

УДК 621.315.592

И. П. Звягин

КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В ТЕОРИИ ПРЫЖКОВОГО ПЕРЕНОСА. ПРОВОДИМОСТЬ И ТЕРМОЭДС

Найдена температурная зависимость прыжковых проводимости и термоэдс с учетом взаимодействия электронов, попадающих на один и тот же центр. Показано, что учет отталкивающей корреляции приводит к появлению кулоновских повторений в кажущейся плотности состояний, входящей в проводимость и термоэдс. В случае притяжения для магнитной восприимчивости, интенсивности сигнала ЭПР и проводимости через однократно заряженные центры следует ожидать экспоненциальной зависимости от температуры. Рассмотрен безактивационный процесс прямых перескоков пар, который при низких температурах конкурирует с указанным механизмом проводимости.

В работе [1] было получено уравнение баланса для электронных переходов между локализованными состояниями с учетом взаимодействия электронов, попадающих на один и тот же центр. В отсутствие магнитного поля стационарный линейный отклик системы на приложенное электрическое поле и градиент температуры определяется уравнением

$$\sum_{n\beta} \Gamma_{mn}^{(\alpha\beta)} U_{mn}^{(\alpha\beta)} = 0, \quad (1)$$

где $\alpha, \beta = 0, 1$, $\Gamma_{mn}^{(\alpha\beta)}$ — темпы переходов, определяемые равенствами

$$\begin{aligned} \Gamma_{mn}^{(00)} &= W_{mn}^{(00)} \tilde{f}_{m\sigma}^{(s)} \tilde{f}_n^{(e)}, \quad \Gamma_{mn}^{(01)} = W_{mn}^{(01)} \tilde{f}_{m\uparrow}^{(s)} \tilde{f}_{n\downarrow}^{(s)}, \\ \Gamma_{mn}^{(11)} &= W_{mn}^{(11)} \tilde{f}_m^{(d)} \tilde{f}_{n\sigma}^{(s)}, \quad \Gamma_{mn}^{(\alpha\beta)} = \Gamma_{nm}^{(\beta\alpha)}, \end{aligned} \quad (2)$$

σ — спиновый индекс ($\sigma = \uparrow, \downarrow$), $W_{mn}^{(\alpha\beta)}$ — вероятности переходов между центрами m и n , в случае однофононных переходов даваемые соотношением

$$W_{mn}^{(\alpha\beta)} = \frac{\omega_{mn}^{(\alpha\beta)}}{\exp \left\{ \frac{1}{T} [\varepsilon_n - \varepsilon_m + (\beta - \alpha) K] \right\} - 1}, \quad (3)$$

функция $\omega_{mn}^{(\alpha\beta)} = 2\pi \sum_{q\xi} |B_{mn}^q|^2 (-1)^\xi \delta \{ \varepsilon_m - \varepsilon_n + (\alpha - \beta) K + (-1)^\xi \omega_q \}$ не за-

висит от температуры, B_{mn}^q — матричный элемент для электрон-фононного взаимодействия, $\xi = 1, 2$, а K — энергия взаимодействия двух электронов, попадающих на один центр, для простоты считаемая постоянной. Функции $\tilde{f}_{m\sigma}^{(s)}$, $\tilde{f}_m^{(d)}$ и $\tilde{f}_m^{(e)}$ отвечают вероятностям того, что центр m заполнен однократно электроном со спином σ , двукратно или пуст, а

знаком тильда отмечаются те же функции в равновесии [1]. Наконец, обобщенные потенциалы $U_{mn}^{(\alpha\beta)}$ в (1) даются выражениями

$$U_{mn}^{(\alpha\beta)} = V_m - V_n + \delta\mu_m^{(\alpha)} - \delta\mu_n^{(\beta)} + \{x_m(\varepsilon_m - \mu + \alpha K) - x_n(\varepsilon_n - \mu + \beta K)\} \nabla \ln T. \quad (4)$$

