt)} \simeq \omega_{ph}^{(opt)} \equiv \omega_{opt}$. Полярный газ не сильно вырожден и $T > \Delta_{AV} \exp(-\Phi)$; $\hbar = 1$; $k = 1$.

** Если $\Phi_0 \gg 1$, то $S^{II}(\omega) = S_h^{II}(\omega)$ при $T > T_{xx}$ или (и) $\omega > \omega_{xx}$, но $S^{II}(\omega) = S_b^{II}(\omega)$ при $T < T_{xx}$ и $\omega < \omega_{xx}$, причем $T_{xx} \sim T_1 < T_0 \equiv \omega_M/2$ и $\tau_D^{-1} \ll \ll \omega_{xx} \ll \omega_{ph}$; $T_1^{(opt)} = T_0^{(opt)} (\operatorname{Ar sh} 2\Phi_0)^{-1}$; $T_1^{(ac)} \approx T_0^{(ac)} (2\pi\Phi_0^{1/4})^{-1}$. Если $\Phi_0 \ll 1$, то $S^{II}(\omega) = S_b^{II}(\omega)$ по крайней мере при $T < T_0$ и $\omega < \omega_{ph}$.

где $U^{12} \equiv U^1 - U^2$; $P_d(\omega_{12}) \equiv |p^{(1)} - p^{(2)}| \sim eR$ при $\Omega \gg 1$; $G(|\omega_{12}| < x; R_{12}) = \int_x^\infty d\omega_{12} g_2(\omega_{12}; R_{12})$; g_2 — распределение «пар» (R_{12}) по ω_{12} , так что $G(|\omega_{12}| \leq x; R_{12}) \approx 1$ при $x > D$; при $x < D$, видимо, для оценок можно принять $G(|\omega_{12}| < x) \approx G_0(|\omega_{12}| < x) \equiv x/D$. В (2) учтено, что основной вклад в (1) вносят $|\omega_{12}| < \{2T; D\}$ поскольку, поскольку выражение $\chi_D^{(12)}(\omega) P_d^2(\omega_{12}) (\operatorname{ch} \beta U^{12}/2)^{-2} = \max$ при $|\omega_{12}| = D_0 < \{2T; D\}$.

Оценки $\tau_D(\omega)$, убывающего с T , дают следующее (эти оценки справедливы и для $S_b^I(\omega)$ и для $\sigma_{xx}^b(\omega)$ малых поляронов ⁽¹⁾ в идеальной решетке): 1) $\tau_D^{-1}(\omega) = W_{sc}(\omega; |\omega_{12}| < D_0) \ll \{\omega_{ph}; T\}$ в области применимости теории (W_{sc} — вероятность рассеяния полярона в 1 сек.); $\tau_D(\omega \ll 2T) \simeq \tau_D \equiv \tau_D(\omega = 0)$, но $\tau_D(\omega)$ может расти с ω при $\omega > 2T$ (при $\Phi_0 \gg 1$ это существенно лишь, если также $\omega_{xx} > 2T$); 2) при $\Phi_0 \ll 1$ $\tau_D^{-1}(\omega) \approx W_h(\omega; R = R_{12})/z \propto \Delta_e^2(R_{12})$, но при $\Phi_0 \gg 1$ обычно $\tau_D^{-1}(\omega) \gg z^{-1} W_h(\omega; R = R_{12})$ и $\tau_D^{-1}(\omega) \propto \Delta_e^4(R_{12})$; 3) при $\Phi_0 \ll 1$ и $T < T_0^{(ac)}$ для (ac) $\tau_D^{-1} \propto T$ (или $\tau_D^{-1} \propto T^\alpha$, $0 < \alpha \leq 1$) при 1-фононном рассеянии (не слишком малые ω_{ph}/D), но $\tau_D^{-1} \propto T^3$ при 2-фононном рассеянии; 4) при $\Phi_0 \gg 1$ и $T < T_1^{(ac)}$ для (ac): $\tau_D^{-1} \propto T$ (или $\tau_D^{-1} \propto T^\alpha$, $0 < \alpha \leq 1$) при 1-фононном и $\tau_D^{-1} \propto T^7$ при 2-фононном рассеянии; 5) для (opt), вообще, $\tau_D \propto (\operatorname{sh} \beta \omega_{opt}/2)^2$ (при $\omega_M^{(opt)} \simeq \omega_{ph}^{(opt)} \equiv \omega_{opt}$).

