

И. П. ЗВЯГИН

## О ПРИМЕНЕНИИ ТЕОРИИ ПЕРКОЛЯЦИИ К ЗАДАЧЕ О ПРЫЖКОВОЙ ПРОВОДИМОСТИ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Перколяционная задача, возникающая при вычислении прыжковой проводимости неупорядоченных полупроводников, рассматривается как задача об отыскании критической плотности «связей» между центрами  $v_c$ . Получены точные границы для критической величины средней плотности связей и проведено ее приближенное вычисление с помощью процедуры, учитывающей зависимость среднего числа связей отдельного центра от его энергии.

Теория перколяции оказалась весьма эффективным средством при расчете статической прыжковой проводимости неупорядоченных полупроводников [1—4]. Сведение задачи о прыжковой проводимости к классу перколяционных задач основано на следующем рассуждении. Пусть  $\gamma_{mn}$  есть вероятность перехода между локальными центрами  $m$  и  $n$ , зависящая от расстояния между ними  $R_{mn}$  и от положения их энергетических уровней относительно уровня Ферми,  $\epsilon_m$  и  $\epsilon_n$ . В условиях, когда для характерных энергий уровней  $\beta \epsilon_{\text{хар}} > 1$  ( $\beta = T^{-1}$ ), названная вероятность дается выражением

$$\gamma_{mn} = \gamma_{mn} \exp(-\eta_{mn}), \quad (1)$$

где

$$\eta_{mn} = 2\alpha R_{mn} + \frac{\beta}{2} (|\delta_m| + |\epsilon_n| + |\epsilon_m - \delta_n|), \quad (2)$$

$\alpha$  — обратный радиус локализации состояний, а  $\gamma_{0,mn}$  зависит от  $R_{mn}$  и от разности энергий состояний по степенному закону. В силу резкой зависимости  $\gamma_{mn}$  от  $\eta_{mn}$  переходы с большими значениями  $\eta_{mn}$  не будут давать заметного вклада в проводимость, коль скоро возможно движение электронов по системе путем перескоков с меньшими  $\eta_{mn}$ . По этой причине проводимость системы характеризуется величиной  $\eta_c$ , определяемой как минимальное значение  $\eta_0$ , при котором все еще существуют бесконечные (проходящие через весь образец) цепочки, связывающие центры с  $\eta_{mn} < \eta_0$ . Оценка критических значений  $\eta_c$  и представляет собой задачу теории перколяции. В силу неупорядоченности системы (случайность координат центров  $R_m$  и их энергий  $\epsilon_m$ ) рассматриваемая задача сложнее стандартных перколяционных задач для регулярных

решеток с заблокированными атомами или связями [1]. Возникает вопрос о взаимоотношении указанных перколяционных задач и о возможности применения результатов для регулярных решеток к неупорядоченным системам.

Как отмечалось в работах [2 и 4], естественным представляется подход, в котором вычисление прыжковой проводимости рассматривается как задача со случайными связями: при заданном  $\eta_0$  два центра считаются связанными, если  $\eta_{mn} < \eta_0$ . Увеличение  $\eta_0$ , очевидно, сопровождается ростом числа связей в системе, и при  $\eta_0 = \eta_c$  в системе появляются бесконечные цепочки связей. Анализ регулярных решеток со случайным образом разорванными связями между ближайшими соседями показал, что среднее число связей на атом в критической точке слабо зависит от типа решетки и для трехмерных решеток близко к 1,5 [1, 2]. Это послужило основанием к тому, чтобы принять критическое число связей равным 1,5 и для неупорядоченных систем [2, 4]. Более того, в работе [4] принималось, что проводимость определялась значением  $\eta_0$ , при котором число связей на центр, усредненное по всему эффективному слою энергий,  $|\varepsilon| < \varepsilon_{\max}$ , достигало критического значения. ( $\varepsilon_{\max} = \beta^{-1} \eta_c$  есть максимальное значение энергии центра, при котором он еще может образовывать связи). Фактически, как будет видно из дальнейшего, в процессе проводимости принимают участие лишь состояния, лежащие в значительно более узком слое энергий вблизи уровня Ферми. Это приводит к модификации критерия, использованного в работе [4] при оценке низкотемпературной прыжковой проводимости. Опираясь на результаты численного расчета [5], мы покажем также, что критическая плотность связей  $\nu_c$  (число связей отдельного центра в момент, когда появляются бесконечные непрерывные цепочки связей) превышает число, полученное для регулярных решеток, и близко к 2,32.

