УДК 621.315.592

И. П. Звягин

КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В ТЕОРИИ ПРЫЖКОВОГО ПЕРЕНОСА. ОБЩИЕ СООТНОШЕНИЯ

Получено уравнение баланса для электронных переходов с учетом корреляции электронов, попадающих на один и тот же центр, в рамках модели Хаббарда. Указана процедура введения малого градиента температуры в кинетическое уравнение для прыжкового переноса. Показано, что задача о проводимости сводится к отысканию проводимости двух трехмерных разветвленных сеток случайных сопротивлений, которые при определенных условиях могут считаться квазинезависимыми.

Теория прыжковой проводимости по локализованным состояниям строилась в [1] на основе одноэлектронного гамильтониана в пренебрежении эффектами взаимодействия между электронами. Известно, что электрон-электронное взаимодействие, учтенное в приближении Хартри—Фока, приводит лишь к переопределению локальных сдвигов химического потенциала, самих подлежащих определению, и не сказывается на величине проводимости [2]. Однако в ряде случаев эффекты кулоновского взаимодействия носителей могут оказаться существенными [3—8]. Один из таких эффектов состоит в изменении плотности состояний и образовании «мягкой» кулоновской щели на уровне Ферми [4—7], которая может существенно сказаться на явлениях переноса при низких температурах, когда характерное изменение энергии носителей, дающих основной вклад в проводимость, станет сравнимым с шириной щели. Другой аспект связан с возможностью одновременного попадания двух электронов (с противоположными спинами) на один и тот же центр. Возникающее при этом весьма заметное (из-за небольших размеров области локализации) кулоновское отталкивание может оказать существенное влияние на термодинамически равновесные свойства системы [3]. Еще один класс эффектов может быть связан с поляризационными эффектами, которые в некоторых системах (например, в халькогенидных стеклах) могут быть значительными. Учет их показывает [8, 9], что они могут иметь следствием возникновение эффективного притяжения между электронами с противоположными спинами, находящимися на одном и том же узле, т. е. к спариванию при низких температурах.

В настоящей работе исследуется влияние взаимодействия электронов, попадающих на один и тот же центр, на явления прыжкового переноса по локализованным состояниям. С этой целью получено обобщенное уравнение баланса, учитывающее корреляции указанного типа, и обсуждаются некоторые следствия из него.

Постановка задачи

В принятой нами упрощенной постановке задачи электрон-электронное взаимодействие описывается в модели Хаббарда, и полный гамильтониан (без внешнего электрического поля) имеет вид

$$H=\sum_{m\sigma}(\varepsilon_{m\sigma}-\mu)\,a^{+}_{m\sigma}a_{m\sigma}+\sum_{q}\omega_q\left(b^{+}_{q}b_q+\frac{1}{2}\right)+$$
$$+\sum_{mnq\sigma\xi}B^{q}_{mn}\,a^{+}_{n\sigma}a_{m\sigma}\,\beta^{(\xi)}_{q}+\frac{1}{2}K\sum_{m\sigma}n_{m\sigma}n_{m\tilde{\sigma}} \qquad (1)$$

где $\varepsilon_{m\sigma}$ — энергия электрона со спином σ, находящегося на m-м узле, μ — химический потенциал, B^{q}_{mn} — матричный элемент электрон-фононного взаимодействия, $a^{+}_{m\sigma}$, $a_{m\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электронов, $n_{m\sigma}=a^{+}_{m\sigma}a_{m\sigma}$, K — энергия хаббардовского взаимодействия электронов с противоположными спинами, находящимися на одном и том же узле, ω_q — частоты фононов с квантовым числом q, а через $\tilde{\sigma}$ обозначен обращенный спин. Для фононных операторов рождения и уничтожения мы ввели обозначения

$$b^{+}_{-q}=\beta^{(2)}_{q},\quad b_q=\beta^{(1)}_{q},$$

так что индекс ξ в (1) пробегает два значения, $\xi=1$, 2. Спиновый индекс σ также принимает два значения, $\sigma=\uparrow,\downarrow$, причем энергии $\varepsilon_{m\sigma}$ и $\varepsilon_{m\tilde{\sigma}}$ могут различаться, например, в магнитном поле H, когда

$$\varepsilon_{m\uparrow}=\varepsilon_m-\frac{1}{2}\mu_{\text{Б}}H,\quad \varepsilon_{m\downarrow}=\varepsilon_m+\frac{1}{2}\mu_{\text{Б}}H \qquad (2)$$

