

## УНИВЕРСАЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ КРОССОВЕРА МЕЖДУ МОТТОВСКИМ РЕЖИМОМ И РЕЖИМОМ КУЛОНОВСКОЙ ЩЕЛИ В ПРЫЖКОВОЙ ПРОВОДИМОСТИ: ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ КОМПЕНСИРОВАННОГО CdTe

Н. В. Агринская\*, В. И. Козуб†

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук  
194021, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 31 марта 1999 г.

Предлагается простой подход для описания кроссовера между моттовским режимом и режимом кулоновской щели в прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка, основанный на соображениях теории протекания и использующий интерполяционное выражение для плотности состояний. Полученное теоретически уравнение для показателя экспоненты сопротивления ( $\ln R$ ) может быть решено численным образом. Найденная таким образом универсальная функция  $\ln(R(T))$  хорошо описывает экспериментальные кривые для кристаллов CdTe с различной степенью компенсации, однако для образцов близких к переходу металл–диэлектрик необходимо учитывать температурные зависимости предэкспоненциального фактора. Как сам вид полученной функции, так и сравнение ее с экспериментальными результатами показывают, что область кроссовера в действительности очень широка и, как правило, ни в области низких температур, ни в области высоких предельные значения показателя степени, характеризующего закон Мотта или закон Эфроса—Шкловского, не достигаются. С помощью универсальной функции для образцов CdTe с различной степенью компенсации получены значения параметров  $T_0, T_1$ , характеризующих плотность состояний и ширину кулоновской щели, которые сравниваются с теоретическими. Несмотря на учет функции кроссовера, параметры  $T_1$  оказываются почти на порядок ниже рассчитанных теоретически Эфросом—Шкловским.

PACS: 72.20.Dp, 72.80.Ey

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Несмотря на большое число публикаций, относящихся к вопросу о механизмах прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка в легированных полупроводниках, некоторые вопросы все еще не решены. К ним относятся вопросы о характере прыжковой проводимости в режиме кулоновской щели и о роли многочастичных эффектов (коррелированных прыжков) и др.

Исследование соответствующих деталей механизма прыжковой проводимости, очевидно, требует сопоставления экспериментальных данных, в частности, по температурной зависимости сопротивления, с результатами теоретических расчетов в широкой области температур. При этом необходимо отметить следующее обстоятельство (внимание на которое было обращено в последнее время, см., например, [1–3]). Как оказывается, для материалов с типичными параметрами (промежуточной концентрацией

\*E-mail: nina.agrins@pop.ioffe.rssi.ru

†E-mail: ven.kozub@pop.ioffe.rssi.ru

примеси и промежуточной компенсацией) в типичной для экспериментов области температур ( $\sim 0.01$ – $10$  К) обнаруживается кроссовер от проводимости с переменной длиной прыжка (VRH) моттовского типа ( $\rho(T) \propto \exp(T_0/T)^{1/4}$ ) к проводимости по состояниям в кулоновской щели — закон Эфроса—Шкловского ( $\rho(T) \propto \exp(T_1/T)^{1/2}$ ). С одной стороны, характер проводимости в двух указанных режимах различается как по численным параметрам, так, возможно, и в самой физической картине, а с другой стороны, область кроссовера оказывается достаточно широкой, поэтому сопоставление предсказаний теории с экспериментом заметно осложняется. Таким образом, чтобы можно было сравнить экспериментальные значения параметров  $T_0, T_1$  с расчетными:

$$T_0 = \beta_0/g(\varepsilon_f)a^3, \quad T_1 = \beta_1 e^2/\kappa a$$

(где  $\beta_0 = 21$ ,  $\beta_1 = 2.8$  — численные коэффициенты,  $a$  — радиус локализации,  $\kappa$  — диэлектрическая проницаемость), важно правильно описать область кроссовера. Ранее мы, используя упрощенную модель кроссовера (основанную на сшивке эффективных полос энергий, соответствующих проводимости для двух указанных режимов), обратили внимание на возможную роль предэкспоненциальных факторов в выражении для прыжковой проводимости. Последняя, очевидно, особенно важна для образцов близких к переходу металл–диэлектрик, для которых интервал изменения сопротивления не слишком велик [4]. В то же время для образцов далеких от перехода в ряде случаев предэкспоненциальными факторами можно пренебречь.