Последнее утверждение есть следствие рассмотрения системы случайно расположенных в пространстве примесных центров. Расчет на ЭВМ [5] показал, что в такой системе бесконечные комплексы центров, каждый из которых отстоит от своих соседей на расстояние, не превышающее  $R_0$ , появляются с конечной вероятностью, когда

$$\frac{4}{3} \pi \left( \frac{R_0}{2} \right)^3 n_D \geq 0,29, \quad (3)$$

где  $n_D$  — концентрация центров. Считая два центра связанными, если расстояние между ними  $R_{mn}$  не превосходит  $R_0$ , нетрудно подсчитать среднее число связей, приходящихся на один центр. Это число равно  $\nu = \frac{4}{3} \pi R_0^3 n_D$ ; таким образом, бесконечные цепочки связей появляются при  $\nu > \nu_c = 2,32$ , как непосредственно следует из неравенства (3).

Рассмотрим вопрос о применении критерия, основанного на плотности связей, к задаче о низкотемпературной прыжковой проводимости в области применимости формулы Мотта [3]. При заданном  $\eta_0$  среднее число связей, приходящееся на один центр с энергией  $\varepsilon$ , равно

$$\nu(\varepsilon) = \int_{\eta(R, \varepsilon, \varepsilon') < \eta_0} d\varepsilon' dR P(R, \varepsilon, \varepsilon'), \quad (4)$$

где  $P(R, \varepsilon, \varepsilon') d\varepsilon' dR$  — вероятность того, что какой-либо центр с энергией в интервале  $(\varepsilon', \varepsilon' + d\varepsilon')$  окажется в шаровом слое толщины  $dR$  на расстоянии  $R$  от данного центра с энергией  $\varepsilon$ . Для случайно расположенных в пространстве центров со случайно распределенными с плотностью  $N(\varepsilon)$  уровнями энергии без учета корреляции имеем

$$P(R, \varepsilon, \varepsilon') = 4\pi R^2 N(\varepsilon'). \quad (5)$$

Особенность рассматриваемой задачи состоит в том, что, как видно из формул (4), (5), среднее число связей, вообще говоря, зависит от энергии центра  $\varepsilon$ . При высоких температурах и узкой зоне (функция  $N(\varepsilon)$  отлична от нуля в интервале энергий, малом по сравнению с  $\beta^{-1}\eta_c$ ) второе слагаемое в правой части (2) мало, и энергетическая зависимость величины  $\eta_{mn}$ , а с нею и плотности связей  $\nu$ , несущественна: этим и обуславливается возможность непосредственного применения результатов расчета [5] к этому случаю [6]. Напротив, при низких температурах (большие  $\beta$ ) зависимость  $\nu$  от  $\varepsilon$  важна. В условиях, когда плотность состояний  $N(\varepsilon)$  мало меняется в эффективном слое энергий, с учетом (5) нетрудно явно вычислить интеграл (4):

$$\begin{aligned} \nu(\varepsilon) &\cong 4\pi N(0) \int d\varepsilon' \int_0^{\infty} dR R^2 \theta \left[ \eta_0 - 2\alpha R - \frac{\beta}{2} (|\varepsilon| + |\varepsilon'| + |\varepsilon - \varepsilon'|) \right] = \\ &= \frac{\pi\beta^3}{12\alpha^3} N(0) (\varepsilon_{\max} - |\varepsilon|)^3 (\varepsilon_{\max} + |\varepsilon|) \theta(\varepsilon_{\max} - |\varepsilon|). \end{aligned} \quad (6)$$

Из выражения (6) видно, что состояния, лежащие вблизи границы эффективного слоя, образуют очень мало связей ( $\nu(\varepsilon) \sim (\varepsilon_{\max} - |\varepsilon|)^3$ ), т. е. практически не принимают участия в проводимости, потому что вероятность того, что электрон пройдет через такое состояние (для чего последнее должно иметь по крайней мере две связи), очень мала. Отсюда ясно, что «работающим» будет слой толщины, меньшей  $2\varepsilon_{\max}$ . Учет этого и позволяет более точно найти критические условия, отвечающие появлению бесконечных цепочек связей.