($\mu_{\text{Б}}$ — магнетон Бора). Мы считаем энергию взаимодействия электронов K, не зависящей от узла; это — предположение того же типа, что и предположение о постоянстве радиуса локализации волновой функции, делаемое обычно в теории прыжковой проводимости. Введение разброса величин K вряд ли существенно отразится на результатах, и ниже мы в основном будем рассматривать K как постоянный параметр теории, причем $K>0$ отвечает ситуации, когда преобладает кулоновское отталкивание электронов, а $K<0$ соответствует эффективному притяжению.

Можно ожидать, что при учете взаимодействия электронов состояние системы будет определяться не только средними числами заполнения состояний, но и тем, каковы соотношения между средними числами пустых, одно- и двукратно заполненных центров. По этой причине вместо средних чисел заполнения m-го узла $f_m=\sum_{\sigma}f_{m\sigma}=\sum_{\sigma}\langle a^{+}_{m\sigma}\,a_{m\sigma}\rangle$ оказывается удобным ввести следующие функции:

$f^{(s)}_{m\sigma}=\langle n_{m\sigma}(1-n_{m\tilde{\sigma}})\rangle$ — вероятность заполнения состояния $m\sigma$ при однократном заполнении m-го узла,

$f^{(d)}_{m}=\langle n_{m\sigma}n_{m\tilde{\sigma}}\rangle$ — вероятность заполнения состояния $m\sigma$ при двукратном заполнении m-го узла,

$f^{(e)}_{m}=\langle(1-n_{m\sigma})(1-n_{m\tilde{\sigma}})\rangle$ — вероятность того, что m-й узел пуст.

Заметим, что введенные функции не независимы,

$$f^{(e)}_{m}=1-f^{(s)}_{m\sigma}-f^{(s)}_{m\tilde{\sigma}}-f^{(d)}_{m},$$
$$f_m=f^{(s)}_{m\sigma}+f^{(s)}_{m\tilde{\sigma}}+2f^{(d)}_{m}. \qquad (3)$$

Соответственно, нужно писать уравнения, вообще говоря, для трех независимых функций $f^{(s)}_{m\sigma}$ (с двумя значениями σ) и $f^{(d)}_{m}$. В частном случае когда энергия не зависит от спина, $f^{(s)}_{m\sigma}=f^{(s)}_{m\tilde{\sigma}}$, и остаются лишь два уравнения.

Уравнения баланса

Запишем уравнения движения для функций $f_{m\sigma}^{(s)}$ и $f_m^{(d)}$, считая, что гамильтониан имеет вид (1):

$$\frac{\partial f_{m\sigma}^{(s)}}{\partial t} = 2Im \sum_{nq\xi} B_{nm}^q (\langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} (1 - n_{m\tilde{\sigma}}) \beta_q^{(\xi)} \rangle - \langle n_{m\sigma} a_{m\tilde{\sigma}}^+ a_{n\tilde{\sigma}} \beta_q^{(\xi)} \rangle), \quad (4)$$

$$\frac{\partial f_m^{(d)}}{\partial t} = 2\, Im \sum_{nq\xi\sigma} B_{nm}^q \langle n_{m\sigma} a_{m\tilde{\sigma}}^+ a_{n\tilde{\sigma}} \beta_q^{(\xi)} \rangle. \quad (5)$$

Уравнения для функций $f_{m\sigma}^{(s)}$, $f_m^{(d)}$ зацепляются за уравнения для $\langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} (1 - n_{m\tilde{\sigma}}) \beta_q^{(\xi)} \rangle$ и $\langle n_{m\sigma} a_{m\tilde{\sigma}}^+ a_{n\tilde{\sigma}} \beta_q^{(\xi)} \rangle$. Для функции $\langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} (1 - n_{m\tilde{\sigma}}) \beta_q^{(\xi)} \rangle$ имеем уравнение

