

АНОМАЛИИ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ КВАЗИОДНОМЕРНОГО КРИСТАЛЛА ЗА СЧЕТ ИНТЕРФЕРЕНЦИИ ДВУХ МЕХАНИЗМОВ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

В.Г.Дущак, А.И.Касьян

Рассматривается модель квазиодномерного кристалла, в котором для определенных состояний носителей заряда два механизма электрон-фононного взаимодействия ослабляют друг друга, в результате чего система обладает аномально большой проводимостью с аномальной температурной зависимостью.

В данной работе мы рассматриваем вычисление электропроводности квазиодномерного молекулярного кристалла при одновременном учете двух главных механизмов взаимодействия электронов с колебаниями решетки, обусловленных флуктуациями из-за межмолекулярных колебаний как резонансных интегралов, так и энергии поляризации молекул, окружающих электрон проводимости. Ограничимся температурами, превышающими максимальную температуру T_K фазового перехода [1]. Как известно, выше T_K существует некоторый температурный интервал (достаточно широкий при слабом зацеплении между одномерными нитями), в котором для описания ряда свойств квазиодномерной системы можно рассматривать нити как несвязанные. Тогда мы приходим к одномерной модели кристалла. Кроме того, будем считать, что концентрация примеси достаточно мала, так что $\tau_{ph} \ll \tau_i$ (τ_i и τ_{ph} – времена рассеяния электрона на примесях и на фонах), и проводимость σ еще можно найти из кинетического уравнения [2].

Используя зонную схему в приближении сильной связи и ближайших соседей представим матричный элемент электрон-фононного взаимодей-

ствия $A(k, q)$ в виде:

$$A(k, q) = 2i\omega' (2NM\omega_q)^{-1/2} [\gamma \sin qa + \sin ka - \sin(k-q, a)]. \quad (1)$$

Здесь $\gamma = 2e^2\alpha_0/a^5w'$; e — заряд электрона, a — постоянная решетки; α_0 и M — средняя поляризуемость и масса молекулы; N — число молекул в основной области кристалла; w и w' — соответственно резонансный интеграл между ближайшими соседями и производная от него по межмолекулярному расстоянию; k и q — одномерные квазиимпульсы электрона и фонона с энергиями $\epsilon(k) = -2w \cos ka$ и $\omega_q = 2v_s a^{-1} |\sin qa/2|$; v_s — скорость звука.

Аналогичный гамильтониан, записанный в узельном представлении, был использован в [3] при расчете подвижности носителей в антрацене. Если параметр $\gamma \gg 1$, тогда в гамильтониане преобладает первый механизм электрон-фононного взаимодействия, связанный с флуктуациями энергии поляризации. Аналогичная ситуация реализуется, например, в случае поляронов малого радиуса. Если $\gamma \ll 1$, тогда преобладающим является второй механизм, связанный с флуктуацией резонансных интегралов. Такой случай рассматривался, например, в [4]. Мы рассмотрим случай, когда $\gamma \approx 1$. При этом в гамильтониане становятся существенными интерференционные эффекты между двумя вышеуказанными механизмами электрон-фононного взаимодействия. Действительно, ограничимся не очень низкими температурами, чтобы можно было считать процессы рассеяния электронов на фононах упругими. Тогда из закона сохранения энергии следует, что существенны $q = 2k$. При этом, как видно из (1), вероятность рассеяния электрона назад обращается в нуль для значений k , определяемых из соотношения $\cos ka = -\gamma^{-1}$. Это означает, что электронные волны, соответствующие этим состояниям, распространяются без (или почти без) рассеяния. Рассмотрим полупроводник с p -зоной проводимости. Условия для проявления аномалий в температурной зависимости σ в этом случае значительно облегчаются по сравнению с s -зоной, так как компенсация механизмов рассеяния происходит для состояний с малыми k . Для оценки σ применим метод кинетического уравнения. Для невырожденного дырочного газа и не очень низких температур ($k_0 T \gg v_s a^{-1}$) получаем:

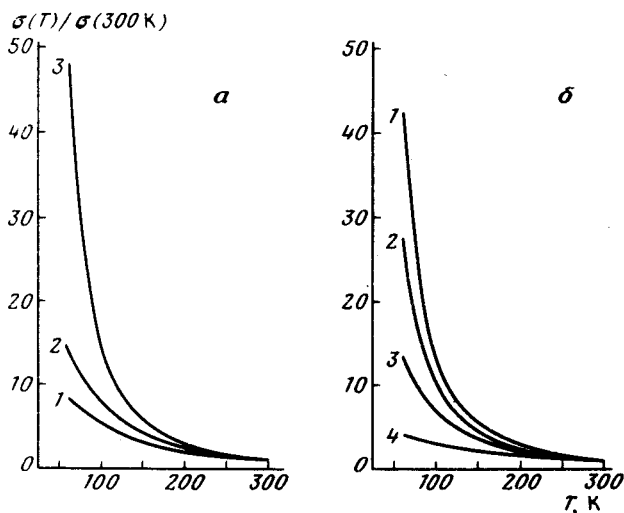
$$\sigma = \frac{e^2 n M v_s w^3}{\pi (k_0 T)^2 \gamma^3 w'^2 I_0(\mu)} \{ (1 - \gamma + \gamma/\mu) \exp(-\mu) - (1 + \gamma + \gamma/\mu) \exp \mu + \\ + \exp(\mu/\gamma) [2 - \mu(\gamma^2 - 1)/\gamma] [Ei(-\mu(1 + \gamma)/\gamma) - Ei(-\mu(1 - \gamma)/\gamma)] \}, \quad (2)$$