Здесь V_m — потенциал действующего поля в точке локализации узла m , а величины $\delta\mu_m^{(\alpha)}$, аналогичные локальным сдвигам химического потенциала μ , связаны с изменениями функций $f_{m\sigma}^{(s)}$, $f_m^{(d)}$ и $f_m^{(e)}$, вызванными внешними воздействиями, соотношениями

$$\frac{\delta\mu_m^{(0)}}{T} = \frac{\delta f_{m\sigma}^{(s)}}{\tilde{f}_{m\sigma}^{(s)}} - \frac{\delta f_m^{(e)}}{\tilde{f}_m^{(e)}}, \quad \frac{\delta\mu_m^{(1)}}{T} = \frac{\delta f_m^{(d)}}{\tilde{f}_m^{(d)}} - \frac{\delta f_{m\sigma}^{(s)}}{\tilde{f}_{m\sigma}^{(s)}}. \quad (5)$$

Плотность тока в рассматриваемом случае есть

$$j = \frac{2e}{ST} \sum_{\substack{m < S, n > S \\ \alpha, \beta}} \Gamma_{mn}^{(\alpha\beta)} U_{mn}^{(\alpha\beta)}, \quad (6)$$

где $m < S$ и $n > S$ относятся к центрам, лежащим слева и справа от поперечного сечения площадью S . Из выражения (6) с помощью уравнений (1) мы в принципе можем определить термоэлектрические кинетические коэффициенты, если известны волновые функции локализованных состояний и распределение их энергий.

Характерная особенность полученных соотношений состоит в том, что задача свелась к отысканию тока, протекающего по трехмерной сетке случайных сопротивлений с удвоенным числом узлов — каждому локальному центру m сопоставляется два узла сетки (с $\alpha=0, 1$), что связано с двумя возможностями заполнения каждого центра (напомним, что $\Gamma_{mm}^{(\alpha\beta)} = 0$). Коль скоро темпы переходов между центрами экспоненциально зависят от расстояний между ними и от соответствующих разностей энергий, нахождение сопротивления такой сетки можно провести (с логарифмической точностью) методами теории перколяции. Мы рассмотрим отдельно случаи $K > 0$ и $K < 0$.

Отталкивающее взаимодействие

В случае отталкивающего взаимодействия ($K > 0$) термодинамические свойства системы определяются особенностями равновесных функций заполнения [2]; в частности, функция заполнения узла

$$\tilde{f}_m = \tilde{f}_{m\uparrow}^{(s)} + \tilde{f}_{m\downarrow}^{(s)} + 2\tilde{f}_m^{(d)} \quad (7)$$

при низких температурах ($K > T$) представляет собой двухступенчатую функцию (см. [2] и [1], рис. 1), ступеньки которой расположены при энергиях μ и $\mu - K$. Темпы переходов $\Gamma_{mn}^{(00)}$ и $\Gamma_{mn}^{(11)}$ относятся к перескокам электронов по пустым центрам вблизи энергии μ и по однократно заполненным центрам в слое около энергии $\mu - K$. Когда характерные изменения энергии при перескоках Δ превосходят T , эти темпы даются выражениями

$$\Gamma_{mn}^{(\alpha\beta)} = \omega_{mn}^{(\alpha\beta)} 2^{-\theta(\mu - \varepsilon_m)\theta(K + \varepsilon_m - \mu) - \theta(\mu - \varepsilon_n)\theta(K + \varepsilon_n - \mu)} \exp(-\eta_{mn}^{(\alpha\beta)}), \quad (8)$$