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \varepsilon_{m\sigma} - \varepsilon_{n\sigma} + (-1)^\xi \omega_q\right) \langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} (1 - n_{m\tilde{\sigma}}) \beta_q^{(\xi)} \rangle -$$
$$- K \langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} n_{n\tilde{\sigma}} (1 - n_{m\tilde{\sigma}}) \beta_q^{(\xi)} \rangle =$$
$$= \sum_{klq'\xi'\sigma'} B_{kl}^{q'} (\langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} (1 - n_{m\tilde{\sigma}}) a_{l\sigma'}^+ a_{k\sigma'} \beta_q^{(\xi)} \beta_{q'}^{(\xi')} \rangle -$$
$$- \langle a_{l\sigma'}^+ a_{k\sigma'} a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} (1 - n_{m\tilde{\sigma}}) \beta_{q'}^{(\xi')} \beta_q^{(\xi)} \rangle). \quad (6)$$

Уравнение того же типа получается и для функции $\langle n_{m\sigma} a_{m\tilde{\sigma}}^+ a_{n\tilde{\sigma}} \beta_q^{(\xi)} \rangle$. Наконец, уравнение (6) содержит функцию $\langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} n_{n\tilde{\sigma}} (1 - n_{m\tilde{\sigma}}) \beta_q^{(\xi)} \rangle$, для которой получаем

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \varepsilon_{m\sigma} - \varepsilon_{n\sigma} + (-1)^\xi \omega_q + K\right) \langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} n_{n\tilde{\sigma}} (1 - n_{m\tilde{\sigma}}) \beta_q^{(\xi)} \rangle =$$
$$= \sum_{klq'\xi'\sigma'} B_{kl}^{q'} (\langle a_{l\sigma'}^+ a_{k\sigma'} a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} (1 - n_{m\tilde{\sigma}}) \beta_{q'}^{(\xi')} \beta_q^{(\xi)} \rangle -$$
$$- \langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} n_{n\tilde{\sigma}} (1 - n_{m\tilde{\sigma}}) a_{l\sigma'}^+ a_{k\sigma'} \beta_q^{(\xi)} \beta_{q'}^{(\xi')} \rangle). \quad (7)$$

Функции в правых частях уравнений (6), (7) содержат лишь произведения двух фононных операторов, и можно провести расцепление, аналогичное использованному в [1]. Оно эквивалентно учету лишь однофононных переходов (многофононное обобщение можно провести как в работе [10]) и справедливо в низшем порядке (g^2) по константе взаимодействия электронов с фононами g. Заметим, что проводимое расцепление справедливо при произвольной величине корреляционной энергии K — расцепляются только электронные операторы разных центров, например:

$$\langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} (1 - n_{m\tilde{\sigma}}) a_{n\sigma}^+ a_{m\sigma} \rangle \cong \langle n_{m\sigma} (1 - n_{m\tilde{\sigma}}) \rangle \langle 1 - n_{n\sigma} \rangle =$$
$$= f_{m\sigma}^{(s)} (1 - f_{n\sigma}^{(s)} - f_n^{(d)}).$$

После расцепления уравнения (6) и (7) принимают вид:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \varepsilon_{m\sigma} - \varepsilon_{n\sigma} + (-1)^\xi \omega_q\right) \langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} (1 - n_{m\tilde{\sigma}}) \beta_q^{(\xi)} \rangle -$$
$$- K \langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} n_{n\tilde{\sigma}} (1 - n_{m\tilde{\sigma}}) \beta_q^{(\xi)} \rangle =$$
$$= B_{mn}^q f_{m\sigma}^{(s)} (1 - f_{n\tilde{\sigma}}^{(s)} - f_n^{(d)}) \varphi_q^{(\xi)} - B_{mn}^q (f_{n\sigma}^{(s)} + f_n^{(d)}) f_m^{(e)} \varphi_q^{(3-\xi)} \quad (8)$$