Первая попытка описать температурное поведение проводимости в области кроссовера с помощью универсального выражения была сделана в работе [2], авторы которой использовали интерполяционное выражение для эффективной полосы энергий, полученное простым суммированием соответствующих выражений для двух режимов. Как было показано в дальнейшем [3], такой подход является не совсем корректным и смазывает особенности кроссовера. Последняя работа предлагает более общий подход к описанию кроссовера, приводящий к достаточно сложному многопараметрическому интегральному уравнению, не допускающему аналитической обработки и нуждающемуся в достаточно труднительном численном анализе. Отметим также работу [5], в которой для описания кроссовера в двумерной ситуации была предложена процедура, основанная на оптимизации показателя экспоненты в выражении для прыжкового сопротивления, с использованием интерполяционного выражения для плотности состояний. Хотя данный подход приводит к сравнительно простым аналитическим выражениям, он является менее строгим, чем анализ протекательной задачи. Как показано в работе [3], он приводит к заметному завышению ширины области кроссовера.

Поэтому в настоящей работе предлагается более простой подход для описания кроссовера, основанный (как и подход [3]) на соображениях теории протекания, аналогичных использованным Эфросом и Шкловским [6], однако обеспечивающий более простой анализ условия связности. Полученное теоретически уравнение применяется для определения температурных зависимостей в области кроссовера, которые сравниваются с экспериментальными для кристаллов CdTe с различной степенью компенсации.

## 2. ТЕОРИЯ

Выразим безразмерную концентрацию узлов, удовлетворяющих условию связности при показателе прыжковой экспоненты, меньшем чем некоторое  $\xi$ , как

$$n(\xi) = 2 \int_0^{\varepsilon_{max}} r_{max}^3 g(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (1)$$

Здесь  $\varepsilon_{max}$ ,  $r_{max}$  — максимальные значения энергии и межузельного расстояния, допускающие связность,  $g(\varepsilon)$  — плотность состояний. Приравнявая соответствующее значение к критической концентрации для порога протекания  $n_c$  (для трехмерной ситуации соответствующее значение равно  $\sim 5.3$ ), мы получаем уравнение для критического значения  $\xi$ , определяющего сопротивление.

Заметим, что безразмерная концентрация определена как произведение концентрации узлов с  $\varepsilon < \varepsilon_{max}$  на объем, доступный для этих узлов. Соответственно, для плотности состояний использовано известное интерполяционное выражение (см., например, [3])

$$g = g_0 \frac{(\varepsilon/\varepsilon_0)^2}{1 + (\varepsilon/\varepsilon_0)^2}, \quad (2)$$

где  $g_0$  — плотность состояний в отсутствие кулоновской щели,

$$\varepsilon_0 \simeq 3^{-1/2} \left( \frac{e^6 g_0}{\kappa} \right)^{1/2}. \quad (3)$$

Заметим, что данная процедура (использованная Эфросом и Шкловским [6] применительно к режиму Мотта) для плотности состояний, зависящей от энергии, не совсем строга, и условие связности необходимо рассматривать для каждого значения энергии по отдельности, что приводит к интегральному уравнению [3]. Мы, однако, применяем упрощенную процедуру, позволяющую существенно упростить выкладки. Отметим, что коэффициент  $3^{-1/2}$  в выражении для  $\varepsilon_0$  связан с этой конкретной процедурой и обеспечивает правильную асимптотику в пределе низких температур. Непосредственное вычисление интеграла в правой части дает

$$2 (\varepsilon_{max} - \varepsilon_0 \operatorname{arctg}(\varepsilon_{max}/\varepsilon_0)) r_{max}^3. \quad (4)$$