где

$$T\eta_{mn}^{(\alpha\beta)} = \frac{|\epsilon_m^{(\alpha)} - \epsilon_n^{(\beta)}| + |\epsilon_m^{(\alpha)}| + |\epsilon_n^{(\beta)}|}{2} -$$

$$- (-1)^{1-\alpha} \epsilon_m^{(1-\alpha)} \theta [(-1)^{1-\alpha} \epsilon_m^{(1-\alpha)}] - (-1)^{1-\beta} \epsilon_n^{(1-\beta)} \theta [(-1)^{1-\beta} \epsilon_n^{(1-\beta)}], \quad (9)$$

$$\epsilon_m^{(\alpha)} = \epsilon_m - \mu + \alpha K.$$

Члены с $\alpha \neq \beta$ отвечают переходам электрона с двукратно заполненного на пустой центр ($\alpha=1, \beta=0$) и с однократно заполненного на однократно заполненный ($\alpha=0, \beta=1$). Двукратно заполненные центры появляются лишь при энергиях, близких к $\mu - K$ или более низких, а пустые — при энергиях порядка или больших μ . Поэтому при переходе с двукратно заполненного центра на пустой выделяющаяся энергия взаимодействия примерно компенсируется разностью энергий центров. Аналогично, проигрыш в энергии K из-за отталкивания при переходах второго из указанных типов почти полностью компенсируется за счет того, что переход происходит между состояниями с энергиями $\epsilon_m \sim \mu$ и $\epsilon_n \sim \mu - K$. Таким образом, все темпы переходов (8) — одного порядка, и, вообще говоря, рассматриваемую сетку нельзя разделить на две независимые сетки, отвечающие перескокам около каждой из ступенек.

В отсутствие корреляции ($K=0$) имеем $\sum_{\alpha\beta} \Gamma_{mn}^{(\alpha\beta)} = \Gamma_{mn}$, и из (1) и (6) точно следуют выражения обычной теории [4] с добавлением спинового множителя 2.

При наличии корреляции проводимость нетрудно оценить на основе выражений (1), (6) и (8), например, с помощью критерия связей. Именно, следуя обычной теории [5, 6], будем считать два центра сеток α, β связанными, если темп переходов между ними превосходит некоторое значение, т. е. если (с логарифмической точностью) величина $\eta_{mn}^{(\alpha\beta)}$ меньше некоторого значения η . Увеличивая η , мы увеличиваем число связей в системе, причем бесконечные цепочки связей появятся, когда среднее число связей в эффективном слое \bar{v} (см. [3]) достигнет некоторого критического значения v_c . В силу резкой (экспоненциальной) зависимости темпов переходов от η_{mn} именно это критическое значение и характеризует проводимость системы. Среднее число $\bar{v}^{(\alpha)}$ связей центра, принадлежащего сетке α , с центрами обеих сеток можно найти с помощью соотношения

$$\bar{v}^{(\alpha)} = \frac{\int v^{(\alpha)}(\epsilon) \mathcal{P}^{(\alpha)}(\epsilon) d\epsilon}{\int \mathcal{P}^{(\alpha)}(\epsilon) d\epsilon}, \quad (10)$$

где $\mathcal{P}^{(\alpha)}(\epsilon)$ есть вероятность того, что центр сетки α с энергией ϵ принадлежит эффективной подсетке бесконечного кластера, а $v^{(\alpha)}(\epsilon)$ — число связей центра с энергией ϵ . При $K > \Delta$, где Δ — ширина эффективного слоя состояний, по которым происходят перескоки, имеет в обычных предположениях [5, 6]

$$v^{(\alpha)}(\epsilon_m) = v_m^{(\alpha)} = 4\pi \sum_{\beta} \int d\epsilon_n N(\epsilon_n) \int_0^{\infty} dR R^2 \theta(\eta - 2\gamma R -$$

$$\frac{|e_m^{(\alpha)} - e_n^{(\beta)}| + |e_m^{(\alpha)}| + |e_n^{(\beta)}|}{2T} = 4\pi \int d\varepsilon_n \tilde{N}(\varepsilon_n + \mu) \times$$

$$\times \int_0^\infty dR R^{2\theta} \left(\eta - 2\gamma R - \frac{|e_m^{(\alpha)} - \varepsilon_n| + |e_m^{(\alpha)}| + |\varepsilon_n|}{2T} \right), \quad (11)$$

где γ — обратный радиус локализации, а

$$\tilde{N}(\varepsilon) = N(\varepsilon) + N(\varepsilon - K). \quad (12)$$

Мы видим, что $v(\varepsilon_m)$ дается тем же выражением, что и в работе [6], однако роль плотности состояний играет величина (12).

