УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

537.311.33

ТЕОРИЯ ПРОТЕКАНИЯ И ПРОВОДИМОСТЬ СИЛЬНО НЕОДНОРОДНЫХ СРЕД

Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос

СОДЕРЖАНИЕ

1.	Введение	401
2.	Решеточные и континуальные задачи теории протекания	404
3.	Вычисление показателя экспоненты проводимости сильно неоднородных сред	407
4.	Теория прыжковой проводимости	409
	а) Основные экспериментальные данные (409). б) Случайная сетка сопротив-	
	лений (411). в) Концентрационная зависимость прыжковой проводимо-	
	сти (413). г) Теория прыжкового магнетосопротивления (415). д) Темпера-	
	турная зависимость прыжковой проводимости (416). е) Энергия активации	
	слабо легированных полупроводников (419).	
5.	Особенности вблизи порога протекания и связанные с ними физические	
	задачи	424
	а) Критические индексы (424). б) Электропроводность полупроводниковых	
	пленок (430). в) Предэкспоненциальный множитель прыжковой проводи-	
	мости (432).	
Ш		433

1. ВВЕДЕНИЕ

В 1957 г. в работе Бродбента и Хаммерсли¹ были сформулированы новые математические задачи, возникшие в связи с процессами, которые авторы назвали процессами протекания. (В оригинале — percolation processes.) На базе этих задач родилась математическая дисциплина, называемая теорией протекания, которая нашла широкое применение в различных разделах физики конденсированного состояния. Мы начнем с того, что приведем несколько типичных задач теории протекания и объясним, какого рода процессы описываются этими задачами.

Классическими задачами теории протекания являются решеточные задачи сеязей и узлов. Рассмотрим пространственную решетку и допустим, что некая жидкость может протекать от одного узла к другому по трубам, которые мы будем называть сеязями. Мы будем говорить, что с помощью этих связей каждый смоченный узел смачивает своих ближайших соседей. Очевидно, что один смоченный атом обязательно смачивает всю решетку. Различным образом вводя в эту систему стохастические элементы, получаем задачи связей и узлов. Обсудим сначала задачу связей (bond problem). Предположим, что каждая связь в решетке может быть разорвана с вероятностью 1 - x, не зависящей от состояния других связей. Допустим, что один узел решетки с частично разорванными связями смочен, и обсудим вопрос о том, сколько других узлов решетки он может смочить. Как уже говорилось, при x = 1 вся решетка смачивается с вероятностью, равной

> © Главная редакция физико-математической литературы издательства «Наука», «Успехи физических наук», 1975 г.

единице. Ясно, что при малом x смачивается лишь конечное число узлов, так как разорванные связи не позволяют жидкости отойти далеко от исходного узла. Один из аспектов задачи связей состоит в нахождении величины $x_c(b)$ — минимального значения x, при котором вероятность того, что исходный узел смачивает бесконечное число других узлов, отлична от нуля. Точку $x_c(b)$ мы будем называть порогом протекания. Задача связей описывает, например, процесс протекания тока по решетке, в которой вместо неразорванных связей стоят одинаковые сопротивления, соединяющие соседние узлы, а разорванным связям соответствует бесконечное сопротивление. Эффективная электропроводность такой среды σ отлична от нуля лишь при $x > x_c(b)$. Определение величины $\sigma(x)$ является другим аспектом задачи связей.

Обсудим теперь задачу узлов (site problem). В этой задаче все связи считаются неразорванными, а портятся узлы. Узлы могут быть перекрытыми и неперекрытыми. Перекрытые узлы не пропускают жидкость ни в какую сторону. Они не могут быть смоченными и не смачивают другие узлы. Можно ввести критическую долю неперекрытых узлов x_c (s), при которой вероятность того, что данный узел смачивает бесконечное число других узлов, обращается в нуль. Наиболее важным примером задачи узлов является задача о разбавленном ферромагнетике. Представим себе твердый раствор ферромагнитного вещества в немагнитном, причем доля ферромагнитных атомов равна х. Допустим, что обменное взаимодействие между ферромагнитными атомами, приводящее к параллельной ориентации их магнитных моментов, столь резко убывает с расстоянием, что его можно считать отличным от нуля, лишь когда эти атомы находятся в соседних узлах решетки. Будем называть узлы, в которых находятся немагнитные атомы, перекрытыми. При нулевой температуре все смачивающие друг друга неперекрытые узлы имеют одинаковую ориентацию магнитных моментов. При малых значениях х образуются изолированные группы (кластеры) из смачивающих друг друга узлов, внутри которых моменты ориентированы одинаково, однако взаимная ориентация моментов этих групп произвольна, так что макроскопический момент равен нулю. Величина x_c (s), определенная из решения сформулированной выше задачи узлов, и представляет собой долю ферромагнитных атомов, при которой впервые возникает бесконечный кластер (БК) из смачивающих друг друга атомов, т. е. при достаточно низкой температуре возникает макроскопический магнитный момент. Таким образом, в рассматриваемой системе ферромагнитный переход возможен только при $x > x_c$ (s). Наряду с нахождением порога протекания x_c в теории протекания исследуется доля узлов, принадлежащих БК при $x > x_c$. Для твердого раствора эта величина имеет смысл намагниченности насыщения. В последнее время все больше внимания уделяется вопросу о топологии БК. В сформулированных выше простейших задачах топологией БК определяется величина $\sigma(x)$ и температура перехода $T_c(x)$.

Из приведенных примеров должно быть ясно, что в задачах теории протекания важную роль играют зафиксированные в пространстве случайные свойства среды и связанность областей с одинаковыми свойствами.

Приложения теории протекания оказываются самыми разнообразными и неожиданными. Например, в работе ¹ приведена следующая задача. Проектируется фруктовый сад, представляющий собой квадратную решетку, в узлах которой растут деревья. Известно, что заболевшее дерево заражает другое дерево, находящееся от него на расстоянии rс вероятностью f(r), где f(r) — быстро убывающая функция. Требуется найти минимальное расстояние между деревьями, при котором одно заболевшее дерево способно заразить лишь конечное число деревьев. Очевидно, что эта задача сводится к изложенной выше задаче связей, и искомое расстояние определяется условием $f(r) = x_c(b)$, где $x_c(b)$ — критическое значение доли неразорванных связей.

В настоящее время наиболее важной областью применения теории протекания, несомненно, является теория неупорядоченных систем. Основные представления электронной теории аморфных полупроводников, такие, как порог подвижности, уровень протекания, обязаны своим существованием этой новой математической дисциплине. Уже в 1958 г., через год после появления основополагающей работы¹, Андерсон² использовал идеи теории протекания для доказательства фундаментального утверждения о локализации электронов в случайном потенциальном поле при достаточно большой степени беспорядка. Это явление называется переходом Андерсена, и его изучению посвящено большое количество работ (см., например, ³). Идеи теории протекания используются для вычисления подвижности электронов в парах гелия ⁴, для описания перехода металл — диэлектрик в сильно легированных полупроводниках 5. в вольфрамовых бронзах 6, 7, в жидкой ртути при уменьшении ее плотности ⁸ и целом ряде других объектов. Как уже говорилось, с помощью теории протекания вычисляется намагниченность насыщения и температура Кюри ферромагнитных твердых растворов в зависимости от концентрации ферромагнитных атомов ⁹ и изучаются другие магнитные свойства этих систем¹⁰.

В 1971 г. авторы настоящего обзора ¹¹ и Амбегаокар, Гальперик и Лангер ¹² показали, что перенос тока в неупорядоченной системе с локализованными состояниями, который осуществляется за счет прыжков электронов из одного состояния в другое, следует рассматривать как процесс протекания. Обе работы содержали критику результатов Миллера и Абрагамса ¹³, которые являлись в то время общепризнанными, а также идею, позволяющую свести задачу о вычислении показателя экспоненты электропроводности к задаче теории протекания. (Годом позже эти же идеи были независимо высказаны в работе Поллака ¹⁴.) За последние три года теория прыжковой проводимости достигла значительных успехов как в объяснении общирных экспериментальных данных, так и в четкости логического построения. Математический аппарат теории полностью основан на идеях теории протекания. При этом, помимо хорошо известных раньше решеточных задач протекания, потребовались континуальные задачи и задачи на случайных узлах.

Изложению теории протекания посвящены хорошие обзоры Шанта и Киркпатрика ¹⁵, Домба, Фриша и Хаммерсли, Эссама ¹⁶. Цель настоящего обзора состоит не только в изложении новейших достижений в этой области. Мы хотим показать, как методы теории протекания позволяют построить физическую теорию явлений переноса в сильно неоднородных средах. В качестве приложения мы используем в основном прыжковую проводимость слабо легированных полупроводников. Однако мы не стремимся к детальному изложению результатов и их сопоставлению с экспериментальными данными, ибо это потребовало бы подробного изложения теории примесных электронных состояний, обобщения на случай нестандартного спектра и увело бы нас в сторону от основной задачи. (Эти результаты достаточно полно изложены в обзоре одного из нас ¹⁷). Ввиду новизны метода мы видим задачу обзора в максимально четком изложении основных идей, ибо надеемся, что они окажутся полезными в других физических задачах.

Во второй главе обзора обсуждаются пороговые точки и методы их определения. В третьей главе устанавливается связь между показателем экспоненты электропроводности неоднородной среды и пороговыми величинами задач теории протекания. В четвертой главе на основании этой связи строится теория экспоненциальных зависимостей прыжковой проводимости от концентрации примесей, температуры и магнитного поля. Наконец, пятая глава посвящена выяснению характера особенности различных величин в пороговой точке. Это дает возможность найти предэкспоненциальный множитель прыжковой проводимости и исследовать размерные эффекты.

2. РЕШЕТОЧНЫЕ И КОНТИНУАЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ ПРОТЕКАНИЯ

Решеточные задачи являются исторически первыми и наиболее изученными задачами теории протекания. К ним сводится ряд важных физических проблем (например, теория ферромагнитных твердых растворов), на их примере можно ознакомиться с методами теории протекания, кроме того, результаты, полученные с их помощью, часто оказываются универсальными.

При анализе решеточных задач вводится величина $P_N(x)$ — вероятность того, что заданный узел смачивает, по крайней мере, N-1 других





По данным работы ¹⁹. для N = 667 (1), 1000 (2), 2000 (3), 6000 (4) и ∞ (5).