Учитывая, что  $r_{max} = (a\xi/2)^3$ ,  $\varepsilon_{max} = T\xi$ , где  $\xi$  — критическое значение показателя экспоненты в температурной зависимости прыжкового сопротивления  $\ln R(T) = A\xi(T)$ ,  $A$  — коэффициент,  $a$  — радиус локализации, окончательно получаем следующее уравнение для определения величины  $\xi$ :

$$\left( T\xi - \varepsilon_0 \operatorname{arctg} \left( \frac{\xi T}{\varepsilon_0} \right) \right) (a\xi)^3 \simeq 21. \quad (5)$$

Выражая параметры  $a$  и  $g_0$  через характерные температуры  $T_0$  и  $T_1$  для законов Мотта и Эфроса—Шкловского, получаем

$$\left( T\xi - 0.6 \frac{T_1^{3/2}}{T_0^{1/2}} \operatorname{arctg} \left( \frac{\xi T T_0^{1/2}}{0.6 T_1^{3/2}} \right) \right) \xi^3 = T_0. \quad (6)$$

Для сравнения мы обобщили результаты расчета [5], также использующего интерполяционное выражение для плотности состояний, но основанного на оптимизации

показателя экспоненты в выражении для элементарного прыжкового сопротивления, на трехмерный случай. Данный подход приводит к несколько иному уравнению для критического значения  $\xi$ , определяющего величину прыжкового сопротивления:

$$\left( T\xi - \frac{1}{9} \frac{T_1^{3/2}}{T_0^{1/2}} \operatorname{arctg} \left( \frac{\xi T T_0^{1/2}}{(1/9) T_1^{3/2}} \right) \right) \left( \frac{\xi^2 + (T T_0^{1/2} / (1/9) T_1^{3/2})^{-2}}{\xi^2} \right)^{3/4} = (T^3 T_0)^{1/4}. \quad (7)$$

### 3. ЭКСПЕРИМЕНТ

Были исследованы кристаллы CdTe, легированные мелкими донорами. В двух исследованных образцах концентрация доноров была примерно одинаковой,  $N_d \geq 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , а степень компенсации собственными дефектами решетки была различной,  $\geq 0.4$ ,  $\geq 0.6$ , концентрация электронов при 300 К составляла соответственно  $1.2 \cdot 10^{17}$  и  $8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$  (точные значения  $N_d$  и степени компенсации в данном случае определить невозможно из-за отсутствия температурной зависимости постоянной Холла). Образец 3 был легирован слабее, и для него по температурным зависимостям постоянной Холла удалось определить отдельно общую концентрацию доноров  $N_d = 1.1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , акцепторов,  $N_a = 8.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ , заполненных доноров  $(N_d - N_a) = n_{300 \text{ К}} = 2.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$  и степень компенсации  $\mathcal{K} = 0.77$ . Все образцы находились на диэлектрической стороне связанного с компенсацией перехода металл-диэлектрик.

На рис. 1, 2 представлены температурные зависимости сопротивления  $R(T)$  для трех образцов вместе с кривыми, полученными с помощью решения уравнения (6), имеющего вид  $\xi = A \ln R$  при оптимально подобранных значениях параметров  $T_0$  и  $T_1$ . (Вследствие высоких значений сопротивления при низких температурах для образца