Эта же величина входит и в выражение для термоэдс системы. Действительно, в соответствии с (4) находим с помощью метода, изложенного в [3],

$$\alpha_T = \frac{\sum_{\beta} \int d\varepsilon \cdot \varepsilon^{(\beta)} \mathcal{F}^{(\beta)}(\varepsilon)}{\sum_{\beta} \int d\varepsilon \mathcal{F}^{(\beta)}(\varepsilon)}. \quad (13)$$

Полагая $\mathcal{F}^{(\beta)}(\varepsilon) \sim v(\varepsilon^{(\beta)}) N(\varepsilon)$, мы видим, что получается обычное выражение для термоэдс с величиной (12) в роли плотности состояний:

$$\alpha_T = \frac{\int d\varepsilon \cdot \varepsilon \cdot \tilde{N}(\varepsilon) v(\varepsilon)}{\int d\varepsilon \tilde{N}(\varepsilon) v(\varepsilon)}. \quad (13')$$

Таким образом, и в проводимость, и в термоэдс входит кажущаяся плотность состояний $\tilde{N}(\varepsilon)$. Это обстоятельство может быть существенным,

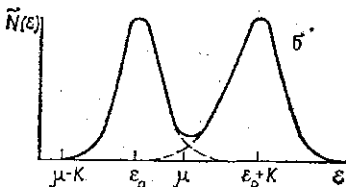
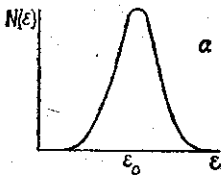


Рис. 1

если плотность состояний не постоянна, а, например, имеет максимум (рис. 1а). Кажущаяся плотность состояний в этом случае имеет два максимума, отстоящих друг от друга на K (рис. 1б). Таким образом, структура плотности состояний, находимая из эффектов, которые зависят от кажущейся плотности состояний, может быть связана не только с различными дефектами, но и с корреляционными эффектами. Можно ожидать, что к числу характеристик системы, выражающихся через кажущуюся плотность состояний, относятся не только кинетические коэффициенты, но и оптические характеристики (такие, как коэффициенты поглощения и испускания). Заметим, однако, что выражение, определяющее положение уровня химического потенциала μ , содержит не $\tilde{N}(\varepsilon)$, а обычную плотность состояний $N(\varepsilon)$. Если пик создан дефектом,

содержащим один электрон на центр (т. е. на пару состояний с противоположными спинами), то уровень химического потенциала μ лежит в области минимума кажущейся плотности состояний, между пиком и

его корреляционным повторением (рис. 1, б), и линейно смещается с температурой при низких температурах (см. [2]):

$$\mu - \mu_0 = -T \ln 2 \frac{N(\mu_0) - N(\mu_0 - K)}{\tilde{N}(\mu_0)}$$

Эти обстоятельства следует иметь в виду при интерпретации явлений прыжкового переноса в аморфных элементарных полупроводниках [7], если принять для них модель с непостоянной плотностью состояний.

Если величина K оказывается значительной, так что одна из ступенек попадает в окрестность края подвижности или в область делоголозованных состояний, сам исходный гамильтониан (с постоянным K) становится несправедливым. Ясно, что вблизи края подвижности степень локализации, а с нею и величина K будут уменьшаться. Вводя эффективную величину $K(\epsilon)$, зависящую от энергии состояния, получим, что нижняя ступенька функции распределения (7) располагается при энергии ϵ_c , такой, что

$$\epsilon_c = \mu - K(\epsilon_c).$$

При этом величина $K(\epsilon_c)$ может быть существенно меньше $K(\mu)$, а расстояние между ступеньками будет определяться положением химического потенциала относительно области энергий, в которой заметно уменьшается $K(\epsilon)$, но которая по-прежнему отвечает локализованным состояниям. И в этом случае проводимость может носить прыжковый характер, причем она определяется перескоками дырок в слое энергий около ϵ_c , если в этой области меньше степень локализации состояний.