и

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}+\varepsilon_{m\sigma}-\varepsilon_{n\sigma}+(-1)^{\xi}\omega_q+K\right)\langle a^{+}_{m\sigma}a_{n\sigma}n_{n\tilde{\sigma}}(1-n_{m\tilde{\sigma}})\beta^{(\xi)}_q\rangle=$$

$$=B^{q}_{mn}f^{(s)}_{m\sigma}f^{(s)}_{n\tilde{\sigma}}\varphi^{(\xi)}_q-B^{q}_{mn}f^{(d)}_{n}f^{(e)}_{m}\varphi^{(3-\xi)}_q, \tag{9}$$

где

$$\langle\beta^{(\xi)}_q\beta^{(\xi')}_{q'}\rangle=\varphi^{(\xi)}_q\delta_{qq'}(1-\delta_{\xi\xi'}),\quad \varphi^{(\xi)}_q=N_q+\frac{1-(-1)^{\xi}}{2},$$

$$N_q=\langle b^{+}_q b_q\rangle_0. \tag{10}$$

Уравнения (4), (5), (8), (9) вместе с невыписанными здесь расцепленными по тому же рецепту уравнениями для функций $\langle n_{m\sigma}a^{+}_{m\sigma}a_{n\tilde{\sigma}}\beta^{(\xi)}_q\rangle$ образуют замкнутую систему. Уравнения (8), (9) нетрудно проинтегрировать по времени; в условиях, когда характерное время изменения функций f велико по сравнению с обратными характерными разностями энергий локализованных состояний, можно использовать «марковское приближение» [1], приводящее к независимости вероятностей переходов от времени. В этом приближении, находя решение уравнения (8) и подставляя его в (4), получаем

$$\frac{\partial f^{(s)}_{m\sigma}}{\partial t}=-\sum_{n}\{W^{(00)}_{mn}f^{(s)}_{m\sigma}f^{(e)}_{n}-W^{(00)}_{nm}f^{(s)}_{n\sigma}f^{(e)}_{m}+$$

$$+W^{(01)}_{mn}f^{(s)}_{m\sigma}f^{(s)}_{n\tilde{\sigma}}-W^{(10)}_{nm}f^{(d)}_{n}f^{(e)}_{m}-W^{(10)}_{mn}f^{(d)}_{m}f^{(e)}_{n}+W^{(01)}_{nm}f^{(s)}_{n\tilde{\sigma}}f^{(s)}_{m\sigma}-$$

$$-W^{(11)}_{mn}f^{(d)}_{m}f^{(s)}_{n\tilde{\sigma}}+W^{(11)}_{nm}f^{(d)}_{n}f^{(s)}_{m\sigma}\}. \tag{11}$$

Аналогично получаем

$$\frac{\partial f^{(d)}_{m}}{\partial t}=-\sum_{n\sigma}\{W^{(10)}_{mn}f^{(d)}_{m}f^{(e)}_{n}-W^{(01)}_{nm}f^{(s)}_{n\sigma}f^{(s)}_{m\tilde{\sigma}}+W^{(11)}_{mn}f^{(d)}_{m}f^{(s)}_{n\tilde{\sigma}}-W^{(11)}_{nm}f^{(d)}_{n}f^{(s)}_{m\tilde{\sigma}}\}. \tag{12}$$

Здесь вероятности однофононных переходов определяются выражениями

$$W^{(\alpha\beta)}_{mn}=2\pi\sum_{q\xi}|B^{q}_{mn}|^2\varphi^{(\xi)}_q\delta\{\varepsilon_m-\varepsilon_n+(\alpha-\beta)K+(-1)^{\xi}\omega_q\} \tag{13}$$

(α, $\beta=0$, 1). Обозначения выбраны так, что $W^{(10)}_{mn}$ отвечает вероятности перехода электрона со спином σ из состояния $m\sigma$ в состояние $n\sigma$ (без переброса спина), причем состояние $m\tilde{\sigma}$ заполнено ($\alpha=1$), а состояние $n\tilde{\sigma}$ пусто ($\beta=0$). Иначе говоря, речь идет о переходе с двукратно заполненного центра на пустой, при котором, согласно (13), изменение энергии электронной системы есть $\varepsilon_n-\varepsilon_m-K$. Последние четыре члена в уравнении (11) отвечают уменьшению функции однократного заполнения центра за счет прихода электронов и образовании пар и ее увеличению за счет распада пар. В равновесии имеет место принцип детального баланса — каждый из членов сумм в правых частях уравнений (11) и (12) обращается в нуль при подстановке функций