узлов, т. е. принадлежит к кластеру из, по крайней мере, N узлов, связанных ³⁴друг с другом. Одна из задач теории состоит в нахождении функции

$$P(x) = \lim_{N \to \infty} P_N(x), \qquad (2.1)$$

представляющей вероятность того, что данный узел смачивает бесконечное число узлов. Другими словами, P(x) есть доля узлов решетки, принадлежащих БК. Разумеется, функция P(x) для задач узлов и связей неодинакова, и мы будем приписывать им сверху индексы «s» и «b» соответственно. Как показал Хаммерсли ¹⁸,

$$P_N^s(x) \leq P_N^b(x).$$
 (2.2)

Из (2.1) и (2.2) следует также, что

$$P^{s}(x) \leqslant P^{b}(x) \quad (2.3)$$

На рис. 1 представлены функции *P*_N (*x*) для задачи связей, полученные

с помощью ЭВМ в работе ¹⁹. Видно, что при конечных значениях N эти функции нигде не обращаются в нуль; вероятность найти большой, но конечный кластер из связанных узлов всегда конечна. Видно также, что при $N \to \infty$ величина $P_N(x)$ стремится к нулю при $x < x_c$ (s). Функция P(x) = 0 при $x < x_c$ и монотонно возрастает при $x > x_c$. Эта ситуация аналогичная фазовому переходу второго рода, который, как и все фазовые переходы, имеет место лишь в бесконечной системе. Роль параметра порядка играет при этом концентрация узлов, принадлежащих бесконечному кластеру ²⁰. (Мы подробно остановимся на аналогии с фазовыми переходами в главе 5.) Для определения величины x_c используется несколько способов. В большом количестве работ ^{19, 21}, ²² x_c определяется методом Монте-Карло на ЭВМ. При этом кривые $P_N(x)$ экстраполируются к $N = \infty$. Кроме того, используется метод рядов Домба и Сайкса ²³. Среднее значение числа узлов, смачивающих друг друга, представляется в виде ряда по степеням x. Легко показать, что при малых x этот ряд сходится. Этим доказывается, что при малых x функция P(x) = 0. Величина x_c представляет радиус сходимости этого ряда. Сайкс и Эссам ²⁴ предложили весьма точный способ вычисления x_c , основанный на анализе коэффициентов таких рядов для различных решеток. Их результаты для задач связей, x_c (b), и узлов, x_c (s), приведены в таблице, заимствованной из обзора ¹⁵. Они мало отличаются от результатов, полученных методом Монте-Карло. Для некоторых плоских решеток этим же авторам ²⁵ удалось получить точные результаты. В таблице эти результаты подчеркнуты снизу.

Решетка	z	x _c (b)	zx _c (b)	f	x _c (s)	fx_c (s)
Двумерные:						
Шестиугольная	3	0,6527	1,96	0,61	0,700	0,427
Квадратная	4	0,500	2,00	0,79	0,590	0,466
Треугольная	6	0,3473	2,08	0,91	0,500	0,455
Трехмерные:						
Алмаза Простая кубическая Объемноцентрированная куби- ческая Гранецентрированная куби- ческая	4 6 8 12	0,388 0,247 0,178 0,119	1,55 1,48 1,42 1,43	$0,34 \\ 0,52 \\ 0,68 \\ 0,74$	$0,425 \\ 0,307 \\ 0,243 \\ 0,195$	0,145 0,160 0,165 0,144

Анализ величин x_c позволяет сделать ряд интересных выводов. Из монотонности функции P(x) и из неравенства (2.3) следует

$$x_c(s) \geqslant x_c(b), \tag{2.4}$$

что подтверждается данными таблицы. Далее заметим, что величины x_c довольно сильно отличаются друг от друга даже для решеток с одинаковым числом измерений. Это обстоятельство связано, главным образом, с числом ближайших соседей z. Для задачи связей удобно ввести среднее число связей на узел. Если все связи неразорваны, то оно равняется z, а при наличии разорванных связей равно zx. Оказывается, что для задачи связей критическое значение x_c (b) можно приближенно найти из условия, что среднее значение числа связей на узел равно определенному числу, которое не зависит от конкретной решетки, а зависит лишь от числа измерений. Для двумерных решеток zx_c (b) = 2²³, а для трехмерного случая zx_c (b) = 1,5²⁶. В таблице показано, с какой точностью выполняется это правило.

Аналогичную величину можно ввести и для задачи узлов ²⁷. Построим вокруг каждого узла решетки сферу с радиусом, равным половине расстояния до ближайшего соседа, и пусть f — есть отношение объема, занимаемого этими сферами, к полному объему. Если такие сферы приписывать только неперекрытым узлам, то доля объема, занимаемая этими сферами, будет равна *xf*. Как видно из таблицы, критическое значение x_c (s) с хорошей точностью определяется из условия, что эта доля объема равна $0,45 \pm 0,02$ для двумерных решеток и $0,15 \pm 0,01$ — для трехмерных. Рассмотрим теперь так называемые континуальные задачи теории протекания. Допустим, что во всем пространстве задана случайная непрерывная функция $V(\mathbf{r})$, определенная корреляционными соотношениями. Не нарушая общности, будем считать, что $\langle V(\mathbf{r}) \rangle = 0$ ($\langle \ldots \rangle$ означает среднее значение). Зададим вещественное число V и покрасим мысленно области пространства, где $V(\mathbf{r}) < V$, черной краской, а остальные области — белой. При изменении V от — ∞ до ∞ объем черных областей меняется от нуля до объема всего пространства. Требуется найти минимальное значение $V = V_c$, при котором существует возможность, стартовав из некоторой черной точки, уйти от нее на бесконечное расстояние, двигаясь только по черным областям. Такая задача возникает, например, если нужно найти минимальную энергию, которую должен иметь электрон, чтобы уйти на макроскопическое расстояние в потенциале $V(\mathbf{r})$, не выходя из классически разрешенных областей ⁴, ¹¹, ²⁶, ²⁸. Величина V_c называется в этом случае энергией протекания (уровнем протекания).

Легко понять, что континуальная задача близка к сформулированным ранее решеточным задачам. Вообразим решетку со столь малым периодом, что функция $V(\mathbf{r})$ практически на нем не меняется. Зафиксируем V и будем считать, что связи между соседними узлами решетки, находящимися в черных областях, не разорваны, а остальные связи разорваны. При увеличении V увеличивается доля неразорванных связей x, и критическому значению V_c соответствует значение x_c , представляющее решение задачи связей, отличающейся от сформулированной ранее тем, что распределение разорванных связей на различных узлах коррелировано в соответствии с видом функции $V(\mathbf{r})$.

В континуальной задаче удобно говорить о критической доле пространства, окрашенного в черный цвет, соответствующей возникновению протекания по черным областям

$$v_c = \int_{-\infty}^{V_c} F(V) \, dV, \qquad (2.5)$$

где F (V) — функция распределения величины V. Доля пространства v_c менее чувствительна к виду случайной функции V (r), чем уровень протекания V_c .

Если статистические свойства $V(\mathbf{r})$ при положительных и отрицательных значениях совершенно симметричны (в частности, F(V) = F(-V)), то в двумерном случае $v_c = 0,5^{29}$, ³⁰, т. е. $V_c = 0$. Это легко понять, доказав, что в двумерном случае не может быть протекания по белому и по черному одновременно и не может не быть протекания и по белому, и по черному.

В трехмерном случае дело обстоит значительно сложнее. Существует множество раскрасок, при которых есть протекание и по белому, и по черному. (Легко понять, что в трехмерном пространстве каналы, по которым осуществляется протекание и по белому, и по черному, не обязаны при этом пересекаться.) Поэтому существует два уровня протекания — нижний и верхний. При увеличении V при $V = V_c$ сначала возникает протекание по черному, а затем при $V = V'_c$ прекращается протекание по белому. Если статистические свойства V (r) симметричны относительно нуля, то $V'_c = -V_c$, причем $V_c < 0$. Естественно, что в трехмерном случае $v_c < 0.5$. Заметим, что эти соображения приводят к существенным выводам, касающимся оптического и электрического зазоров в аморфном полупроводнике ³¹.

Заллен и Шер^{27, 29} предложили для приближенной оценки величины v_c использовать инвариант решеточной задачи узлов fx_c (s). По смыслу этот инвариант представляет долю объема, заполненную центрированными в неперекрытых узлах решетки сферами, при которой по касающимся сферам возникает протекание. Согласно работам ²⁷, ²⁹ $v_c = fx_c$ (s). В двумерном случае это дает 0,45, что близко к точному значению v_c для симметричного потенциала, в трехмерном случае получаем $v_c = 0,15$.

В работах ^{32, 33} был разработан способ решения континуальных задач методом Монте-Карло на ЭВМ. Рассматривались, главным образом, гауссовы потенциалы, для которых $\langle V(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}') \rangle = K(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, нечетные корреляторы равны нулю, а четные корреляторы распадаются на произведения парных. Было показано, что для таких потенциалов в трехмерном случае $v_c = 0.47 \pm 0.01$ и в пределах точности расчета не зависит от вида ядра $K(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Возможно, это есть точное свойство гауссовых потенциалов, однако доказать его авторам не удалось. Заметим, что для пегауссовых потенциалов в работе ³³ получены значения v_c , изменяющиеся в довольно широких пределах.

Мы обсудили вопрос о пороге протекания в двух классах задач. Этот же вопрос для третьего класса задач — задач на случайных узлах будет обсуждаться в гл. 4. Как мы увидим в следующей главе, задача о вычислении показателя экспоненты проводимости сводится к нахождению порога протекания. Для вывода этого утверждения нам потребуются некоторые сведения о структуре БК. Принято считать ¹⁵, хотя это и не доказано строго, что не может существовать нескольких БК, пе связанных друг с другом. Топологические свойства БК одинаковы для всех классов задач при заданном числе измерений пространства. БК можно представить в виде случайной сетки, заполняющей все пространство. При ириближении к порогу эта сетка становится все более редкой, однако при любом конечном значении $x - x_c > 0$ доля узлов, принадлежащих этой сетке, остается конечной. Для вычисления предэкспоненциального множителя проводимости и для ряда других задач требуется более детальная информация о топологии БК. Эта информация содержится в гл. 5.