Проводимость в условиях спаривания

В условиях, когда результирующее взаимодействие электронов на одном центре имеет характер притяжения, $K = -K_0 < 0$, спаренные состояния электронов энергетически выгодны, а число однократно заполненных центров убывает при $T \rightarrow 0$. При $K_0 \gg T$ равновесные функции заполнения узлов (см. [1]) имеют вид

$$\tilde{f}_{m\uparrow}^{(s)} \cong \frac{e^{-K_0/2T}}{e^{\tilde{\epsilon}_m/T} + e^{-\tilde{\epsilon}_m/T}}, \quad \tilde{f}_m^{(d)} \cong \frac{1}{1 + e^{2\tilde{\epsilon}_m/T}}, \quad (14)$$

где

$$\tilde{\epsilon}_m = \epsilon_m - \mu - \frac{K_0}{2}. \quad (15)$$

Число однократно заполненных центров (неспаренных спинов), определяющее интенсивность сигнала ЭПР, равно при этом

$$2 \sum_m \tilde{f}_{m\uparrow}^{(s)} \cong \pi N \left(\mu + \frac{K_0}{2} \right) T \exp \left(-\frac{K_0}{2T} \right), \quad (16)$$

и можно ожидать почти экспоненциального убывания сигнала ЭПР с температурой. Магнитная восприимчивость системы в этих условиях

$$\chi \cong \frac{\pi \mu_B^2}{8} N \left(\mu + \frac{K_0}{2} \right) \exp \left(-\frac{K_0}{2T} \right). \quad (17)$$

меняется по тому же закону (μ_B — магнетон Бора).

Обратимся теперь к вычислению проводимости. На основании выражений (2) и (3) имеем при

$$\Gamma_{mn}^{(00)} = \omega_{mn}^{(00)} e^{-K_0/2T} \exp \left\{ -\frac{|\tilde{\epsilon}_n - \tilde{\epsilon}_m| + 2|\tilde{\epsilon}_m| + 2|\tilde{\epsilon}_n| - \tilde{\epsilon}_m - \tilde{\epsilon}_n}{2T} \right\}, \quad (18)$$

$$\Gamma_{mn}^{(11)} = \omega_{mn}^{(11)} e^{-K_0/2T} \exp \left\{ -\frac{|\tilde{\epsilon}_n - \tilde{\epsilon}_m| + 2|\tilde{\epsilon}_m| + 2|\tilde{\epsilon}_n| + \tilde{\epsilon}_m + \tilde{\epsilon}_n}{2T} \right\}, \quad (19)$$

а темпы переходов $\Gamma_{mn}^{(10)}$ и $\Gamma_{nm}^{(01)}$ пропорциональны $e^{-K_0/T}$. Таким образом, основной вклад дают процессы с $\Gamma_{mn}^{(\alpha\alpha)}$ т. е. мы можем считать, что сетка сопротивлений состоит из двух независимых сеток, одна из которых отвечает электронной, а другая — дырочной составляющим тока. Для плотности тока имеем в этом случае

$$j = \frac{2e}{ST} e^{-K_0/2T} \sum_{\substack{m < S \\ n > S}} \{ \tilde{\Gamma}_{mn}^{(00)} (V_m - V_n + \delta\mu_m^{(0)} - \delta\mu_n^{(0)}) + \\ + \tilde{\Gamma}_{mn}^{(11)} (V_m - V_n + \delta\mu_m^{(1)} - \delta\mu_n^{(1)}) \}, \quad (20)$$