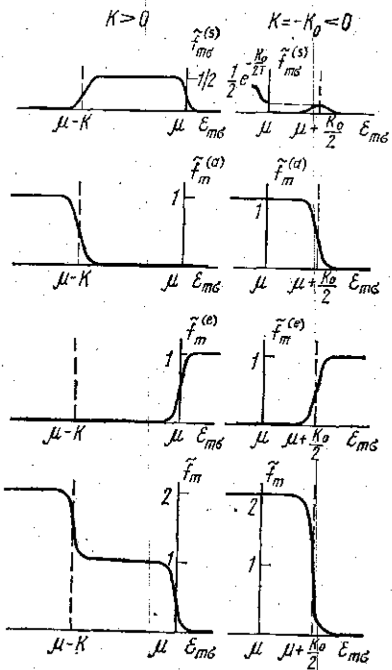
$$\tilde{f}^{(s)}_{m\sigma}=z^{-1}_m\exp\left(-\frac{\varepsilon_{m\sigma}-\mu}{T}\right),\quad \tilde{f}^{(d)}_{m}=z^{-1}_m\exp\left(-\frac{\varepsilon_{m\sigma}+\varepsilon_{m\tilde{\sigma}}-2\mu+K}{T}\right), \tag{14}$$

где

$$z_m = 1 + \exp\left(-\frac{\varepsilon_{m\sigma} - \mu}{T}\right) + \exp\left(-\frac{\varepsilon_{m\tilde\sigma} - \mu}{T}\right) + \exp\left(\frac{\varepsilon_{m\sigma} + \varepsilon_{m\tilde\sigma} - 2\mu + K}{T}\right).$$

Функции $\tilde f^{(s)}_{m\sigma}$, $\tilde f^{(d)}_m$, $\tilde f^{(e)}_m$ и $\tilde f_m$ изображены на рисунке для случаев $K > 0$ и $K = K_0 < 0$ при низких температурах.

В случае притяжения почти все электроны спарены, и все процессы, содержащиеся в уравнениях (11) и (12), маловероятны из-за малого числа неспаренных электронов, поскольку все эти процессы идут через состояния, содержащие неспаренные электроны. Прямых перескоков пар в полученных уравнениях не содержится—они «убиты» расцеплением и появляются только в следующих порядках теории возмущений, будучи пропорциональными g^4. Такие процессы прямых перескоков пар могут тем не менее оказаться конкурентоспособными при низких температурах; они рассмотрены отдельно в [11].



Статическая проводимость

Полученные уравнения баланса описывают релаксацию системы к состоянию равновесия в отсутствие внешнего электрического поля. При наложении поля, коль скоро оно слабое, нетрудно вычислить линейный отклик системы, если вспомнить, что в рассматриваемом приближении действие поля сводится просто к смещению локальных уровней, $\varepsilon_{m\sigma} \to \varepsilon_{m\sigma} + V_m$, где V_m есть значение потенциала действующего поля в узле m. От уравнений (11), (12) можно перейти к линеаризованным уравнениям, проводя разложение по V_m. Будем использовать для обозначения равновесных функций тильду, а для обозначения добавок к ним $\delta f^{(s)}_{m\sigma}$, $\delta f^{(d)}_m$ и т. д.

Для первых двух членов в правой части (11) имеем:

$$[W^{(00)}_{mn} f^{(s)}_{m\sigma} f^{(e)}_n - W^{(00)}_{nm} f^{(s)}_{n\sigma} f^{(e)}_m]_{\text{нерав}} =$$

$$= (V_m - V_n)\left(\frac{\partial W^{(00)}_{mn}}{\partial \varepsilon_m}\tilde f^{(s)}_{m\sigma}\tilde f^{(e)}_n - \frac{\partial W^{(00)}_{nm}}{\partial \varepsilon_m}\tilde f^{(s)}_{n\sigma}\tilde f^{(e)}_m\right) +$$