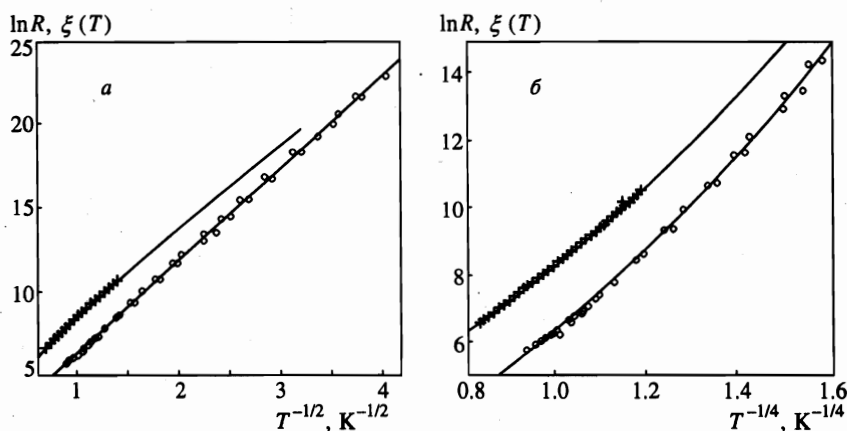


Рис. 1. Экспериментальные температурные зависимости сопротивления для образцов 1 (+) и 2 (o); кривые рассчитаны с помощью решения уравнения (6) функции  $\xi(T)$  с параметрами  $T_0 = 6500 \text{ К}$ ,  $T_1 = 33 \text{ К}$  для образца 1 и  $T_0 = 5900 \text{ К}$ ,  $T_1 = 36 \text{ К}$  для образца 2

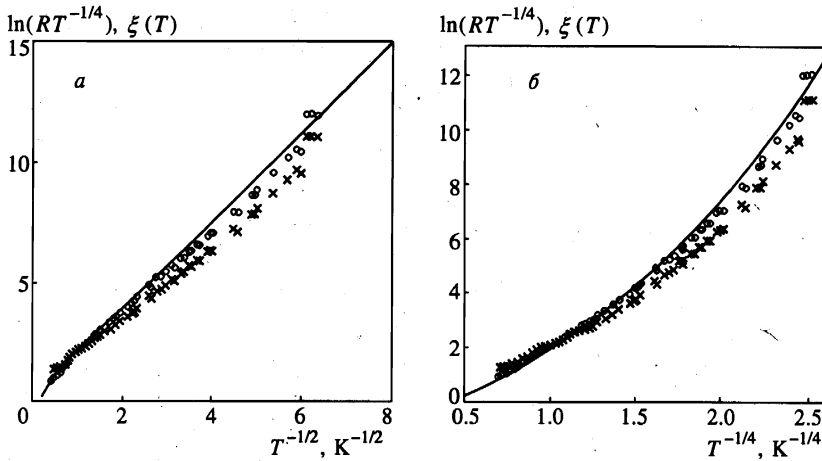


Рис. 2. Экспериментальные температурные зависимости сопротивления для образца 3;  $\times$  соответствуют  $\ln(R(T))$ ,  $\circ$  соответствуют  $\ln(R(T)T^{-1/4})$ ; кривые рассчитаны с помощью решения уравнения (6) функции  $\xi(T)$  с параметрами  $T_0 = 110$  К и  $T_1 = 3.8$  К

1 зависимость  $R(T)$  удалось проследить лишь до 0.5 К.) Видно, что для двух наиболее высокоомных образцов экспериментальные кривые хорошо описываются функцией  $\xi(T)$ , которая является решением уравнения (6) с оптимально подобранными значениями параметров  $T_0$  и  $T_1$ , при этом в высокотемпературном и низкотемпературном пределах становятся справедливыми законы Мотта и Эфроса—Шкловского. Значения параметров можно найти в таблице. Для образца 3 наблюдаются расхождения экспериментальной и теоретической кривых в области высоких и низких температур. С нашей точки зрения, этот факт объясняется тем, что мы в расчетах пренебрегли температурной зависимостью предэкспоненциальных факторов в выражении для  $R(T)$ . Соответствующий фактор оказывается важен для наиболее близких к переходу образцов, для которых интервал изменения сопротивления не слишком велик [4]. На рис. 2 зависимость  $R(T)$  для образца 3 построена в масштабе, учитывающем температурную зависимость предэкспоненциального фактора в законе Мотта  $\ln(RT^{-1/4})$  от  $T^{-1/4}$ . Согласие в области высоких и низких температур заметно улучшилось. Полученные таким образом значения  $T_0$  и  $T_1$  приведены в таблице.