3. ВЫЧИСЛЕНИЕ ПОКАЗАТЕЛЯ ЭКСПОНЕНТЫ ПРОВОДИМОСТИ СИЛЬНО НЕОДНОРОДНЫХ СРЕД

В этой главе мы покажем, что возникает задача протекания при нахождении эффективной электропроводности неупорядоченной системы. Для простоты мы рассмотрим сначала случай среды, которая может характеризоваться локальной удельной электропроводностью $\sigma(r)$ с заданным законом распределения. Если неоднородность $\sigma(r)$ относительно мала, т. е. $|(\sigma(r) - \langle \sigma \rangle) / \langle \sigma \rangle | \ll 1$, то эффективная электропроводность находится с помощью теории возмущений ³⁴. В промежуточном случае $|(\sigma(r) - \langle \sigma \rangle) / \langle \sigma \rangle | \approx 1$, как показывают численные расчеты, хорошо работает давно известное ³⁵ приближение «эффективной среды», изложение которого выходит за рамки нашего обзора (см., например, прекрасный обзор Киркпатрика ³⁶). Нас же будет интересовать случай, когда неоднородность электропроводности экспоненциально велика, т. е.

$$\sigma_{0}^{*}(r) = \sigma_{0}e^{-\xi(r)}, \qquad (3.1)$$

иричем $\langle (\xi(r) - (\xi))^2 \rangle \gg 1$. Такой вид имеет, например, электропроводность полупроводника с крупномасштабными флукутациями потенциала, искривляющими дно зоны проводимости ¹¹. В этом случае $\xi(r) = \varepsilon(r)/T$, где $\varepsilon(r)$ — локальное значение расстояния от уровня Ферми до дна зоны проводимости, T — температура в энергетической шкале. Мы приведем теперь рассуждения, показывающие, что определение показателя экспоненты эффективной электропроводности сводится к решению задачи теории протекания ^{11, 12}. Зададим некоторое значение § и выделим области пространства, в которых § $(r) \leq$ §, покрасив их (мысленно) черной краской, а прочие области — белой краской. Введем величину σ_{ξ} , определив ее как эффективную проводимость среды, в которой вместо белых областей вставлен диэлектрик. Очевидно, что интересующая нас эффективная проводимость σ равна $\lim_{\xi \to \infty} \sigma_{\xi} = 0$. Начиная с некоторого критического значения $\xi = \xi_c$, эти области образуют раз-

с некоторого критического значения $\xi = \xi_c$, эти ооласти ооразуют разветвляющиеся цепочки связанных между собой озер. При самом незначительном превышении ξ над ξ_c плотность таких цепочек становится конечной и увеличивается с $\xi - \xi_c$ степенным образом. Сопротивление этой критической сетки определяется сопротивлением наиболее высокоомных участков. (По определению эти участки не могут быть шунтированы низкоомными, иначе протекание возникло бы при $\xi < \xi_c$.) Поэтому при $\xi - \xi_c$ порядка единицы $\sigma_{\xi} \approx \exp(-\xi_c)$. (Мы пренебрегаем членами порядка единицы в показателе экспоненты.) Дальнейшее увеличение ξ не изменит экспоненциальной зависимости σ_{ξ} , так как при этом включаются области с проводимостью экспоненциально меньшей, чем $\exp(-\xi_c)$, которые шунтированы упомянутой выше критической сеткой. Отсюда следует, что главный член логарифма эффективной проводимости определяется формулой

$$\ln \frac{\sigma}{\sigma_0} = -\xi_c. \tag{3.2}$$

Таким образом, задача об определении главного члена в показателе экспоненты эффективной проводимости свелась к сформулированной в конце предыдущего раздела континуальной задаче теории протекания.

Если свойства среды таковы, что электропроводность не представляется непрерывной функцией координат, то возникают другие задачи теории протекания. Киркпатрик ³⁷ предпринял проверку идей, лежащих в основе приведенного выше вывода формулы (3.2), с помощью следующей модели. Рассмотрим простую кубическую решетку, между ближайшими узлами которой включены случайные сопротивления, имеющие большой разброс. Эти сопротивления представим в виде $R = R_0 e^{\xi}$ и будем считать, что величина R₀ у всех сопротивлений одинакова, а случайная величина § распределена равномерно в интервале от $-\ln A$ до $\ln A$. Если A = 1, то все сопротивления одинаковы, и эффективная электропроводность о (в расчете на одно сопротивление) равна $\sigma_0 = 1/R_0$. При $A \gg 1$ можно найти ln (σ/σ_0) методом теории протекания. Для этого мы должны мысленно включить все сопротивления с $\xi < \xi_c$ и выбрать ξ_c из условия, что по включенным сопротивлениям возникает протекание. Тогда результат будет выражен формулой (3.2). Легко видеть, что в этом случае ξ_c определяется из решения решеточной задачи связей. Согласно приведенным в таблице результатам, критическая доля включенных сопротивлений x_c (b) равна в этом случае 0,25. Теперь легко найти ξ_c. По условию задачи функция распределения ξ имеет вид

$$F(\xi) = \begin{cases} (2 \ln A)^{-1}, & |\xi| \leq \ln A, \\ 0, & |\xi| > \ln A. \end{cases}$$
(3.3)

Если включены все сопротивления с $-{\rm ln}\,A<\xi<\xi_{\rm c},$ то доля включенных сопротивлений равна

$$x(\xi_c) = \int_{-\ln A}^{s_c} F(\xi) d\xi.$$
 (3.4)

Величина ξ_c определяется условием $x(\xi_c) = 0.25$. Вычислив интеграл (3.4), получим

$$\xi_c = -\frac{1}{2} \ln A \tag{3.5}$$

и, согласно (3.2),

$$\ln \frac{\sigma}{\sigma_0} = \frac{1}{2} \ln A. \tag{3.6}$$

Проверка, предпринятая Киркпатриком, чете эффективной электропроводности как функции А. Расчет производился для куба, имеющего 15³ узлов, имитирующего бесконечную решетку. С помощью ЭВМ решалась система уравнений Кирхгофа, выражающая законы сохранения тока в каждом узле. Оказалось, что результаты, полученные в первой работе Киркпатрика ³⁷, не согласуются с (3.6), что явилось основанием пля неповерия к изложенному в этой главе методу. Следует, однако, иметь в виду, что формулы (3.2) и (3.6) применимы лишь при больших значениях A, когда $\ln A \gg 1$. В первых расчетах Киркпатрику удалось продвинуться лишь до $A \approx 10^3$. Этого оказалось недостаточно. Последующие расчеты, проведенные как самим Киркпатриком ³⁸,

состояла в численном рас-



Рис. 2. Зависимость lg о от lg A по данным ³⁹. Прямая линия — теоретическая зависимость (3.6).

так и другими авторами ³⁹, показали, что при достаточно больших A ($A \ge 10^4$) формула (3.6) справедлива с большой точностью (рис. 2). Таким образом, численные расчеты позволили не только проверить метод протекания, но и уточнить пределы его применимости.

4. ТЕОРИЯ ПРЫЖКОВОЙ ПРОВОДИМОСТИ

Применим теперь идеи, изложенные в предыдущей главе для построения теории прыжковой проводимости (ПП). ПП принято называть перенос тока за счет перескоков носителей между различными локализованными состояниями. Этот тип проводимости был предсказан Гудденом и Шотки ⁴⁰ и обнаружен сначала в карбиде кремния и в германии. В дальнейшем ПП наблюдалась и изучалась практически во всех кристаллических полупроводниках. В самые последние годы ПП обнаружена и в большом числе аморфных полупроводников, где она занимает гораздо больший температурный интервал и играет, соответственно, значительно более важную роль. Сначала мы коротко изложим экспериментальные факты. Более подробное их изложение можно найти в обзорах ^{17, 41} и книге ⁴².

а) Основные экспериментальные данные

Начнем с кристаллических полупроводников. При комнатных и более низких температурах проводимость большинства полупроводников связана с присутствием примесей, создающих локальные уровни в запрещенной зоне. Отдельный примесный атом можно характеризогать энергией ионизации E_0 и расстоянием *a*, на котором спадает волновая функция локализованного примесного состояния. Если концентрация примесей N не очень велика, так что $Na^3 \ll 1$, то примесные состояния слабо перекрываются и сохраняют свою индивидуальность. Проводимость таких слабо легированных полупроводников при сравнительно высоких температурах осуществляется носителями тока, термическим образом заброшенными с примесных уровней в разрешенные зоны. При понижении температуры концентрация электронов в зоне проводимости становится настолько малой (для определенности мы говорим об электронном полупроводнике), что больший вклад в ток начинают вносить прыжки электронов



Рис. 3. Зависимость удельного сопротивления от температуры для Ge *p*-типа со степенью компенсации $K = 0.4^{43}$.

Концентрации акцепторов в образцах $1-11$ ны (в см $^{-3}$): $1-7.5 \cdot 10^{14}$, $2-1.4 \cdot 10^{15}$, $3-1.5$	рав-
A 9 66 4015 E 9 6 4015 6 1 9 4015 7 79	1015
4-2,00.10-,, 0	10,
$8 - 9.0 \cdot 10^{15}$, $9 - 1.4 \cdot 10^{16}$, $10 - 2.4 \cdot 10^{16}$,	11
3 5 1010	

непосредственно по донорам, происходящие за счет малого, но конечного перекрытия волновых функций соседних примесей. Переход от проводимости по разрешенной зоне к ПП по мере понижения температуры хорошо виден на рис. З, где приведены типичные для всех слабо легированных полупроводников температурные зависимости удельного сопротивления германия ⁴³. В области ПП удельная электропроводность имеет вил

$$\sigma = \sigma_3 \exp\left(-\frac{\varepsilon_3}{T}\right). \quad (4.1)$$

Индекс «З» принято использовать для характеристик ПП слабо легированных полупроводников ⁴¹.

Необходимым условием ПП является наличие свободных мест на донорах. При низких температурах оно может быть обеспечено только компенсацией полупроводника, т. е. присутствием некоторой концеитрации неосновных примесей. Например, акцепторы в электронном полупроводнике захватывают часть электронов с доноров и заряжаются отрицательно. В результате возникает такое же число пустых (положительно

заряженных) доноров. На этом, однако, роль компенсации не исчерпывается. Возникшие благодаря компенсации заряженные доноры и акцепторы своим хаотическим потенциалом создают разброс уровней доноров, который значительно превышает экспоненциально малое расщепление уровней соседних доноров, связанное с перекрытием волновых функций. Это препятствует квантовому «расплыванию» электрона по донорам и приводит к локализации состояний, соответствующих отдельным донорам ². Вследствие разброса уровней переход электрона от одного донора к другому возможен лишь с поглощением или испусканием фононов. Поэтому ПП, как и зонная проводимость слабо легированного полупроводника, обладает активационной зависимостью от температуры.