$$+ W^{(00)}_{mn}\tilde f^{(s)}_{m\sigma}\tilde f^{(e)}_n\left(\frac{\delta f^{(s)}_{m\sigma}}{\tilde f^{(s)}_{m\sigma}} + \frac{\delta f^{(e)}_n}{\tilde f^{(e)}_n} - \frac{\delta f^{(s)}_{n\sigma}}{\tilde f^{(s)}_{n\sigma}} - \frac{\delta f^{(e)}_m}{\tilde f^{(e)}_m}\right) =$$

$$= \frac{1}{T}\Gamma^{(00)}_{mn\sigma}(V_m - V_n + \delta\mu^{(0)}_{\mu\sigma} - \delta\mu^{(0)}_{n\sigma}) \equiv \frac{1}{T}\Gamma^{(00)}_{mn\sigma}U^{(00)}_{m\sigma n\sigma},$$

где

$$\Gamma^{(00)}_{mn\sigma} = W^{(00)}_{mn}\tilde f^{(s)}_{m\sigma}\tilde f^{(e)}_n = W^{(00)}_{nm}\tilde f^{(s)}_{n\sigma}\tilde f^{(e)}_m = \Gamma^{(00)}_{nm\sigma}, \tag{15a}$$

а

$$\frac{\delta\mu^{(0)}_{m\sigma}}{T} = \frac{\delta f^{(s)}_{m\sigma}}{\tilde f^{(s)}_{m\sigma}} - \frac{\delta f^{(e)}_m}{\tilde f^{(e)}_m}. \tag{16a}$$

Аналогично преобразуются и другие члены, в которые входят

$$\Gamma^{(01)}_{mn\sigma} = \Gamma^{(10)}_{nm\sigma} = W^{(01)}_{mn} \tilde{f}^{(s)}_{m\sigma} \tilde{f}^{(s)}_{n\tilde{\sigma}} = W^{(10)}_{mn} \tilde{f}^{(d)}_{n} \tilde{f}^{(e)}_{m}, \tag{15б}$$

$$\Gamma^{(11)}_{mn\sigma} = \Gamma^{(11)}_{nm\sigma} = W^{(11)}_{mn} \tilde{f}^{(d)}_{m} \tilde{f}^{(s)}_{n\tilde{\sigma}} = W^{(11)}_{nm} \tilde{f}^{(d)}_{n} \tilde{f}^{(s)}_{m\sigma} \tag{15в}$$

и

$$\frac{\delta\mu^{(1)}_{m\sigma}}{T} = \frac{\delta f^{(d)}_{m}}{\tilde{f}^{(d)}_{m}} - \frac{\delta f^{(s)}_{m\sigma}}{\tilde{f}^{(s)}_{m\sigma}}. \tag{16б}$$

В этих обозначениях линеаризованные уравнения баланса принимают вид

$$\frac{\partial \delta f^{(s)}_{m\sigma}}{\partial t} = -\frac{1}{T} \sum_{n} \{\Gamma^{(00)}_{mn\sigma} V^{(00)}_{m\sigma n\sigma} + \Gamma^{(01)}_{mn\sigma} V^{(01)}_{m\sigma n\tilde{\sigma}} - \Gamma^{(10)}_{mn\tilde{\sigma}} V^{(10)}_{m\sigma n\tilde{\sigma}} - \Gamma^{(11)}_{mn\tilde{\sigma}} V^{(11)}_{m\sigma n\sigma}\} \tag{17}$$

и

$$\frac{\partial \delta f^{(d)}_{m}}{\partial t} = -\frac{1}{T} \sum_{n\sigma} \{\Gamma^{(10)}_{mn\sigma} U^{(10)}_{m\tilde{\sigma} n\sigma} + \Gamma^{(11)}_{mn\sigma} U^{(11)}_{m\sigma n\tilde{\sigma}}\}, \tag{18}$$

где

$$U^{(\alpha\beta)}_{m\sigma n\sigma'} = V_m - V_n + \delta\mu^{(\alpha)}_{m\sigma} - \delta\mu^{(\beta)}_{n\sigma'} \tag{19}$$

есть разность обобщенных потенциалов, которая в нашем случае зависит не только от узлов, но и от характера их заполнения (индексы α, β).