Таблица

$N$	$n_{300 \text{ К}}, \text{ см}^{-3}$	$N_d, \text{ см}^{-3}$	$\mathcal{K}$	$T_0, \text{ К}$	$T_1, \text{ К}$
1	$2.5 \cdot 10^{16}$	$1.1 \cdot 10^{17}$	0.77	6500	33
2	$8 \cdot 10^{16}$	$\geq 2 \cdot 10^{17}$	$\geq 0.6$	5900	36
3	$1.2 \cdot 10^{17}$	$\geq 2 \cdot 10^{17}$	$\geq 0.4$	110	3.8

*Примечание.*  $n_{300 \text{ К}}$  — концентрация электронов при 300 К, полученная в результате холловских измерений,  $N_d$  — концентрация доноров,  $\mathcal{K}$  — степень компенсации,  $T_0, T_1$  — параметры, полученные по температурным зависимостям сопротивления с помощью уравнения (6).

Отметим, что в области действия закона Эфроса—Шкловского наблюдается убывание отрицательного магнитосопротивления, этот факт может также служить признаком изменения характера прыжковой проводимости ( в нашем случае перехода к закону Эфроса—Шкловского). Механизмы, приводящие к такому поведению, обсуждались нами ранее в работах [7, 8].

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Картина температурной зависимости проводимости легированных полупроводников в области прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка (0.01–10 К) часто оказывается достаточно сложной и не подчиняется в деталях известным законам Мотта и Эфроса—Шкловского; при этом особо отметим количественные расхождения, наблюдаемые, как правило, для параметров  $T_0, T_1$ , по сравнению с теоретическими оценками Мотта и Эфроса—Шкловского. Проблема, в частности, заключается в том, что обычно используемая область температур оказывается переходной от закона Мотта к закону Эфроса—Шкловского. Поскольку в области высоких температур есть конкуренция с активационной температурной зависимостью для проводимости по ближайшим соседям, область высоких температур для VRH-проводимости достаточно мала, чтобы наблюдать чистый закон Мотта, а область низких температур (обычно до 0.01 К) недостаточно велика, чтобы наблюдать чистый закон Эфроса—Шкловского (невозможность уйти в область сверхнизких температур часто связана с большим сопротивлением образца и эффектами нагрева). В силу сказанного оказывается важным вывод универсального выражения для описания области перехода. Как уже отмечалось, такие попытки были сделаны, однако они отличались неадекватным описанием эксперимента или громоздкостью полученных выражений. Предложенный выше подход приводит к достаточно простому аналитическому уравнению, решение которого  $\ln R(T) = A\xi(T)$ , как видно из рис. 1, 2, хорошо описывает экспериментальные данные.

Для того чтобы понять, насколько быстро происходит переход к соответствующим степенным законам при уменьшении или увеличении температуры по отношению к области кроссовера, обычно (см., например, [9]) пользуются графиком  $d\xi/(d \lg T)$ , в котором выход на соответствующую степенную асимптотику соответствует спрямлению графика с угловым коэффициентом равным показателю степенного закона. Отметим, однако, что определение как степени спрямления, так и соответствующего углового коэффициента чисто графически связано с некоторыми трудностями. Поэтому мы предлагаем несколько иную процедуру, позволяющую чисто количественно выявить характер выхода на асимптотики. Для этого мы используем выражение

$$p(\lg T) = \frac{d \lg \xi}{d \lg T} = \frac{T}{\xi} \frac{d\xi}{dT}$$

Как легко видеть, для чисто степенной функции  $\xi(T)$  это выражение равно показателю степени соответствующей зависимости и, таким образом, асимптотическое поведение определяется стремлением зависимости  $p(\lg T)$  к соответствующей константе. На рис. 3 построены функции  $p(\lg T)$  для  $\xi(T)$ , определенных в соответствии с уравнениями (6) и (7). Видно, что предлагаемая нами процедура, приводящая к (6), обеспечивает сравнительно быстрый выход на асимптотики, тогда как процедура (7) не только существенно завышает ширину области кроссовера, но и способна привести к ошибочной