Вследствие резкой зависимости τ_D от R_{12} можно в (2) аппроксимировать (ср. ⁽³⁾) $(\omega \tau_D(\omega, R_{12}) + 1/\omega \tau_D(\omega, R_{12}))^{-1} \approx \pi r_B \delta(R_{12} - \rho_0)$ при $\rho_0 \lesssim r$, где $\rho_0 \equiv \rho_0(\omega, T)$ определяется из $\omega \tau_D(\omega, \rho_0) = 1$. Это значит, что (при $\rho_0 \lesssim r$) лишь селективные пары при $R_{12} = \rho_0(\omega, T)$ определяют $S_b^{\text{II}}(\omega)$; например, при $\beta \omega/2 \ll 1$ имеем для (ac): $\rho_0/r_B \propto \ln(T/\omega)$ при 1-фононном рассеянии как при $\Phi_0 \gg 1$, так и при $\Phi_0 \ll 1$ (или $\rho_0/r_B \propto \ln(T^\alpha/\omega)$, $0 < \alpha \leq 1$), а при 2-фононном рассеянии $\rho_0/r_B \propto \ln(T^3/\omega T_{ph}^2)$ при $\Phi_0 \ll 1$ или $\rho_0/r_B \propto \ln(T^7/\omega T_{ph}^6)$ при $\Phi_0 \gg 1$; для (opt) $\rho_0/r_B \propto A - \beta \omega_{opt}$, $A = \text{const}$; $T_{ph} \equiv \omega_{ph}/2$. Однако вклад перескоков $S_h^{\text{II}}(\omega)$ определяется скорее парами $R_{12}(\lesssim r)$ и не столь чувствителен к величине R_{12} (коль скоро пары $R_{12} \sim r$ дают «большие» диполи $P_d \sim er$), ибо не содержит резких R -зависимостей типа $\Delta_e(R)$.

3. В итоге можно написать для $S^{\text{II}}(\omega)$ такие оценки. В области ($G_h \equiv \{T > T_{xx}$ или (и) $\omega > \omega_{xx}$ при $\Phi_0 \gg 1\}$

$$S_h^{\text{II}}(\omega) = S_b^{\text{II}}(\omega) \sim e^2 n \omega^2 r_{ef}^5 E_\beta^{-1}(\omega) V_h(\omega, T) \quad \text{при } r \gtrsim r_{ef} (\gg r_B), \quad (3)$$

так что $S_h^{\text{II}}(\omega, T) \propto \omega^2 E_\beta^{-1}(\omega) V_h(\omega, T)$: поведение $S_h^{\text{II}}(\omega, T)$ с изменением ω и T аналогично поведению $\omega^2 \Sigma(\omega, T)$ (см. выше для $\Sigma(\omega, T)$) и характерно для перескоков, включая почти-гауссов пик при $\omega \sim \omega_0 = 4\mathcal{E}$. В области ($G_b \equiv \{\omega < \omega_{xx}$ и $T < T_{xx}$ при $\Phi_0 \gg 1$, или $\omega < \omega_{ph}$ и $T < T_0$ при $\Phi_0 \ll 1\}$

$$S^{\text{II}}(\omega) = S_b^{\text{II}}(\omega) \sim \pi e^2 r_B n \omega \rho_0^4 E_\beta^{-1}(\omega) G(|\omega_{12}| < D_0; \rho_0) \quad \text{при } r \gtrsim \rho_0 (\gg r_B). \quad (4)$$

Отсюда с учетом оценок для $\rho_0(\omega, T)$ и G (для простоты $G \approx G_0$) следуют ω - и T -зависимости для $S^{\text{II}}(\omega, T)$ в (G_b) при $\omega_{\min} < \omega \ll \omega_{\max}$ и $T_{\min} \ll T < T_{\max}$ ^{*}, когда $r \gtrsim \rho_0 \gg r_B$. (При $\Phi_0 \gg 1$ условия $T < T_{\max}$ и $\omega < \omega_{\max}$ обычно несущественны, поскольку $\omega_{xx} < \omega_{\max}$ и $T_{xx} < T_{\max}$ — область таких ω и T , что $r \gtrsim \rho_0 \gg r_B$, актуальна на опыте. При этом в (G_b): 1) $S^{\text{II}}(\omega, T)$ растет с T : при $D \gg T$ $S^{\text{II}}(\omega, T) \propto \rho_0^4 (\beta E_\beta(\omega))^{-1}$, в частности, этот рост слаб (почти логарифмический, слабее чем $\sim T$) при

* Предварительный анализ $S_b^{\text{II}}(\omega)$ при $\rho_0 \gtrsim r$ позволяет полагать, что, вероятно, и в этом случае существенные кластеры центров можно трактовать как совокупность эффективных парных кластеров при $R_{12} \sim r$. Если это так, оценка (4) при $\rho_0 \gtrsim r$ модифицируется лишь с заменой $\pi r_B \rho_0^4 \rightarrow \omega r^5$ ($\rho_0 \rightarrow r$ в G).