На рис. З видна еще одна характерная черта ПП: исключительно сильная зависимость величины σ_3 от концентрации примеси. Физическая причина этого явления состоит в том, что с уменьшением концентрации расстояния между донорами возрастают, и вероятности перескоков между соседними донорами экспоненциально убывают.

К настоящему времени уже накоплено большое количество экспериментальных данных о зависимости величин σ_3 и ε_3 от концентрации, степени компенсации, химической природы примесей, деформации и магнитного поля ^{17, 41}.

В аморфных полупроводниках об электронных состояниях, по которым происходят прыжки, известно значительно меньше, чем в кристаллических. Эти состояния связаны не с примесями, а с флуктуациями структуры или стехиометрического состава. Плотность состояний вблизи расположенного по середине запрещенной зоны уровня Ферми достаточно мала, чтобы состояния были локализованы.

Температурная зависимость ПП аморфных полупроводников ⁴⁴ отличается от (4.1) и, по-видимому, с хорошей точностью соответствует закону

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left[-\left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/4}\right], \qquad (4.2)$$

предложенному Моттом ⁴⁵. Это отличие, однако, связано не с качественными особенностями электронных состояний, а с чисто количественным различием между энергетическими и пространственными масштабами в обоих случаях. Подтверждением этой точки эрения является то, что и в слабо легированных полупроводниках при сверхнизких температурах T < 1 °K закон (4.1) сменяется зависимостью типа (4.2) ⁴⁶⁻⁴⁸. Ниже мы увидим, что единый метод, основанный на теории протекания, позволяет в различных температурных интервалах получить и режим постоянной энергии активации (4.1) и закон Мотта (4.2).

б) Случайная сетка сопротивлений

Важный вклад в теорию ПП внесли Миллер и Абрахамс¹³. Они показали, что задачу можно свести к вычислению проводимости случайной сетки сопротивлений, каждое из которых связано с перескоком между определенной парой доноров. Наиболее простое и общее доказательство аналогии с сеткой сопротивлений имеется в работе¹². Ниже мы лишь кратко проследим путь сведения задачи к этой эквивалентной схеме.

Рассмотрим два донора с номерами i и j, расположенные в точках \mathbf{r}_i и \mathbf{r}_j и обладающие энергиями ε_i и ε_j . Разности энергий | $\varepsilon_i - \varepsilon_j$ | в типичных полупроводниках намного меньше дебаевской температуры. При этом процессы перескока происходят с поглощением или испусканием одного фонона. Пусть электронный спектр изотропен, так что волновая функция донора имеет вид

$$\psi_j(r) = \pi^{-1/2} a^{-3/2} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j|}{a}\right).$$
 (4.3)

Тогда расчет в первом порядке теории возмущений по деформационному взаимодействию продольных акустических фононов с электронами дает для числа переходов между донорами *i* и *j* в единицу времени

$$\Gamma_{ij} = \gamma_{ij} e^{-2r_{ij}/a} f_i (1-f_j) \begin{cases} \mathscr{N} (\varepsilon_j - \varepsilon_i) & \text{(поглощение)}, \\ \mathscr{N} (\varepsilon_i - \varepsilon_j) + 1 & \text{(излучение)}, \end{cases}$$
(4.4)

где $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, множитель $\exp(-2r_{ij}/a)$ связан с перекрытием волновых функций электронов на примесях *i* и *j*, $\mathscr{N}(\varepsilon)$ — планковская функция, f_i — функция заполнения состояния *i*. Множитель γ_{ij} степенным образом зависит от r_{ij} и $\varepsilon_i - \varepsilon_j$. Его явный вид приведен в работе ¹³. В равновесии имеем

$$f_i = f^0(\varepsilon_i) = \left[1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{\varepsilon_i - \mu}{T}\right)\right]^{-1}, \qquad (4.5)^*$$

где μ — химический потенциал. При этом частоты переходов $i \rightarrow j$ и $j \rightarrow i$ равны друг другу и ток отсутствует. Электрическое поле приводит к двум изменениям в Γ_{ij} . Во-первых, под действием поля изменяются энергии донорных состояний и, следовательно, энергия участвующего в процессе перескока фонона. В слабом электрическом поле Е фононная система остается в равновесии. Поэтому первое изменение сводится к добавлению в аргумент планковской функции слагаемого $e \mathbf{Er}_{ij}$. Второе изменение заключается в том, что поле перераспределяет электроны по донорам, т. е. создает добавки δf_i к функциям (4.5). Запишем эти добавки в виде

$$f_i(\varepsilon) = f^0(\varepsilon_i) + \delta f_i = \left[1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{\varepsilon_i - \delta \mu_i - \mu}{T}\right)\right]^{-1}.$$
 (4.6)

Если подставить (4.6) в (4.4) и учесть изменения в аргументах планковских функций, то баланс между переходами $i \rightarrow j$ и $j \rightarrow i$ нарушится и между донорами *i* и *j* потечет ток. В линейном по Е и $\delta\mu$ приближении прямое вычисление приводит к следующему выражению для избыточного числа электронов, переходящего в единицу времени с донора *i* на донор *j*:

$$\Gamma_{ij}(\mathbf{E}) - \Gamma_{ji}(\mathbf{E}) = \frac{\Gamma_{ij}^{0}}{T} \left(e \mathbf{E} \mathbf{r}_{ij} + \delta \mu_{i} - \delta \mu_{j} \right), \qquad (4.7)$$

где Γ_{ij}^0 — частота переходов $i \nleftrightarrow j$ в равновесии. Множитель в скобках (4.7) можно рассматривать как разность электрохимических потенциалов между донорами *i* и *j*. Тогда величину

$$R_{ij} = \frac{T}{e^2 \Gamma_{ij}^0} \tag{4.8}$$

естественно интерпретировать как сопротивление, включенное между донорами *i* и *j*. Подставляя равновесные функции распределения в (4.7), (4.8) при $T \ll |\varepsilon_i - \mu|$, запишем R_{ij} в виде

$$R_{ij} = R_{ij}^{(0)} \exp \xi_{ij}, \qquad (4.9)$$

где

$$\xi_{ij} = \frac{2r_{ij}}{a} + \frac{\varepsilon_{ij}}{T}, \qquad (4.10)$$

$$R_{ij}^{(0)} = \frac{T}{e^2 \gamma_{ij}} , \qquad (4.11)$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(|\varepsilon_i - \mu| + |\varepsilon_j - \mu| + |\varepsilon_i - \varepsilon_j| \right). \tag{4.12}$$

Итак, мы получили сетку сопротивлений R_{ij} , соединяющих случайно расположенные узлы (примеси). Величины $\delta \mu_i$ должны быть найдены из условия равенства входящего и выходящего тока в каждом узле (первый закон Кирхгофа) и из условия равенства суммы электрохимических потенциалов в любом замкнутом контуре, приложенным в этом контуре э. д. с. (второй закон Кирхгофа).

Важной особенностью рассматриваемой сетки является чрезвычайно широкий спектр значений R_{ij} . Действительно, в типичной для экспериментов со слабо легированными полупроводниками ситуации среднее расстояние между примесями $N^{-1/3}$ составляет $6 \div 12$ боровских радиусов а. При этом сопротивлении пары с $r_{ij} = N^{-1/3}$ и пары с $r_{ij} = 2N^{-1/3}$ отличаются в e^{12+24} раз. К сильному разбросу при достаточно низких температурах приводит и энергетическое слагаемое (4.10). Таким образом,

412

рассматриваемая сетка представляет собой идеальный объект для применения метода протекания, изложенного в главе 3. В соответствии с этим методом для нахождения показателя экспоненты удельной электропроводности сначала мысленно разорвем все сопротивления. Затем включим все сопротивления с $\xi_{ij} < \xi$ и будем увеличивать ξ до тех пор, пока не возникнет протекание по включенным сопротивлениям. Если пороговое значение есть ξ_{ci} , то

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left(-\xi_c\right). \tag{4.13}$$

Для нахождения ξ_c должна быть, очевидно, решена следующая задача теории протекания. Даны случайные точки (узлы) с концентрацией N и заданным распределением энергий ε_i . Две точки считаются связанными, если

$$\xi_{ij} = \frac{2r_{ij}}{a} + \frac{\varepsilon_{ij}}{T} \leqslant \xi. \tag{4.14}$$

Требуется найти пороговое значение ξ , при котором связанные точки впервые образуют бесконечный кластер. Эта задача является частным случаем третьего класса задач теории протекания — задач на случайных узлах. В общем случае левая часть критерия связанности (4.14) может быть произвольной функцией r_i , r_j , ε_i , ε_j и зависеть не только от этих, но и от других характеристик узлов. Как мы увидим, задачи этого класса играют исключительно важную роль в теории ПП.

в) Концентрационная зависимость прыжковой проводимости

Как говорилось в разделе а), экспоненциальная зависимость ПП от концентрации содержится в величине σ_3 . Для ее вычисления следует рассмотреть температуры, при которых характерные значения $\varepsilon_{ij}/T < 1$. Тогда критерий связанности имеет вид

$$r_{ij} \leqslant \frac{\xi a}{2} \equiv r, \tag{4.15}$$

т. е. данный узел связан со всеми узлами, лежащими внутри описанной вокруг него сферы с радиусом r. При некотором пороговом значении r_с параметра r впервые возникают бесконечные последовательности узлов, в которых каждый следующий узел лежит внутри сферы, описанной вокруг предыдущего. Согласно (4.15)

$$\xi_c = \frac{2r_c}{a} \tag{4.16}$$

и, следовательно,

$$\sigma_3 = \sigma_0 e^{-2r_c/a}.\tag{4.17}$$

Как мы видели на примере *p*-Ge (см. рис. 3), концентрационная зависимость σ_3 исключительно ярко выражена, так что вопрос о радиусе протекания r_c является актуальным. Величина r_c вычислялась многократно и весьма тщательно ^{5, 49-56}. Результаты различных авторов сопоставляются в работе ⁵⁴. Согласно ⁵⁴

$$r_c = (0.87 \pm 0.01) N^{-1/3}. \tag{4.18}$$

Если результаты ^{53, 55} экстраполировать к бесконечному массиву по закону, найденному в ⁵⁴, то они оказываются близкими к (4.18). Подстановка (4.18) в (4.17) дает

$$\sigma_3 = \sigma_0 \exp\left(-\frac{\alpha N^{-1/3}}{a}\right), \qquad (4.19)$$

где $\alpha = 1,74 \pm 0,02$. Ревультат (4.19) проверялся непосредственным решением на ЭВМ системы уравнений Кирхгофа для случайной сетки с сопротивлениями $R_{ij} = R_0 \exp\left(\frac{2r_{ij}}{a}\right)^{39}$. Расчетная зависимость удельного сопротивления сетки от концентрации примесей хорошо согласуется с формулой (4.19).