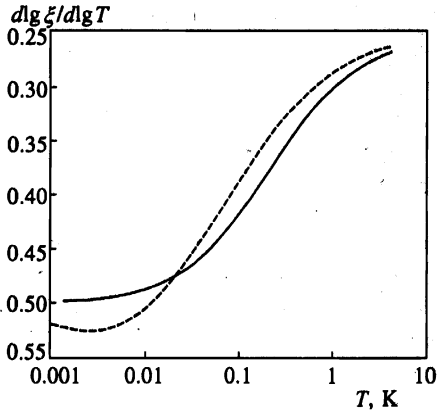


Рис. 3

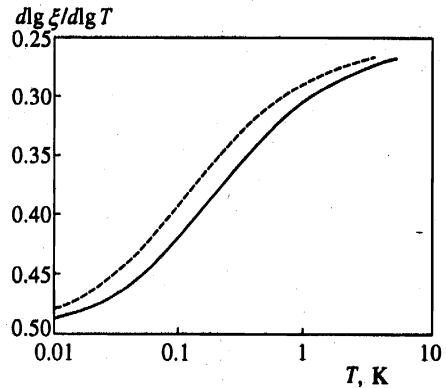


Рис. 4

Рис. 3. Асимптотика поведения функций  $\xi(T)$ , рассчитанных с помощью решения уравнения (6) — сплошная кривая и (7) — штриховая. Параметры  $T_0 = 5900$  К,  $T_1 = 36$  К

Рис. 4. Асимптотика поведения функций  $\xi(T)$ , рассчитанных с помощью решения уравнения (6) для образца 2 с параметрами  $T_0 = 5900$  К,  $T_1 = 36$  К (сплошная кривая) и образца 3 с параметрами  $T_0 = 110$  К,  $T_1 = 3.8$  К (штриховая кривая)

идентификации кроссовера. Действительно, как видно на рис. 3, значение показателя  $p$  в промежуточной области даже превышает  $1/2$  и приближается к асимптотическому значению лишь при очень низких температурах. Таким образом, использование стандартной процедуры выявления асимптотического поведения по оценке наклона графика логарифмической производной может при этом приводить к занижению ширины области кроссовера (поскольку значение  $p = 1/2$  достигается не только в реальной асимптотической области, но и в силу немонотонного поведения  $p(\lg T)$  в области кроссовера)

На рис. 4 мы привели кривые  $p(\lg T)$ , построенные для функций  $\xi(T)$ , определенных исходя из экспериментальных кривых для образцов 2 и 3. Видно, что область кроссовера оказывается достаточно широкой (изменение температуры на три порядка), однако по краям этой области функция асимптотически приближается к показателям степени, характерным для законов Мотта и Эфроса—Шкловского (0.25 и 0.5). Температура, характеризующая кроссовер,  $T_c$ , сдвинута (например, при  $p = 0.375$ ) для образца 3 в область низких температур,  $T_c = 0.1$  К, по сравнению с соответствующей температурой для образца 2,  $T_c = 0.2$  К. Кроме того, эти значения хорошо согласуются с рассчитанными с помощью выражения  $T_c = T_1^2/T_0$ , что также демонстрирует справедливость описания кроссовера исходя из решения уравнения (6).