Введем безразмерный параметр  $\lambda$ , характеризующий плотность связей в системе

$$\begin{aligned} \nu(\varepsilon) &= \frac{\lambda}{2} \left( 1 - \frac{|\varepsilon|}{\varepsilon_{\max}} \right)^3 \left( 1 + \frac{|\varepsilon|}{\varepsilon_{\max}} \right) \theta(\varepsilon_{\max} - |\varepsilon|), \\ \lambda &= \frac{4}{3} \pi N(0) \frac{\eta^4}{\beta(2\alpha)^3}. \end{aligned} \quad (7)$$

Замечая, что функция  $\nu(\varepsilon)$  монотонно убывает с возрастанием  $|\varepsilon|$ , мы можем найти нижний предел для критического значения  $\lambda_c$ , определяющего появление бесконечных цепочек связей. Именно, если ни для каких центров в системе не достигнута критическая плотность связей, то и бесконечных цепочек, очевидно, нет. Таким образом, равенство  $\nu_{\max} = \nu_c$ , где  $\nu_c$  — критическая плотность связей, вычисленная без учета зависимости  $\eta_{mn}$  от энергии, и определяет искомый нижний предел:

$$\lambda_{\min} = 2\nu_c. \quad (8)$$

Для отыскания верхней границы для параметра  $\lambda_c$  рассмотрим величину

$$\nu_\delta(\varepsilon) = 4\pi N(0) \int_{\substack{\eta < \eta_0 \\ |\varepsilon'| < \delta}} d\varepsilon' dR P(R, \varepsilon, \varepsilon'),$$

дающую среднее число связей данного центра с энергией  $\varepsilon$  со всеми центрами, энергии которых лежат в слое  $|\varepsilon| < \delta \leq \delta_{\max}$ . С учетом (5) явное выражение для  $\nu_\delta(\varepsilon)$  имеет вид

$$v_{\delta}(\varepsilon) = \frac{\lambda}{2} \left[ \left(1 - \frac{|\varepsilon|}{\varepsilon_{\max}}\right)^3 \left(1 + \frac{|\varepsilon|}{\varepsilon_{\max}}\right) - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\delta}{\varepsilon_{\max}}\right)^4 - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\delta}{\varepsilon_{\max}} - \frac{|\varepsilon|}{\varepsilon_{\max}}\right)^4 \theta(\varepsilon_{\max} - \delta - |\varepsilon|) \right]. \quad (9)$$

Функция  $v_{\delta}(\varepsilon)$ , как и  $v(\varepsilon)$ , монотонно убывает с ростом  $|\varepsilon|$ , поэтому число связей произвольно взятого центра из слоя  $|\varepsilon| < \delta$  с другими центрами этого же слоя в среднем всегда превышает величину  $v_{\delta}(\delta)$ . Коль скоро это минимальное число связей превысит  $v_c$ , можно с уверенностью сказать, что в системе появятся бесконечные цепочки связей. Это произойдет, когда условие  $v_{\delta}(\delta) = v_c$  будет выполнено для какого-нибудь  $\delta$ . Для того чтобы получить наилучшую оценку  $\lambda_c$  сверху, мы выберем значение  $\delta = \delta_1$ , при котором функция  $v_{\delta}(\delta)$  максимальна. Названная функция обращается в нуль при  $\delta = 0$  и при  $\delta = \varepsilon_{\max}$ , в первом случае потому, что слой имеет нулевую толщину, и нет связей, не выводящих за пределы слоя, во втором случае из-за обращения в нуль числа связей для состояний с  $\varepsilon = \varepsilon_{\max}$ .