Обработка экспериментальных данных для p-Ge, приведенных на рис. 4, показывает, что $\ln \sigma_3$ является линейной функцией $N^{-1/3}$.



Рис. 4. Проводимость $\sigma_3 p$ -германия с примесью галлия как функция концентрации галлия по данным ⁴³. Степень компенсации всех образцов K = 0,4.

Наклон прямой позволяет 'с помощью известного значения боровского радиуса акцептора определить α . Согласно ¹⁷, $\alpha = 1,9 \pm 0,1$. К такому же значению (но уже с неопределенностью ~0,2) приводит обработка данных для *p*-Si и *n*-GaAs ^{17, 57}. Незначительное превышение экспериментального значения над теоретическим в принципе можно отнести за счет небольшой корреляции в расположении примесей, вызванной их отталкиванием в расплаве.

В упомянутых выше экспериментах волновая функция примеси вдали от центра с хорошей точностью совпадает с (4.3). Однако во многих полупроводниках, например, *n*-Ge-и *n*-Si-волновые функции примесей сильно анизотропны.

Сильная анизотропия может быть умышленно создана сильным магнитным полем или одноосной деформацией при исследовании эффектов магнето-и пьезосопротивления в полупроводниках с исходно изотропными волновыми функциями.

В случае анизотропных волновых функций ψ_i (r) слагаемое $2r_{ij}/a$ в ξ_{ij} заменяется более сложной функцией φ (\mathbf{r}_{ij}), совпадающей с показателем экспоненты величины $|\int \psi_i \psi_j d^3r |^2$. Для нахождения σ_3 теперь следует решить задачу теории протекания с критерием связанности

$$p(\mathbf{r}_{ij}) \leqslant \xi, \tag{4.20}$$

который выполняется, когда r_{ij} лежит не внутри сферы, а внутри замкнутой поверхности S_{ξ} более сложной формы. Объем V_{ξ} , ограниченный поверхностью S_{ξ} , возрастает с увеличением параметра ξ . Необходимо найти критическое значение $\xi = \xi_c$, при котором впервые возникает БК связанных узлов. Величина σ_3 по-прежнему определяется формулой (4.13).

Порог протекания ξ_c удобно характеризовать средним числом связей, выходящих из одного узла $B_c = NV_{\xi_c}$. Аналогичную величину $B_c = (4\pi/3) Nr_c^3 \approx 2.8$ можно ввести и для задач сфер (4.15). Величина B_c в принципе может зависеть от формы поверхности S_{ξ} . В работах ^{17, 58} было доказано, что для всех поверхностей, получающихся друг из друга линейным преобразованием координат, например, для сферы и любого эллипсоида, величины B_c одинаковы. В работе ⁵³ методом Монте-Карло вычислены значения B_c для поверхностной, существенных в описанных ниже приложениях, и ряда других поверхностей. Оказалось, что для выпуклых поверхностей (включая сферу) величины B_c одинаковы с точностью до 3%, т. е. B_c является приближенным инвариантом, аналогичным zx_c (b) для задачи связей. Вычисления B_c для вогнутых поверхностей, по-видимому, указывают на то, что с увеличением вогнутости величина B_c уменьшается, но не более чем на 10-20%.

Рассмотрим основные приложения метода протекания для анизотропных волновых функций примесей. В работе ⁵³ метод применяется для описания концентрационной зависимости σ_3 для *n*-Ge, где S_{ξ} представляет собой огибающую поверхность четырех пересекающихся сплюснутых эллипсоидов вращения, оси которых направлены по направлениям (111). Для этой поверхности было вычислено B_c , что позволило произвести сравнение с экспериментом. В работах ^{17, 53} вычислялась концентрационная зависимость σ_3 для одноосно деформированных *n*- и *p*-Ge. Эта зависимость возникает благодаря перестройке электронного спектра под действием деформации и изменению формы и объема волновой функции. Как в деформированном, так и в недеформированном германии метод протекания приводит к удовлетворительному согласию с экспериментальными данными *).

r) Теория прыжкового магнетосопротивления

Наиболее интересным и результативным оказывается применение метода протекания для анизотропных волновых функций к теории гигантского магнетосопротивления ^{58, 61}. Как известно, сильное магнитное поле сжимает волновые функции примесных электронов в поперечном направлении, превращая их в простейшем случае из сферически симметричных в сигарообразные. При этом перекрытие «хвостов» волновых функций соседних примесей в среднем резко уменьшается, что приводит к экспоненциальному возрастанию прыжкового сопротивления. Экспоненциально большое положительное магнетосопротивление наблюдалось в *n*-InSb ⁶², *n*-Ge ⁶³, *p*-Ge ^{64, 65}, *n*-InP ⁶⁶, *n*-GaAs ^{67, 68}. В работах ^{62, 67} в максимальных магнитных полях 28 кэ и 140 кэ, соответственно, достигалось увеличение сопротивления в 10⁵ раз. Теория исходит из выражений для «хвостов» волновых функций водородоподобного центра в магнитном поле. На сравнительно малых расстояниях от центра $r < \lambda^2/a$ ($\lambda = \sqrt{ch/eH}$ — магнитная длина) показатель экспоненты волновой функции приобретает слагаемое, малое по сравнению с основным:

$$\psi(r) \sim \exp\left(-\frac{r}{a} - \frac{r^3 a \sin^2 \vartheta}{24\lambda^4}\right),$$
(4.21)

где ϑ — угол между вектором **r** и осью *z*, которая совпадает с направлением магнитного поля (ядро находится в начале координат). На больших расстояниях $r > \frac{\lambda^2}{a}$ магнитное поле полностью перестраивает показатель экспоненты волновой функции

$$\psi(r) \sim \exp\left(-\frac{|z|}{a_H} - \frac{x^2 + y^2}{4\lambda^2}\right),\tag{4.22}$$

где $a_H = [2mE(H)]^{-1/2}\hbar$, m -эффективная масса, E(H) -энергия связи водородоподобного центра в магнитном поле H. Какая из формул (4.21) и (4.22) должна использоваться для вычисления интеграла перекрытия.

^{*)} Пользуясь случаем, исправим ощибку, допущенную при построении графиков зависимости $\ln \sigma_3$ от $N^{-1/8}$ для германия с примесями сурьмы и фосфора ¹⁷, ⁵⁹. Из исходных экспериментальных данных ⁵⁹, ⁶⁰ следует, что $\ln \sigma_3 = (-3 \pm 0.1) \cdot 10^6 (c_{M}^{-1}) N^{-1/8}$ пля сурьмы и $\ln \sigma_3 = -(3.6 \pm 0.2) \cdot 10^6 (c_{M}^{-1}) N^{-1/3}$ для фосфора, вместо зависимостей, приведенных в ⁵³.

Зависит от соотношения среднего расстояния между примесями $N^{-1/3}$ и величины λ^2/a . При заданной концентрации примесей формулы (4.21) работает в сравнительно слабых полях ($H < H_c \equiv N^{1/3}c\hbar/ea$), а формула (4.22) — в сильных полях ($H > H_c$). С помощью (4.21) и (4.22) вычисляется входящая в критерий связанности функция $\varphi(r_{ij})$ (показатель экспоненты величины $|\int \psi_i \psi_j d^3 r |^2$). При $H < H_c$ поверхность S_{ξ} оказывается слабо вытянутым по оси z эллипсоидом вращения. В сильных полях S_{ξ} представляет собой два одинаковых усеченных параболоида вращения, сложенных основаниями. Как уже говорилось выше, для этих поверхностей $B_c \approx 2.8$. Вычисляя в каждом случае объем поверхности $V(\xi, H)$, находя ξ_c из условия $NV(\xi_c, H) = B_c$ и подставляя ξ_c в (4.13), получаем ⁵⁸, ⁶¹

$$\sigma_3(H) = \sigma_3(0) \exp\left(-0.04 \frac{ae^2}{Nc^2\hbar^2} H^2\right) \qquad (H < H_c), \qquad (4.23)$$

$$\sigma_3(H) \sim \exp\left[-0.95 \left(N a_H \lambda^{-1/2}\right]\right] \qquad (H > H_c).$$
 (4.24)

В пределе очень сильных магнитных полей, когда $E(H) = E_0 \ln^2 (a/\lambda)^2$, формула (4.24) дает

$$\sigma_{3} \sim \exp\left(-\operatorname{const} \cdot \sqrt{H} \sqrt{\ln H}\right) \tag{4.25}$$

Степень согласия формул (4.23)—(4.25) с экспериментальными данными в целом можно считать удовлетворительной ^{17, 58}.

Результат, подобный (4.23), был впервые получен Микошибой ⁶⁹. Однако из-за грубых приближений, сделанных при нахождении волновых функций и отсутствия методики усреднения, основанной на соображениях протекания, численный коэффициент в показателе экспоненты у Микопибы оказался в два раза больше, чем в (4.23).

к Интересно отметить, что результаты (4.23)—(4.25) в равной мере относятся как к поперечному, так и продольному магнетосопротивлению. На первый взгляд это может показаться парадоксальным. Ведь волновые функции примесей в магнитном поле сильно вытянуты вдоль поля и вероятность прыжка на заданное расстояние в продольном направлении экспоненциально превышает вероятность прыжка в поперечном направлении. Если бы для продольной проводимости использовались цепочки, состоящие из продольных перескоков, а для поперечной — из поперечных перескоков, экспоненциальное отличие должно было бы сохраняться и в выражениях для проводимости. Из идеологии метода протекания, однако, вытекает, что поскольку за порогом протекания образуется кластер, бесконечный во всех направлениях, электропроводность этого кластера во всех направлениях определяется одними и теми же сопротивлениями с $\xi_{ij} = \xi_c$. Этот вывод хорошо согласуется с результатами Сладека 62, который наблюдал в n-InSb возрастание сопротивления в 10⁵ раз при разнице между продольным и поперечным эффектом в 2-3 раза. Более подробно характер продольной и поперечной электропроводности рассмотрен в работе ¹⁷.