где мы явно выделили множитель $e^{-K_0/2T}$, положив

$$\Gamma_{mn}^{(\alpha\beta)} = e^{-K_0/2T} \tilde{\Gamma}_{mn}^{(\alpha\beta)}. \quad (21)$$

Температурная зависимость суммы в (20) может быть снова найдена из перколяционных соображений, в стандартных предположениях она имеет моттовский вид для обеих составляющих. Полная температурная зависимость проводимости определяется произведением экспоненты $e^{-K_0/2T}$ и множителя моттовского типа:

$$\sigma \sim e^{-K_0/2T - (T_0/T)^{1/4}}, \quad (22)$$

где $T_0 = \text{const } \gamma^3 N^{-1} \left(\mu + \frac{K_0}{2} \right)$, а γ есть обратный радиус локализации состояний, для простоты считаемый постоянным.

Согласно формуле (22), при более низких температурах главной оказывается простая активационная зависимость, а при повышении температуры может произойти переход к моттовской проводимости. Ситуация здесь обратна привычному убыванию энергии активации с температурой, наблюдаемому при переходе от зонной к прыжковой проводимости в слое вблизи уровня Ферми.

Из выражения (22) видно, что указанный переход происходит при температурах, больших

$$T_c = \frac{K_0}{2} \left(\frac{K_0}{2T_0} \right)^{1/3}. \quad (23)$$

Полагая для оценки $T_0 \cong 10^8$ К, $K_0 = 0,5$ эВ, имеем $\left(\frac{K_0}{2T_0} \right)^{1/3} \approx 3 \cdot 10^{-2}$ и $T_c \sim 50$ К, т. е. температура перехода лежит в разумной температурной области. Реальное наблюдение прыжковой проводимости в таких условиях затруднено из-за малой ее величины (параметр $K_0/2T$ велик). Кроме того, с указанным механизмом проводимости с участием диссоциированных пар может конкурировать процесс прямых перескоков пар. Вероятность такого процесса, хотя она и мала по константе электрон-фононного взаимодействия g , не содержит активационного множителя $e^{-K_0/2T}$. Прямые перескоки пар рассмотрены в следующем разделе.

Вклад в термоэдс при наличии спаривания могут давать как электронный, так и дырочный каналы проводимости. При $T > T_c$, где T_c определяется формулой (23), спаривание не играет существенной роли, и для плавно меняющейся плотности состояний получается обычное выражение [3]. В общем случае, вводя $(\sigma^{(\alpha)})$ проводимость бесконечной цепочки в сетке α и $(\mathcal{P}^{(\alpha)}(\varepsilon))$ вероятность того, что состояние с энергией ε принадлежит эффективной подсетке сетки α ($\mathcal{P}^{(\alpha)}(\varepsilon) \sim v^{(\alpha)}(\varepsilon) N(\varepsilon)$), находим для термоэдс:

$$\alpha_T = \frac{\int d\tilde{\varepsilon} \left(\tilde{\varepsilon} + \frac{K_0}{2} \right) \mathcal{P}^{(1)}(\varepsilon) \sigma^{(1)} + \int d\tilde{\varepsilon} \left(\tilde{\varepsilon} - \frac{K_0}{2} \right) \mathcal{P}^{(2)}(\varepsilon) \sigma^{(2)}}{eT \left(\int d\tilde{\varepsilon} \mathcal{P}^{(1)}(\varepsilon) \sigma^{(1)} + \int d\tilde{\varepsilon} \mathcal{P}^{(2)}(\varepsilon) \sigma^{(2)} \right)}. \quad (24)$$