Плотность тока дается в узельном представлении выражением

$$j = \frac{e}{ST} \sum_{\substack{m<S,n>S \\ \sigma}} \{\Gamma^{(00)}_{mn\sigma} U^{(00)}_{m\sigma n\sigma} + \Gamma^{(01)}_{mn\sigma} U^{(01)}_{m\sigma n\tilde{\sigma}} + \Gamma^{(10)}_{mn\sigma} U^{(10)}_{m\tilde{\sigma} n\sigma} + \Gamma^{(11)}_{mn\sigma} U^{(11)}_{m\sigma n\tilde{\sigma}}\}, \tag{20}$$

где символы $m<S$ и $n>S$ обозначают узлы, лежащие слева и справа от поперечного сечения площади S. В случае, когда энергия не зависит от спина, имеем

$$\delta\mu^{(\alpha)}_{m\sigma} = \delta\mu^{(\alpha)}_{m\tilde{\sigma}} = \delta\mu^{(\alpha)}_{m},$$

$$\Gamma^{(\alpha\beta)}_{mn\sigma} = \Gamma^{(\alpha\beta)}_{mn\tilde{\sigma}} = \Gamma^{(\alpha\beta)}_{mn}, \tag{21}$$

$$U^{(\alpha\beta)}_{m\sigma n\sigma'} = U^{(\alpha\beta)}_{mn}$$

и

$$j = \frac{2e}{ST} \sum_{\substack{m<S,n>S \\ \alpha\beta}} \Gamma^{(\alpha\beta)}_{mn} U^{(\alpha\beta)}_{mn}, \tag{22}$$

из уравнений (17), (18) в стационарном случае получается закон Кирхгофа для разветвленной сетки сопротивлений. Однако из-за наличия возможности двух различных способов заполнения каждого центра число узлов этой сетки вдвое превышает число локальных центров. Возможные переходы между двумя различными локальными центрами могут быть двух типов: с $\alpha=\beta$ и с $\alpha\neq\beta$. Переходы первого типа отвечают перескокам электрона по пустым ($\alpha=\beta=0$) или по однократно заполненным ($\alpha=\beta=1$) центрам (последние можно интерпретировать как перескоки дырок). Переходы этого типа, как видно из (13), не приводят к изменению энергии взаимодействия. Переходы второго типа (с $\alpha\neq\beta$) сопровождаются изменением энергии взаимодействия. Если такие переходы оказываются маловероятными (а эта ситуация вполне реальна [11]), то задача сводится к отысканию сопротивлений двух почти независимых разветвленных сеток, отвечающих «электронной» и «дырочной» составляющим тока. Конкретные методы ее решения, основанные на теории перколяции, обсуждаются в [11].

Линейный отклик в системе с градиентом температуры

Изложенная теория допускает непосредственное обобщение на случай, когда в системе имеется малый градиент температуры. Ввести его можно, как и в [12], рассматривая малые отклонения от локально-равновесных распределений

$$\bar{f}^{(s)}_{m\sigma} = \tilde{f}^{(s)}_{m\sigma}\big|_{T\to T_m}, \quad \bar{f}^{(d)}_{m} = \tilde{f}^{(d)}_{m}\big|_{T\to T_m}, \tag{23}$$

где T_m есть температура в точке $\mathbf{x}_m$ локализации центра, $T_m = T + \mathbf{x}_m \nabla T$. Вводя обозначения

$$\delta\bar{f}^{(s)}_{m\sigma} = f^{(s)}_{m\sigma} - \bar{f}^{(s)}_{m\sigma}, \quad \delta\bar{f}^{(d)}_{m} = f^{(d)}_{m} - \bar{f}^{(d)}_{m} \tag{24}$$