д) Температурная зависимость прыжковой проводимости

В этом разделе мы покажем, как с помощью заданного распределения энергетических уровней определить экспоненциальную температурную зависимость прыжковой проводимости. В соответствии с общим рецептом, изложенным в разделе б), для этого следует найти величину ξ_c , учитывая в условии связанности (4.14) величины ε_{ij}/T . Ниже мы покажем, что если температура и функция распределения величин є_і таковы, что для соседних примесей

$$\frac{\varepsilon_{ij}}{T} \ll \frac{2r_{ij}}{a} \tag{4.26}$$

то температурная зависимость проводимости имеет вид (4.1). Следуя работе ⁷⁰, мы дадим рецепт нахождения энергии активации ε_3 в этом случае. Если неравенство (4.26) не выполняется и плотность состояний вблизи уровня Ферми можно считать не зависящей от энергии, то имеет место закон Мотта (4.2). Когда плотность состояний вблизи уровня Ферми меняется по степенному закону, показатель степени в (4.2) имеет другой вид ¹⁴, ⁷⁰⁻⁷².

Начнем со случая, когда выполняется неравенство (4.26). В этих условиях член ε_{ij}/T в (4.14) приводит к возникновению относительно малой добавки к ξ_c , ответственной, однако, за всю экспоненциальную температурную зависимость электропроводности.

Прежде чем переходить к нахождению этой добавки, обсудим статистические свойства величин ε_{ij} . Простейшей является ситуация, в которой энергии ε_i для различных узлов независимы и распределены одинаковым образом. В этом случае, хотя распределение ε_{ij} для всех пар одинаково, величины ε_{ij} и ε_{jk} для двух пар, имеющих общий узел, оказываются в соответствии с (4.12) коррелированными. Более реалистической является ситуация, когда энергии ε_i и ε_j коррелированы, причем степень корреляции зависит от расстояния r_{ij} . Характерное расстояние, вплоть до которого имеет место корреляция, мы будем называть корреляционной длиной r_0 . Благодаря корреляции энергий функция распределения ε_{ij} оказывается различной для пар с разными расстояниями r_{ij} , и для недостаточно удаленных друг от друга пар величины ε_{ij} оказываются коррелированными.

Имея в виду вернуться к реальной ситуации, рассмотрим сначала гипотетический случай, когда распределения величин ε_{ij} для всех пар одинаковы и независимы. В этом случае величина ξ_c целиком определяется функцией распределения ε_{ij} . Дальнейшее рассмотрение основано на предположении, что ξ_c можно разложить в ряд по моментам функции распределения

$$\frac{\xi_c}{\xi_c^0} = 1 + A \frac{\langle \varepsilon_{ij} \rangle}{\xi_c^0 T} + B \left\langle \left(\frac{\varepsilon_{ij}}{\xi_c^0 T} \right)^2 \right\rangle + c \left\langle \left(\frac{\varepsilon_{ij}}{\xi_c^0 T} \right) \right\rangle^2, \qquad (4.27)$$

где знак $\langle ... \rangle$ означает усреднение. Чтобы определить коэффициент A, предположим, что все ε_{ij} одинаковы и равны ε' . Тогда, пренебрегая квадратичными по ε_{ij}/T членами (4.27), получаем $\xi_c = \xi_c^o + A (\varepsilon'/T)$. С другой стороны, непосредственно из определения ξ_c очевидно, что в этом случае $\xi_c = \xi_c^o + (\varepsilon'/T)$. Следовательно, A = 1 и для произвольной функции распределения формула (4.27) с точностью до линейных членов приобретает вид $\xi_c = \xi_c^0 + (\langle \varepsilon_{ij} \rangle/T)$. Согласно (4.13) это означает, что

$$\boldsymbol{\varepsilon}_3 = \langle \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} \rangle. \tag{4.28}$$

Покажем теперь, что изложенный выше метод теории возмущений применим и в более сложной ситуации, когда $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$ зависит от r_{ij} и значения ε_{ij} , принадлежащие разным узлам, коррелированы. Прежде всего заметим, что введение малого члена ε_{ij}/T в (4.14) нарушает условие связанности узлов, только если величина $2r_{ij}/a$ очень близка к ξ_c^o , т. е. $r_{ij} \approx r_c$. Пары с таким значением r_{ij} редки и расположены на большом расстоянии друг от друга. В разделе «е» мы приведем аргументы в пользу того, что существенной для протекания оказывается лишь ничтожная доля этих пар.

2 УФН, т. 117, выц. 3

Отсюда следует два важных вывода. Во-первых, в предложенной выше теории возмущений величины ε_{ij} можно считать некоррелированными и при конечном значении длины корреляции r_0 . Важно только, чтобы величина r_0 была меньше расстояния между существенными для протекания точками. Во-вторых, если при этом величина $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$ зависит от r_{ij} , то можно, аналогично (4.27), разложить ξ_c по моментам функции распределения величин ε_{ij} при $r_{ij} = r_c$. В результате получаем

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{3} = \langle \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} \rangle_{\boldsymbol{r}_{ij} = \boldsymbol{r}_{c}}. \tag{4.29}$$

В работе ⁷⁰ формула (4.29) проверялась с помощью расчета на ЭВМ методом Монте-Карло.

Рассмотрим теперь другой случай, когда для соседних узлов имеет место неравенство, обратное (4.26). В этом случае сопротивления, связывающие соседние узлы, определяются множителем $\exp(\varepsilon_{ij}/T)$. В то же время среди пар узлов с достаточно большим расстоянием r_{ij} всегда можно найти такие пары, у которых энергии ε_i и ε_j близки к уровню Ферми и величины ε_{ij} малы. Для таких пар вклад слагаемого ε_{ij}/T в ξ_{ij} уменьшается, но величина слагаемого $2r_{ij}/a$ растет. Благодаря конкуренции между этими слагаемыми оптимальными оказываются перескоки, для которых оба слагаемых имеют один порядок величины. Эти соображения принадлежат Мотту⁴⁵, который нашел характерную длину оптимальных перескоков и получил закон (4.2), носящий его имя.

Строгий вывод (4.2) на основе метода протекания был дан Амбегаокаром и др. ¹². Перейдем к его изложению. Введем максимальные значения величины ε_{ij} и расстояния r_{ij} , допускаемые условием связанности (4.14),

$$r_{\max} = \frac{a\xi}{2}, \quad \varepsilon_{\max} = T\xi. \tag{4.30}$$

Для выполнения (4.14) необходимо (но не достаточно), чтобы каждая из величин | $\varepsilon_i - \mu$ | и | $\varepsilon_j - \mu$ | не превосходила ε_{max} . В основе вывода закона Мотта лежит важное предположение о том, что плотность состояний $g(\varepsilon)$ можно считать константой в интервале энергий порядка ε_{max} по обе стороны уровня Ферми. В этом случае концентрацию узлов, попадающих в полосу | $\varepsilon_i - \mu$ | $\leq \varepsilon_{max}$, можно записать в виде

$$n = 2g(\mu) \epsilon_{\max}. \tag{4.31}$$

Введем теперь безразмерные переменные

$$\mathbf{s}_i = \frac{\mathbf{r}_i}{r_{\max}}, \quad \Delta_i = \frac{\varepsilon_i - \mu}{\varepsilon_{\max}}.$$
 (4.32)

Тогда условие связанности (4.14) примет вид

$$s_{ij} + \Delta_{ij} \ll 1, \tag{4.33}$$

где

$$s_{ij} = |\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j| = \frac{r_{ij}}{r_{\max}} \cdot \Delta_{ij} = \frac{1}{2} \{ |\Delta_i| + |\Delta_j| + |\Delta_i - \Delta_j| \} = \frac{\varepsilon_{ij}}{\varepsilon_{\max}} \cdot (4.34)$$

Концентрация узлов в безразмерном *s*-пространстве в полоске энергий $|\Delta_i| < 1$ равна

$$\mathcal{N} = 2g(\mu) \varepsilon_{\max} r_{\max}^3 = \frac{1}{4} g(\mu) \xi^4 a^3 T.$$
 (4.35)

Для того чтобы найти ξ_c , следует определить безразмерную пороговую концентрацию \mathscr{N}_c , при которой впервые возникает протекание в системе

случайно расположенных узлов со случайно распределенными в интервале от—1 до+1 энергиями Δ_i и с критерием связанности (4.33). Поскольку условия задачи не содержат параметров, величина \mathcal{N}_c должна быть порядка единицы. Выражая с помощью (4.35) ξ_c через \mathcal{N}_c , получаем

$$\xi_{c} = \left(\frac{4 \mathcal{N}_{c}}{g(\mu) T a^{3}}\right)^{1/4}.$$
(4.36)

Подстановка ξ_c в (4.13) приводит к формуле (4.2) со значением

$$T_{0} = \frac{4\mathcal{N}_{c}}{g(\mu) a^{3}} \,. \tag{4.37}$$

В работе ¹² приведена лить оценка $\mathscr{N}_c = 4$. Другие оценки \mathscr{N}_c ^{14, 73} лежат в интервале 2 ÷ 7. Сформулированная выше задача теории протекания для определения \mathscr{N}_c решалась методом Монте-Карло в работе ⁷⁴. Среднее значение \mathscr{N}_c по 10 различным реализациям случайных величин оказалось равным 5,7 ± 0,3. Экстраполяция к бесконечному массиву не производилась. Если произвести экстраполяцию с помощью закона, предложенного в работе ⁵⁴, то получается $\mathscr{N}_c = 5,3 \pm 0,3$.