Замечая, что $v^{(1)}(\varepsilon) = v^{(2)}(-\varepsilon)$, получаем

$$\begin{aligned} \alpha_T &= \frac{\int [N(\tilde{\varepsilon}) - N(-\tilde{\varepsilon})] \left(\tilde{\varepsilon} + \frac{K_0}{2} \right) v^{(1)}(\tilde{\varepsilon}) d\tilde{\varepsilon}}{eT \int [N(\tilde{\varepsilon}) + N(-\tilde{\varepsilon})] v^{(1)}(\tilde{\varepsilon}) d\tilde{\varepsilon}} \sim \\ &\sim \left[(T_0 T)^{1/2} + \text{const } K_0 \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/4} \right] \frac{d \ln N(\varepsilon)}{d\varepsilon}. \end{aligned} \quad (25)$$

Таким образом, при температурах, меньших T_c (23), термоэдс, по-прежнему, пропорциональна малой асимметрии плотности состояний, но изменяется с температурой как $T^{-1/4}$.

Прямые перескоки пар

Мы видели [1], что в рассматриваемом приближении (g^2) прямые безактивационные перескоки пар не возникают: можно ожидать, что они появятся в порядке g^4 , когда перескоки между центрами могут происходить с участием двух фононов. Нас, разумеется, интересует ситуация, когда число неспаренных электронов незначительно; будем оставлять лишь члены, отвечающие прямым перескокам пар. Для функции $\langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} n_{m\tilde{\sigma}} n_{n\tilde{\sigma}} \beta_q^{(\xi)} \rangle$, появляющейся в уравнении (5) работы [1], имеем уравнение

$$\begin{aligned} &\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \varepsilon_{m\sigma} - \varepsilon_{n\sigma} + (-1)^\xi \omega_q - K_0 \right) \langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} n_{m\tilde{\sigma}} \beta_q^{(\xi)} \rangle = \\ &= -K_0 \langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} n_{m\tilde{\sigma}} n_{n\tilde{\sigma}} \beta_q^{(\xi)} \rangle + \sum_{q'\xi'} B_{nm}^{q'} \langle a_{m\sigma}^+ a_{m\tilde{\sigma}}^+ a_{n\sigma} \beta_q^{(\xi)} \beta_{q'}^{(\xi')} \rangle, \\ &(\beta_q^{(1)} = b_q, \quad \beta_q^{(2)} = b_q^+, \quad \tilde{\sigma} = -\sigma) \end{aligned} \quad (26)$$

и далее

$$\begin{aligned} &\left(i \frac{\partial}{\partial t} + 2(\varepsilon_m - \varepsilon_n) + (-1)^\xi \omega_q + (-1)^{\xi'} \omega_{q'} \right) \langle a_{m\sigma}^+ a_{m\tilde{\sigma}}^+ a_{n\tilde{\sigma}} \beta_q^{(\xi)} \beta_{q'}^{(\xi')} \rangle = \\ &= \sum_{\eta\kappa\sigma'} B_{mn}^\eta \langle a_{m\sigma'}^+ a_{n\sigma'} [n_{m\tilde{\sigma}} (1 - n_{n\tilde{\sigma}}) \beta_q^{(\xi)} \beta_{q'}^{(\xi')} \beta_\kappa^{(\eta)} - \\ &\quad - n_{n\tilde{\sigma}} (1 - n_{m\tilde{\sigma}}) \beta_\kappa^{(\eta)} \beta_q^{(\xi)} \beta_{q'}^{(\xi')}] \rangle. \end{aligned} \quad (27)$$

Следующие уравнения цепочки после должного расщепления [1]

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \varepsilon_{m\sigma} - \varepsilon_{n\sigma'} + (-1)^\xi \omega_q + (-1)^{\eta} q^{\xi'} \omega + (-1)^{\eta} \omega_\kappa - K_0 \right) \times$$

$$\times \langle a_{m\sigma}^+ a_{n\sigma} n_{m\sigma} \tilde{\gamma} (1 - n_{n\sigma} \tilde{\gamma}) \beta_q^{(\xi)} \beta_{q'}^{(\xi')} \beta_n^{(\eta)} \rangle \cong \sum_{\kappa' \eta'} B_{mn}^{\kappa'} f_m^{(\alpha)} f_n^{(\epsilon)} \langle \beta_q^{(\xi)} \beta_{q'}^{(\xi')} \beta_n^{(\eta)} \beta_{\kappa'}^{(\eta')} \rangle + \dots \quad (28)$$