С помощью выражения (9) нетрудно найти, что единственный в интервале  $(0, \varepsilon_{\max})$  вещественный корень уравнения  $dv_{\delta}(\delta)/d\delta = 0$  равен  $\delta_1 \approx 0,21 \varepsilon_{\max}$ . Таким образом, в силу условия  $v_{\delta}(\delta_1) = v_c$  верхняя граница для критического значения параметра  $\lambda$  есть

$$\lambda_{\max} = 2v_c [(1 - x_1)^3 (1 + x_1) - 0,5(1 - x_1)^4 - 0,5(1 - 2x_1)^4]^{-1} |_{x_1 = \delta_1/\varepsilon_{\max}} \approx 5,8v_c. \quad (10)$$

Таким образом, из (8) и (10) следует, что критическое значение  $\lambda_c$  должно лежать в интервале

$$2v_c < \lambda_c < 5,8v_c. \quad (11)$$

Если, следуя работе [4], находить величину  $\lambda_c$  с помощью критерия, применяемого к среднему числу связей в слое  $|\varepsilon| < \varepsilon_{\max}$ ,  $\bar{v}$ , мы получим, что  $\bar{v} = (6/40)\lambda$ , т. е.  $\lambda_c \approx 6,67 v_c$ . Отсюда видно, что названная форма критерия заметно переоценивает среднюю плотность связей, при которой появляются бесконечные цепочки.

Более точную интерполяционную оценку для  $\lambda_c$  можно получить, рассматривая число связей на центр, усредненное по слою  $|\varepsilon| < \delta$ :

$$\bar{v}_{\delta} = \frac{1}{\delta} \int_0^{\delta} d\varepsilon v_{\delta}(\varepsilon). \quad (12)$$

Если принять, что бесконечные цепочки связей появляются, когда среднее число их  $\bar{v}_{\delta}$  окажется равным  $v_c$  для какого-нибудь  $\delta$ , то соответствующий критерий примет вид

$$\bar{v}_{\max} \equiv \max \bar{v}_{\delta} = v_c. \quad (13)$$

Максимальная средняя плотность связей достигается при  $\delta = \delta_2$ , где  $\delta_2$  — корень уравнения

$$\frac{d\bar{v}_{\delta}}{d\delta} = 0. \quad (14)$$

Используя выражения (9) и (12), можно найти явный вид уравнения (14), которое представляет собой алгебраическое уравнение пя-

той степени. Его корень в интервале  $(0, \varepsilon_{\max})$  равен  $\delta_2 \approx 0,36 \varepsilon_{\max}$ , и, следовательно,  $\bar{v}_{\max} = \bar{v}_{\delta_2} \approx 0,28 \lambda$ . Отсюда

$$\lambda_c \approx 3,6v_c. \quad (15)$$

Неравенства (11), устанавливающие точные пределы для критической величины параметра  $\lambda$ , могут оказаться полезными при оценке надежности различных приближенных методов вычисления  $\lambda_c$ . Из имеющихся приближений (15) представляется оптимальным, использование его приводит к формуле Мотта для низкотемпературной прыжковой проводимости

$$\sigma \sim \exp [-(T_0/T)^{1/4}],$$

в которой величина  $T_0$  дается выражением

$$T_0 = A \frac{\alpha^3}{\pi N(0)}, \quad (16)$$

где  $A \approx 21,6$ ,  $v_c \approx 50,2$  (при  $v_c \approx 2,32$ ). Заметим, что полученное нами значение константы  $A$  весьма близко к величине  $A=48$ , найденной в работе [3] с применением совершенной иной приближенной процедуры.

В заключение выражаю благодарность проф. В. Л. Бонч-Бруевичу за обсуждение настоящей работы.

Примечание при корректуре.

Согласно результатов последних исследований (Скал А. С., Шкловский Б. И. ФТП, 7, 1973) более надежным представляется значение  $v_c$ , равное  $3 \pm 0,1$ . Это дает  $A=65$  в формуле (16).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Shante V. K. S., Kirkpatrick S. Adv. in Phys., 20, 325, 1971.
2. Ziman J. M. J. Phys. Solid St. Phys., 1, 1532, 1968.
3. Ambegaokar V., Halperin B. I., Langer J. S. Phys. Rev., B 4, 2612, 1971.
4. Jones R., Schaich W. J. Phys. C. Solid St. Phys., 5, 43, 1972.
5. Holcomb D. F., Rehr J. J. Phys. Rev., 183, 774, 1969.
6. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. ЖЭТФ, 60, 867, 1971.

Поступила в редакцию  
20.11 1972 г.

Кафедра  
теоретической физики