Кроме предположения о постоянстве плотности состояний при выводе закона Мотта, используется предположение об отсутствии корреляция энергий узлов, лежащих в полоске $|\varepsilon_i - \mu| < \varepsilon_{max}$. Это возможно в том случае, когда характерное расстояние между этими узлами $r_{max} = a\xi_c/2 =$ $= a (4N_c/g(\mu) Ta^3)^{1/4}$ превосходит длину корреляций r_0 энергий узлов ε_i . Если $r_0 \gg N^{-1/3}$, то между областями применимости (4.1) и (4.2) может существовать интервал температур с другой температурной зависимостью (см., например, ⁷⁵).

e) Энергия активации слабо легированных полупроводников

🗯 В этом разделе мы применим общий рецепт вычисления энергии активации (4.29) к конкретной физической системе — слабо легированному компенсированному полупроводнику. Для этого необходимо прежде всего изучить распределение электронных состояний по энергиям и найти положение уровня Ферми при низких температурах. Для определенности мы будем говорить о полупроводнике п-типа. При низких температурах каждый акцептор принимает электрон от донора и заряжается отрицательно. Доноры, отдавшие электрон, заряжены положительно. В слабо легированном полупроводнике эти хаотически расположенные примеси и создают основной разброс по энергиям электронных состояний. Очень важно, что заряженные акцепторы не могут изменить местоположение, а заряженный донор может стать нейтральным (и наоборот) за счет перескоков электронов по донорам. При T = 0 конфигурация заряженных доноров соответствует основному состоянию системы, вычисленному с учетом взаимодействия донорных электронов друг с другом и с акцепторами. Поэтому вычисление плотности состояний g (ε) и уровня Ферми μ представляет очень сложную многоэлектронную задачу. При сравнимых концентрациях доноров (N_D) и акцепторов (N_A) эта задача не имеет малого цараметра и не может быть решена аналитически. Одрако в случаях слабой (К = $\equiv N_A / N_D \ll 1$) и сильной $1 - K \ll 1$ компенсаций решения существуют ^{11, 76}. При $K \ll 1$ почти все донорные состояния заполнены, а при 1 — К « 1, наоборот, заняты лишь состояния, уровни которых сильно понижены потенциалом заряженных примесей. Поэтому при $K \ll 1$ уровень Ферми лежит выше уровня изолированной примеси, а при 1 - К 🐇 -2*

 $\ll 1$ — ниже этого уровня (см. рис. 5). Принимая уровень изолированной примеси за нуль отсчета энергии, мы можем сказать, что с ростом K величина µ убывает и при некоторой промежуточной компенсации меняет знак. При слабой компенсации K $\ll 1$ акцепторов и заряженных доноров мало, причем Заряженные доноры находятся около акцепторов, так как потенциал акцепторов отталкивает электроны. Около большинства акцепторов имеется один ионизованный донор, так как потенциал этого донора ослабляет действие акцептора и затрудняет ионизацию второго донора. Однако в силу случайного характера распределения примесей у некоторых акцеп-



Рис. 5. Энергетические схемы слабо и сильно компенсированных полупроводников в пренебрежении крупномасштабным потенциальным рельефом.

Сплошная линия — зона проводимости, штрих-пунктирная — уровень Ферми. Короткие черточки изображают уровни доноров, а темные кружки — занимающие их электроны. Справа изображена плотность состояний на донорных уровнях. Заполненные состояния заштрихованы. Валентная зона и акцепторные уровни не показаны. торов ближайший донор находится на столь значительном удалении, что энергетически более выгодной оказывается ионизация двух доноров у других Уровень Ферми акцепторов. определяется из условия, что полное число ионизованных доноров равно числу акцепторов, т. е. число акцепторов, ионизовавших два донора, равно числу акцепторов, не ионизовавших ни одного (в работе 76 показано, что ионизация трех доноров одним акцептором при $K \ll 1$ невозможна). Довольно сложный подсчет числа акцепторов обоих типов приводит к следующему значению:

$$\mu = 0.61\varepsilon_D, \qquad (4.38)$$
$$\varepsilon_D \equiv \frac{e^2}{\varkappa} \left(\frac{4\pi}{3}N_D\right)^{1/3}.$$

При сильной компенсации $(1 - K \ll 1)$ электроны находятся на самых глубоких уров-

нях, возникших в результате сильного (и, соответственно, маловероятного) сближения двух или нескольких доноров. Например, если имеется пара доноров, находящихся на расстоянии $r (a \ll r \ll N_D^{-1/3})$, то энергия единственного электрона на паре понижена на величину $e^2/\varkappa r$. Если изучаются сдвиги уровней, малые по сравнению с боровской энергией E_0 , то основной вклад в плотность состояний дают именно пары ¹¹ (а не тройки и четверки). Простой подсчет числа пар, создающих уровни в заданном интервале, позволяет определить плотность состояний при больших отрицательных энергиях и найти уровень Ферми ¹¹

$$g(\varepsilon) = \frac{2\pi N_D^2 e^6}{\varepsilon^4 \kappa^3}, \quad \mu = -\frac{\varepsilon_D}{2^{1/3} (1-K)^{1/3}}.$$
 (4.39)

Важной особенностью случаев сильной и слабой компенсации является то, что уровень Ферми находится в хвосте и удален от пика плотности состояний на расстояние, гораздо большее, чем полуширина пика (см. рис. 5). По этой причине для подавляющего большинства сопротивлений сетки в выражении (4.12) для ε_{ij} можно пренебречь энергиями ε_i и ε_j по сравнению с μ . Поэтому применение формулы (4.29) дает для энергии активации

$$\varepsilon_3 = |\mu| \tag{4.40}$$

или согласно (4.38) и (4.39)

$$\varepsilon_3 = 0.61 \varepsilon_D$$
 при $K \ll 1$, (4.41)
 $\varepsilon_3 = 2^{-1/3} \varepsilon_D (1-K)^{-1/3}$ при $1-K \ll 1$. (4.42)

Результат (4.40) можно наглядно интерпретировать. Концентрация электронов (при 1 — $K \ll 1$) или вакансий (при $K \ll 1$), заброшенных с уровня Ферми в пик плотности состояний, пропорциональна $e^{-|\mu|/T}$, а подвижность за счет перескоков по принадлежащим пику состояниям слабо зависит от температуры. Поэтому энергия активации проводимости совпадает с величиной | μ |.

До сих пор мы говорили о сдвигах уровней доноров, связанных с их ближайшим окружением. Благодаря дальнодействующему характеру кулоновского взаимодействия крупномасштабные флуктуации примесей (имеющие размер больший, чем среднее расстояние) могут привести к значительному разбросу уровней. При $K \ll 1$ этот потенциал дает поправку к формуле (4.41) порядка $K^{1/4}$ ⁷⁶. При 1 — $K \ll 1$ вклад крупномасштабных флуктуаций может изменить численный коэффициент в (4.42) при условии, что примеси расположены случайно. Если же в расположении примесей имеется корреляция, то при 1 — K « 1 крупномасштабные флуктуации могут отсутствовать и энергия активации определяется формулой (4.42). Такая корреляция возникает за счет взаимодействия примесей в расплаве и фиксируется благодаря тому, что диффузия примесей в процессе кристаллизации резко уменьшается 77. Корреляция отсутствует, например, в случае, когда примесные центры создают облучением при столь низких температурах, что эти центры неподвижны, или в случае узкозонного полупроводника, когда корреляция ослабляется собственными носителями, присутствующими при затвердевании образца 78.

Исследование свойств крупномасштабного потенциала содержится в работах^{11, 76}. Изложение этого вопроса не входит в рамки настоящего обзора. Мы сообщим лишь результаты цитированных работ и сосредоточим внимание на том, как по заданному распределению потенциала находить энергию активации.

При $K \ll 1$ крупномасштабный потенциал V (r) является гауссовым. Его функция распределения F(V) и характерный масштаб r_0 определяются соотношениями

$$F(V) = \frac{e}{\gamma \sqrt{\pi}} e^{-(eV)^2/\gamma^2}, \quad \gamma = 0,26\varepsilon_D K^{1/4}, \quad (4.43)$$

$$r_0 \approx N_D^{-1/3} K^{-1/2}.$$
 (4.44)

При сильной компенсации $1 - K \ll 1$ потенциал не является гауссовым. Он содержит все пространственные гармоники с масштабом, меньшим, чем r_0 . Максимальный масштаб r_0 определяется электронным экранированием, которое оказывается в этом случае нелинейным. Амплитуда потенциала увеличивается с масштабом, так что максимальный размах потенциала γ имеют флуктуации с размером r_0 . Согласно работе ¹¹

.

$$\gamma \simeq \frac{e^2 N_D^{1/3}}{\kappa (1-K)^{1/3}}, \quad r_0 \approx N_D^{-1/3} (1-K)^{-2/3}.$$
 (4.45)

С учетом крупномасштабного потенциала энергия подавляющего большинства уровней равна не нулю, как это было принято при выводе (4.40), а величине eV(r). Эта величина мало меняется на расстояниях, малых по сравнению с r_0 . Поскольку и при $K \ll 1$ и при $1 - K \ll 1$ величина $r_0 \gg N_D^{-1/3}$ для переходов между соседними примесями, можно пренебречь разностью $\varepsilon_i - \varepsilon_i$ в (4.12). Тогда величина

$$\varepsilon_{ij} = |\mu - eV(r)| \qquad (4.46)$$

не зависит от г_{іі}.

Посмотрим теперь, как меняет крупномасштабный потенциал результаты (4.40) при $K \ll 1$ и 1 — $K \ll 1$. В соответствии с (4.29) мы должны усреднить величину (4.46) с функцией распределения крупномасштабного потенциала F(V). Если $K \ll 1$, то благодаря симметрии F(V) относительно нуля результат с экспоненциальной точностью совпадает с (4.41). При 1 — $K \ll 1$ явный вид функции распределения не известен. Известно лишь то, что $F(V) \equiv 0$ при $eV(r) < \mu^{11}$. Поэтому усреднение (4.46) дает

$$\varepsilon_{3} = |\mu - e\langle V(r)\rangle| = C_{1} \frac{\varepsilon_{D}}{(1-K)^{1/3}}, \qquad (4.47)$$

где C₁ — неизвестная константа порядка единицы.

При $K \rightarrow 0$ и $K \rightarrow 1$ корреляционная длина потенциала r_0 согласно (4.44) и (4.45) бесконечно возрастает. Из сказанного в разделе г) следует, что при некотором критическом значении го формула (4.29) становится неприменимой. Не останавливаясь сейчас на отыскании этой критической величины, перейдем к изложению макроскопического подхода, позволяющего вычислить энергию активации при еще больших значениях r_o. Рассмотрим объем, линейные размеры которого малы по сравнению с r₀, так что все е_і, внутри него можно считать одинаковыми. С другой стороны, пусть этот объем будет достаточно большим в том смысле, что дисиерсия порога протекания ξ_c , связанная с его конечностью, мала по сравнению с характерными значениями у/Т. Тогда можно ввести понятие локальной проводимости, зависящей от координат по закону $\exp \left[-\varepsilon_3(r)/T\right]$, где по аналогии с (4.40) $\varepsilon_3(r) = |\mu - eV(r)|$. Для вычисления эффективной электропроводности полупроводника теперь можно применить метод протекания в его континуальной формулировке (глава 3).