После расщепления система уравнений (26)—(28) совместно с уравнением (5) работы [1] становится замкнутой; преобразуя ее, находим

$$\frac{\partial f_m^{(d)}}{\partial t} = - \sum_n (W_{mn}^{(d)} f_m^{(d)} f_n^{(\epsilon)} - W_{nm}^{(d)} f_n^{(d)} f_m^{(\epsilon)}), \quad (29)$$

где вероятность прямого перескока пары равна

$$W_{mn}^{(d)} = 2\pi \sum_{qq'\xi\xi'\sigma\sigma'} |B_{mn}^q|^2 |B_{mn}^{q'}|^2 \delta \{2(\epsilon_m - \epsilon_n) + (-1)^\xi \omega_q + (-1)^{\xi'} \omega_{q'}\} \times \\ \times \frac{1}{|1 - e^{(-1)^\xi \omega_q}| \cdot |1 - e^{(-1)^{\xi'} \omega_{q'}}|} \frac{P}{\epsilon_{m\sigma} - \epsilon_{n\sigma} + (-1)^\xi \omega_q - K_0} \times \\ \times \left(\frac{P}{\epsilon_{m\sigma'} - \epsilon_{n\sigma'} + (-1)^\xi \omega_q + K_0} + \frac{P}{\epsilon_{m\sigma'} - \epsilon_{n\sigma'} + (-1)^{\xi'} \omega_{q'} + K_0} \right) \quad (30)$$

(символ P здесь означает, что нужно брать главное значение при переходе к интегрированию по энергиям). Когда K_0 велико, выражение (30) несколько упрощается:

$$W_{mn}^{(d)} \cong \frac{8\pi}{K_0^2} \sum_{qq'} |B_{mn}^q|^2 |B_{mn}^{q'}|^2 \left\{ \delta \left(\epsilon_m - \epsilon_n + \frac{\omega_q + \omega_{q'}}{2} \right) + \right. \\ \left. + 2e^{-\omega_{q'}/T} \delta \left(\epsilon_m - \epsilon_n + \frac{\omega_q - \omega_{q'}}{2} \right) + e^{-(\omega_q + \omega_{q'})/T} \delta \left(\epsilon_m - \epsilon_n - \frac{\omega_q + \omega_{q'}}{2} \right) \right\}. \quad (31)$$

Отсюда видно, что вероятность прямого перескока пары есть величина порядка g^4 , содержащая в знаменателе большую величину K_0^2 . Появление ее связано с тем, что перескок пары идет в два этапа через промежуточное состояние, отвечающее виртуальному распаду пары. Энергетическая зависимость вероятности (31) определяется экспоненциальными множителями обычного типа и приводит к моттовской температурной зависимости проводимости, величина которой, однако, весьма мала из-за множителя g_0^4/K_0^2 .

Выражаю благодарность В. Л. Бонч-Бруевичу за обсуждение данной работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Звягин И. П. «Вестн. Моск. ун-та. Физ., астрон.», 1977, 18, № 1, 3.
2. Kaplan T. A., Mahanti S. D., Hartmann W. M. «Phys. Rev. Lett.», 1971, 27, 1796.
3. Zvyagin I. P. «Phys. stat. sol.» (b), 1973, 58, 443.
4. Zvyagin I. P., Keiper R. «Wiss. Zs. Humb.—Univ., Berlin», 1972, 21, 459.
5. Jones R., Schaich W. J. «J. Phys.», 1972, C5, 43.
6. Звягин И. П. «Вестн. Моск. ун-та. Физ., астрон.», 1974, 15, № 6, 659.
7. Lewis A. J. «Phys. Rev.», 1976, B13, 2565.

Поступила в редакцию
8.12 1976 г.
Кафедра
физики полупроводников