Сопоставим полученные значения  $T_0$  и  $T_1$  с теоретическими для наиболее компенсированных образцов 1 и 2, которые расположены достаточно далеко от перехода диэлектрик–металл (в связи с этим можно пренебречь расходимостью  $\kappa$  и  $a$ ). Параметр  $T_0$  можно вычислить, зная концентрацию доноров и ширину примесной зоны и предполагая радиус локализации равным радиусу изолированного донора,  $a_0 = 50$  Å. Наиболее точно эти параметры известны для образца 1:  $N_d = 1.1 \cdot 10^{17}$  см $^{-3}$ , ширина примесной зоны  $\epsilon_3 = 0.002$  эВ. Таким образом, принимая  $g(\epsilon_f) = N_d/\epsilon_3$ , для этого

случая получаем расчетное значение  $T_{0cal} = \beta_0/g(\epsilon_f)a^3 = 10000$  К, что немного выше полученного по результатам анализа кроссовера значения  $T_0 = 6500$  К. (Указанное расхождение можно объяснить поправками к радиусу локализации, связанными с рассеянием на нейтральных и заряженных примесях [10]; максимальное значение поправки  $\sim a_0$ , в этом случае максимальное отношение  $T_{0cal}/T_0 \sim 8$ ). Таким образом, можно сделать вывод, что одночастичная плотность состояний хорошо описывает моттовский режим проводимости.

Параметр  $T_1$  вычисляем, предполагая  $\kappa = 11$ , для изолирующего предела он должен быть равен 1000 К. Максимальное значение  $T_1$ , полученное по температурным данным для образцов 1 и 2, находящихся далеко на диэлектрической стороне перехода металл-диэлектрик, составляет 30–40, т. е. в 25 раз меньше теоретического значения. (Поправки к радиусу локализации могут объяснить лишь расхождение в 2 раза.)

Последнее обстоятельство согласуется с выводами ряда предшествовавших работ для легированных полупроводников с промежуточной степенью компенсации [11, 12] и свидетельствует о роли многочастичных коррелированных прыжков [13] либо последовательных ассистирующих прыжков [14] в проводимости по состояниям кулоновской щели. Отметим, что роль кулоновских корреляций должна быть наиболее существенна в режиме кулоновской щели, где именно кулоновские взаимодействия определяют характерный масштаб энергий.

Авторы признательны Р. В. Парфеньеву за консультации по поводу низкотемпературных измерений и А. Н. Черняеву за помощь в проведении измерений. Данная работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 97-02-18280).

## Литература

1. Н. В. Агринская, А. Н. Алешин, ФТТ 31, 277 (1989).
2. A. Aharony, Y. Zhang, and M. P. Sarachik, Phys. Rev. Lett. 68, 3900 (1992).
3. Y. Meir, Phys. Rev. Lett. 77, 5265 (1996).
4. Н. В. Агринская, В. И. Козуб, ЖЭТФ 106, 848 (1994).
5. Nguen Van Lien, Phys. Lett. A 207, 379 (1995). R. Rosenbaum and Nguen Van Lien, J. Phys. C 9, 6247 (1997).
6. A. L. Efros and B. I. Shklovskii, *Electronic properties of doped semiconductors*, Elsevier (1985).
7. Н. В. Агринская, В. И. Козуб, Д. В. Шампур, ЖЭТФ 107, 2063 (1995).
8. Н. В. Агринская, В. И. Козуб, Р. Ренч, П. Фозони, М. Д. Ли, ЖЭТФ 111, 1477 (1997).
9. А. Г. Забродский, К. Н. Зиновьева, ЖЭТФ 86, 727 (1984).
10. B. I. Shklovskii and B. Z. Spivak, in: *Hopping transport in solids*, ed. by M. Pollak and B. Shklovskii, Elsevier (1991), p. 271.
11. А. Г. Забродский, А. Г. Андреев, Письма в ЖЭТФ 58, 809 (1993).
12. J. G. Massey and M. Lea, Phys. Rev. Lett. 75, 4266 (1995).
13. M. Pollak and M. Ortuno, in *Electron-electron interactions in disordered systems*, ed. by A. L. Efros and M. Pollak, Amsterdam (1985).
14. Н. В. Агринская, В. И. Козуб, ФТП 32, 703 (1998).