$\omega < 2T$ и при рассеянии (особенно 1-фононном) акустическими фононами (*ac*); 2) $S^{\text{II}}(\omega, T)$, вообще говоря (по крайней мере, при $\omega \ll 2T$), растет с ω , $S^{\text{II}}(\omega) \propto \omega^0 \cdot 4E_{\beta}^{-1}(\omega)$ или, приближенно, $S^{\text{II}}(\omega) \propto \omega^s$ при $0 < s \equiv s(\omega, T) < 1$, причем s (логарифмически) убывает с ω/T , но, возможно, и $s \approx 0$ (плато) при $\omega \gtrsim 2T$ (и даже убывание с ω , $s < 0$ при $\omega \gtrsim \omega_1 > 2T$ и $\Phi_0 \ll 1$, причем $\omega_1 \gg \tau_D^{-1}$, но, видимо, $\omega_1 < \omega_{ph}$).

В целом, с учетом $S^{\text{I}}(\omega)$ из (2), имеем: 1) при $\Phi_0 \gg 1$ $S(\omega)$ растет с ω вплоть до почти-гауссова пика при $\omega \sim \omega_0$: как ω^s в (G_b) (причем $0 \leq s < 1$ или $s = 2$ и (при $(\omega\tau_D) > 1$) $s = 0$ для случаев и частот, когда $S(\omega) = S^{\text{II}}(\omega)$ или $S(\omega) = S^{\text{I}}(\omega)$ соответственно), но сильнее (см. выше и (1, 2)) в области (G_h); 2) при $\Phi_0 \ll 1$ и $\omega < \omega_1$ $S(\omega)$ не убывает с ω и растет как ω^s ($0 \leq s < 1$ или $s = 2$) при $\omega < 2T$. В отличие от $\Sigma(\omega)$, $S(\omega)$ не содержит сильной зависимости $\sim \Delta_{AV}^2(r)$, а в (G_b) также не содержит температурного активационного множителя: $S(\omega) \propto T^\alpha \rightarrow 0$ при $T \rightarrow 0$, $\alpha \sim 1$ (ср. (3, 4)). Качественно график $S(\omega)$ аналогичен рис. 1 в (2) (на рис. 4 в (2) и рис. 2 в (1) при $T < T_{xx}$ может быть как $\sigma \equiv \sigma(0) < \sigma(\omega_0)$, так и $\sigma > \sigma(\omega_0)$ в зависимости от T и других параметров).

Ввиду сходства поведения $S(\omega, T)$ в (G_h) и $\Sigma(\omega, T)$ (точнее, $\omega^2\Sigma(\omega, T)$) поведение $\sigma(\omega, T)$ при $\Phi_0 \gg 1$ также качественно аналогично, независимо от величины $\Sigma(\omega)/S(\omega)$ (≥ 1), хотя в (G_b) при $\omega < 2T$ параметр s может варьировать как отмечено. Фактически $\sigma(\omega) \simeq S(\omega)$ при $\omega > \Delta_{AV}$, по крайней мере, но в (G_b) в действительности и при более низких $\omega > \omega_2$, где $\omega_2 < \{\Delta_{AV}; \tau_D^{-1}\}$, причем $\Sigma(\omega_2) = S(\omega_2)$. При $\omega < \omega_2$ (в (G_b)) или $\omega < \Delta_{AV}$, $\sigma(\omega) \simeq \Sigma(\omega)$ и при $\omega < 2T$ $\sigma(\omega) - \sigma \propto \omega^{s=2}$ (1). При $\Phi_0 \ll 1$ $\sigma(\omega) \simeq S(\omega)$ и $S(\omega)$ определяет поведение $\sigma(\omega)$ при $\omega > \omega_2$.

При $\Phi_0 \ll 1$ и $\omega \ll 2T$ вытекающие из теории формулы $S^{\text{II}}(\omega) = S_D^{\text{II}}(\omega)$ аналогичны (давая обоснование, область применимости) предложенным в (3) для $S_D^{\text{II}}(\omega)$ (на основе дебаевской формулы диэлектрических потерь), но с интерпретацией $S_D^{\text{II}}(\omega)$ как проводимости туннельного (не перескокового) типа в том смысле, что коррелятор $K_{pp}^b(t) \propto \exp(-t/\tau_D)$ при $t \sim \tau_D \gg \beta$, тогда как поведение перескокового коррелятора $K_{pp}^h(t)$ при существенных малых $t \ll \beta$ существенно отличное (1). Такое различие и различие $S_h^{\text{II}}(\omega)$ и $S_b^{\text{II}}(\omega)$ при $\Phi_0 \gg 1$ существенно для корректного вычисления $S(\omega)$ при $\Phi_0 \gg 1$ (и вообще других кинетических коэффициентов при $\omega \neq 0$).

Институт полупроводников
Академии наук СССР
Ленинград

Поступило
20 XII 1969

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ M. I. Klinger, Reports Progr. Phys., **31**, 225 (1968). ² M. I. Klinger, E. V. Blakher, Phys. Stat. Solid., **31**, 515 (1969). ³ M. Pollak, Phys. Rev., **A133**, 564 (1964). ⁴ I. G. Austin, N. F. Mott, Adv. Phys., **18**, № 71, 41 (1969). ⁵ М. И. Клингер, ДАН, **183**, 311 (1968).