где n — концентрация дырок; $Ei(x)$ — интегральная показательная функция; $\mu = 2w/k_0 T$; $I_0(\mu)$ — функция Бесселя мнимого аргумента. В предельном случае широкой зоны проводимости и $\gamma \ll 1$ из (2) вытекает обычная температурная зависимость $\sigma \sim T^{-1/2}$. В общем случае зависимость σ от T является более сложной и существенно изменяется при $\gamma \rightarrow 1$

(см. рисунок). При $(\mu(1-\gamma)/\gamma) \ll 1$ из (2) следует

$$\sigma \cong \frac{4e^2 n v_s^2 M w^{7/2}}{\sqrt{\pi} w'^2 \gamma^2 (k_0 T)^{5/2}} \left[\ln \frac{\gamma k_0 T}{2 w (1-\gamma)} - C - 1 \right], \quad (C = 0,577\dots). \quad (3)$$

Мы видим, во-первых, что в таких веществах можно ожидать аномально большие проводимости при $\gamma \rightarrow 1$. Во-вторых, изменяется температурная зависимость σ , которая теперь близка к $T^{-5/2}$.



Температурная зависимость электропроводности, рассчитанная по формуле (2) и приведенная к ее значению при комнатной температуре: *a* — $w = 0,013$ эВ, $1 - \gamma = 0,1$; $2 - \gamma = 0,5$; $3 - \gamma = 0,999$; *b* — $1, 2, 3 - \gamma = 0,999$, $1 - w = 0,26$ эВ, $2 - w = 2,6$ эВ, $4 - \gamma = 0,5$, $w = 0,065$ эВ

Будем далее считать, что γ изменяется с температурой только за счет изменения постоянной решетки a в результате эффекта теплового расширения кристалла. В общем это изменение, связанное с ангармоничностью колебаний решетки, мало, и мы его учтем только в выражении $(1-\gamma)$ под знаком логарифма в (3), так как за его счет можно достичь $\gamma \rightarrow 1$. Имеем:

$$\gamma = \gamma_0 (1 - 5\beta T), \quad (4)$$

где γ_0 — значение γ при абсолютном нуле температуры; β — коэффициент линейного расширения.

Пусть значение γ при комнатной (или более высокой) температуре T_0 близко к единице, но меньше единицы. С понижением T величина γ растет в соответствии с (4) и при некоторой температуре T' достигает единицы. Тогда из (3) получаем:

$$\sigma \cong \frac{4e^2 n v_s^2 M w^{7/2}}{\sqrt{\pi} w'^3 \gamma^2 (k_0 T)^{5/2}} \left[\ln \frac{k_0 T}{10 \beta w (T - T')} - C - 1 \right], \quad (5)$$

$$T' = (5\beta)^{-1}(1 - \gamma_0^{-1}). \quad (6)$$

Как видно из (5) σ расходится логарифмически при $T \rightarrow T'$.

Если дырочный газ вырожден, для σ получаем:

$$\sigma = \frac{e^2 v_s^2 M \epsilon_F w^2 (4w - \epsilon_F)}{\pi w^2 a (5\beta \gamma_0)^2 (2w - \epsilon_F)^2} \frac{1}{k_0 T (T - T'')^2}, \quad (7)$$

$$T'' = (5\beta)^{-1} [1 - 2w / (\gamma_0 (2w - \epsilon_F))], \quad (8)$$

где ϵ_F — энергия Ферми.

Учет примесей или других несовершенств кристалла приводит к тому, что σ становится конечной и достигает вблизи T' или T'' некоторого максимума, который понижается с ростом концентрации примеси и даже может быть полностью размазан. Следует, однако, отметить, что непосредственно вблизи максимума нарушается условие $\tau_{ph} \ll \tau_i$ и тогда для расчета σ требуется более строгое рассмотрение [2, 5].

Учет слабого зацепления между одномерными нитями также ограничивает резкий рост проводимости, а сильное зацепление может полностью размазать максимум проводимости. Этот вопрос будет рассмотрен отдельно.

Наконец, отметим, что подобные зависимости с резким максимумом проводимости действительно наблюдались (см. [4]). Однако, поскольку нам не известны конкретные значения всех параметров, мы не можем проверить применимость данной модели. Заметим только, что если положить $a \sim 4 \text{ \AA}$, ширину зоны проводимости $\Delta \sim 0,1 \text{ эВ}$, $w \sim 2w \text{ \AA}^{-1}$, тогда γ достигает единицы при $a_0 \sim 1 \text{ \AA}^3$, что вполне реализуемо с точки зрения порядка величины a_0 .

Авторы благодарны Л.В.Келдышу, Ю.В.Копаеву, В.А.Москаленко, Н.М.Плакиде и А.А.Голубу за обсуждение работы и ценные замечания.

Научно-производственное
объединение "Квант"

Поступила в редакцию
23 октября 1979 г.

Литература

- [1] Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский. ЖЭТФ, 67, 397, 1974.
- [2] А.А.Гоголин, В.И.Мельников, Э.И.Рашба. ЖЭТФ, 69, 327, 1975.
- [3] P.Gosar, Sang-il Choi. Phys. Rev., 150, 529, 1966.
- [4] Л.Н.Булаевский. УФН, 115, 263, 1975.
- [5] А.А.Абрикосов, И.А.Рыжкин. ЖЭТФ, 71, 1916, 1976.