и линеаризуя уравнения баланса (11), (12), мы вновь придем к уравнениям вида (17), (18), только вместо величин $\delta f^{(s)}_{m\sigma}$, $\delta f^{(d)}_{m}$ в них будут входить величины

$$\delta\bar{f}^{(s)}_{m\sigma} = \delta f^{(s)}_{m\sigma} + \frac{\partial\tilde{f}^{(s)}_{m\sigma}}{\partial T}\mathbf{x}_m\nabla T, \quad \delta\bar{f}^{(d)}_{m} = \delta f^{(d)}_{m} + \frac{\partial f^{(d)}_{m}}{\partial T}\mathbf{x}_m\nabla T.$$

Принимая во внимание, что

$$\frac{\partial\tilde{f}^{(s)}_{m\sigma}}{\partial T} = \frac{1}{T^2}(\varepsilon_{m\sigma}-\mu)\tilde{f}^{(s)}_{m\sigma} - \frac{\tilde{f}^{(s)}_{m\sigma}}{z_m}\frac{\partial z_m}{\partial T},$$

$$\frac{\partial\tilde{f}^{(d)}_{m}}{\partial T} = \frac{1}{T^2}(\varepsilon_{m\sigma}+\varepsilon_{m\tilde{\sigma}}-2\mu+K)\tilde{f}^{(d)}_{m} - \frac{\tilde{f}^{(d)}_{m}}{z_m}\frac{\partial z_m}{\partial T},$$

получаем, что вместо $\delta\mu^{(\alpha)}_{m\sigma}/T$, (16а), (16б), войдут выражения

$$\frac{1}{T}\{\delta\mu^{(\alpha)}_{m\sigma} + (\varepsilon_{m\sigma}-\mu+\alpha K)\,\mathbf{x}_m\nabla\ln T\},$$

где, как и раньше, $\alpha=0, 1$. Таким образом, при наличии градиента температуры роль обобщенного потенциала играет не (19), а величина

$$\tilde{U}^{(\alpha\beta)}_{m\sigma n\sigma'} = V_m - V_n + \delta\mu^{(\alpha)}_{m\sigma} - \delta\mu^{(\beta)}_{n\sigma'} + $$
$$+ [(\varepsilon_m-\mu+\alpha K)\,\mathbf{x}_m - (\varepsilon_n-\mu+\beta K)\,\mathbf{x}_n]\nabla\ln T. \tag{25}$$

Полученные уравнения (17), (18) вместе с (25) дают полное описание термоэлектрических явлений переноса, связанных с перескоками электронов между локализованными состояниями с участием фононов при учете внутрицентровой корреляции электронов, ответственных за проводимость.

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

ЛИТЕРАТУРА

1. Zvyagin I. P., Keiper R. «Wiss. Zs. Humboldt Univ.», 1972, 21, 459; Bonch-Bruevich V. L., Mironov A. G., Zvyagin I. P. «La Rivista del Nouvo Cim.», 1973, 3, 321.
2. Ambegaokar V., Halperin B. I., Langer J. S. «Phys. Rev.», 1971, B 4, 2612.

3. Kaplan T. A., Mahanti S. D., Hartmann W. M. «Phys. Rev. Lett.», 1971, 27, 1796.
4. Pollak M. Труды 6-й международной конференции по аморфным и жидким полупроводникам, т. I. 1976, с. 79.
5. Shkolovsky B. I., Efros A. L. «J. Phys.», 1975, **C** 8, 149; Эфрос А. Л. Труды 6-й международной конференции по аморфным и жидким полупроводникам, т. I. 1976, с. 126.
6. Kurosawa T., Sugimoto H. «Progr. Theor. Phys. Suppl.» 1975, **37**, 217.
7. Бонч-Бруевич В. Л. «Вестн. Моск. ун-та. Физ., астрон.», 1977, **18**, № 3, 78.
8. Anderson P. W. «Phys. Rev. Lett.», 1975, **34**, 953.
9. Mott N. F., Davis E. A., Street R. A. «Phil. Mag.», 1975, **32**, 961.
10. Звягин И. П. «Изв. вузов. Физика», 1976, № 2, 35.
11. Звягин И. П. «Вестн. Моск. ун-та. Физ., астрон.», 1977, **18**, № 4.
12. Zvyagin I. P. «Phys. Stat, Sol. (b)», 1973, **58**, 443.

Поступила в редакцию
24.11 1976 г.
Кафедра
физики полупроводников