В случае сильной компенсации практически во всем пространстве $eV(r) > \mu$. Поэтому низкоомными являются области с малыми значения-ми eV(r) и энергия активации $\varepsilon_3 = eV_c - \mu$, где V_c , согласно терминологии главы 2, есть нижний уровень протекания потенциала V (r). Тогда

$$\varepsilon_3 = C_2 \frac{\varepsilon_D}{(1-K)^{1/3}}$$
 (4.48)

где C_2 — неизвестный пока численный коэффициент, меньший, чем C_1 . При слабой компенсации, наоборот, $eV(r) \ll \mu$. Поэтому энергия активации равна разности $\mu - eV'_c$, где V'_c — верхний уровень протека-ния в потенциале V(r). Как уже говорилось, при $K \ll 1$ потенциал V(r)является гауссовым. В гауссовом потенциале критическая доля пространства, соответствующая возникновению протекания, равна, согласно 33, 0,17. Поэтому верхний уровень протекания равен 0,67ү/е, где у, определяется (4.43). Таким образом,

$$\mathbf{e}_3 = 0.61 \epsilon_D \left(1 - 0.29 K^{1/4} \right). \tag{4.49}$$

Обсудим теперь вопрос об областях применимости макроскопического подхода к теории возмущений.

422

Согласно результатам главы 5 объем, в котором дисперсия ξ_c мала, по сравнению с γ/T должен иметь размеры большие, чем длина

$$L = a\xi_{c} \left(\frac{\gamma}{T\xi_{c}}\right)^{-\nu}, \qquad (4.50)$$

которая представляет собой радиус корреляции бесконечного кластера (5.25) при $\xi - \xi_c = \gamma/T$. Таким образом, макроскопический подход применим, если $L \ll r_0$. С другой стороны, из главы 5 должно быть ясно, что величина L и представляет собой характерное расстояние между существенными для протекания элементами. Поэтому результат теории возмущений (4.29) справедлив при $L \gg r_0$.

Сравнение формул для ε_3 с экспериментом обсуждается в обзоре ¹⁷. Согласие формул (4.41) и (4.49) с многочисленными экспериментальными данными для случая малой степени компенсации можно считать хорошим. Сложнее обстоит дело при сильной компенсации, когда, с одной стороны, теория не позволяет определить численных множителей C_1 и C_2 , а с другой стороны, в силу технологических неоднородностей образцов степень компенсации может сильно меняться от точки к точке. В настоящее время можно считать установленным лишь то, что ε_3 при $K \rightarrow 1$ быстро возрастает по закону, близкому к $(1 - K)^{-1/3}$ ⁷⁹.

До сих пор мы ничего не говорили о случае промежуточной компенсации $K \simeq 0.5$. На пути вычисления ε_3 в этом случае возникают трудности двоякого характера. Во-первых, при промежуточной компенсации многоэлектронная задача о распределении электронов на примесях при T = 0не имеет малых параметров и до сих пор полностью не решена *) (хотя плотность состояний непосредственно вблизи уровня Ферми найдена ⁷²). Эта трудность в принципе может быть преодолена решением задачи на ЭВМ с последующим применением рецепта (4.29).

Вторая трудность имеет более принципиальный характер. Она состоит в том, что при выводе утверждения об эквивалентной сетке сопротивлений мы пренебрегаем корреляциями функций распределения на соседних узлах (см. ¹²), а взаимодействие электронов учитываем лишь в приближении самосогласованного поля. Такое описание представляется нам совершенно правильным в предельных случаях малой и большой компенсации. Это связано с тем, что в обоих случаях число носителей в области пика плотности состояний (вакансий при $K \ll 1$ и электронов при $1 - K \ll 1$) мало́ и вероятность того, что они окажутся на соседних узлах, ничтожна. Что же касается самосогласованного потенциала, то в обоих случаях он оказывается крупномасштабным, т. е. создается большим числом электронов и слабо флуктуирует.

Эти соображения, однако, теряют силу при промежуточной компенсации, когда электрон часто переходит с уровней, лежащих над уровнем Ферми, на уровни, лежащие под ним, и потенциал на доноре создается его ближайшими соседями. В этом случае остается неясным, можно ли использовать модель случайной сетки сопротивлений для описания температурной зависимости прыжковой проводимости. (Результаты раздела в), естественно, не чувствительны к пренебрежению корреляционными эффектами и справедливы при любых К.)

^{*)} Исключением являются полупроводниковые твердые растворы, где главной причиной разброса примесных уровней могут быть флуктуации состава. В этом случае можно не учитывать взаимодействие электронов друг с другом, и распределение примесных уровней легко находится⁸⁰.

5. ОСОБЕННОСТИ ВБЛИЗИ ПОРОГА ПРОТЕКАНИЯ И СВЯЗАННЫЕ С НИМИ ФИЗИЧЕСКИЕ ЗАДАЧИ

а) Критические индексы

В предыдущих главах мы обсуждали главным образом один аспект теории протекания, состоящий в определении порога, соответствующего возникновению бесконечного кластера. Как мы показали, пороговых величин достаточно для решения целого ряда физических задач. В этой главе мы переходим к другим проблемам, которые также формулируются в терминах теории протекания, однако требуют изучения критического поведения вблизи порога протекания.

В теории протекания можно ввести несколько величин, которые имеют особенности вблизи порога. По аналогии с теорией фазовых переходов второго рода принято считать, что эти особенности имеют степенной характер. Одной из таких величин является введенная раньше плотность бесконечного кластера P(x), которая аналогична параметру порядка теории фазовых переходов. Ее поведение вблизи порога протекания исследуется с помощью машинных расчетов. Для задачи узлов на трех различных трехмерных решетках метод Монте-Карло дает при $x - x_c \ll x_c$

$$P(x) \sim (x - x_c)^{\beta}, \qquad (5.1)$$

где 0,3 ≤ β ≤ 0,4 ³⁶. Для задачи узлов на плоской треугольной решетке методом рядов было получено значение $\beta = 0.14 \pm 0.03^{81}$. Совпадение значений в для различных решеток одинаковой размерности наводит на мысль о том, что в и другие индексы, которые мы определим ниже, зависят лишь от размерности пространства и не зависят от того, по каким правилам устанавливаются связи на малых расстояниях ¹⁵. Разумно, в частности, предположить, что тот же индекс β описывает возрастание доли узлов, принадлежащих бесконечному кластеру, при увеличении *г* — *г*_с или *В* — *В*_с для задач на случайных узлах и увеличение объема. связного черного пространства с ростом V — V_с в континуальной задаче. Такое предположение по духу соответствует современной теории фазовых переходов, в которой считается, что характер взаимодействий на малых расстояниях мало влияет на критические индексы. Правда, в теории фазовых переходов даже для одной размерности пространства остается слабая зависимость индексов от числа компонент параметра порядка, с которой, например, связана разница между моделями Изинга и Гейзенберга. Во всех рассмотренных выше классах задач локальные характеристики однокомпонентны (разорванная или целая связь, черная или белая краска и т. д.). Поэтому можно думать, что для задач протекания индексы должны быть универсальны. Как мы увидим ниже, все имеющиеся данные не противоречат этой гипотезе.

Введем теперь величину n_s , представляющую среднее число кластеров, состоящих из *s* узлов, рассчитанное на один узел решетки. Для определенности мы будем говорить о задаче узлов, хотя все сказанное ниже без труда обобщается на любую задачу теории протекания. Считается, что данный узел принадлежит к кластеру из *s* узлов, если он смачивает s - 1 других узлов. Величина $m_1 = \sum_{i=1}^{n} sn_s$ представляет долю узлов, принадле-

жащих конечным кластерам. Вычитая ее из доли всех неперекрытых узлов *x*, получим введенную ранее долю узлов, принадлежащую бесконечному кластеру

$$P(x) = x - m_1(x), (5.2)$$

Другой величиной, имеющей особенность в точке x_c , является так называемый «средний размер кластера» ²³

$$S(x) = \sum_{s} n_s s^2. \tag{5.3}$$

Заметим, что усреднение размера кластера в (5.3) производится не по кластерам, а по всем узлам. Установлено ²⁴, что для всех исследованных решеток при $x \rightarrow x_c - 0$

$$S(x) \sim (x_c - x)^{-\gamma},$$
 (5.4)

причем

$$\gamma = \begin{cases} 2,38 \pm 0.03 & \text{при} \quad d = 2, \\ 1,69 \pm 0.05 & \text{при} \quad d = 3, \end{cases}$$
(5.5).

где d — число измерений.

Важным шагом в теории протекания явилась работа Кастелейна и Фортуина²⁰, в которой было показано, что введенные выше функции P(x), S(x) и функция $F(x) = \sum_{s} n_s$ связаны друг с другом как термодинамические функции, фигурирующие в теории критических явлений. Если пользоваться терминологией ферромагнитной системы, то функция F(x) эквивалентна свободной энергии, P(x) эквивалентна спонтанной намагниченности, а S(x) — магнитной восприимчивости. Величина x эквивалентна температуре T, причем область $x < x_c$ соответствует парамагнитной области. Для того чтобы это доказать, введем, следуя работам ^{20, 82}, параметр h, играющий роль безразмерного магнитного поля $\frac{\mu H}{T}$, где μ — спиновый магнитный момент. Вообразим дополнительный узел («демон» Кастелейна и Фортуина), не принадлежащий рассматриваемой решетке, но по определению связанный с каждым из ее узлов с вероятностью $1 - e^{-h}$. Ясно, что при наличии такого демона бесконечный кластер из неперекрытых узлов существует при сколь угодно малых значениях x. При $x \to 0$ величина $P(x, h) \to xh$. При конечных h полное число конечных кластеров на узел решетки можно представить в виде

$$F(x, h) = \sum_{s} n_s e^{-hs}.$$
 (5.6)

Множитель e^{-hs} есть доля кластеров размера s, у которых ни один узел не связан с демоном. Эта величина и аналогична свободной энергии. Рассмотрим ее производные по h

$$m_j(x) = (-1)^j \frac{\partial^j}{\partial h^j} F(x, h) |_{h=0} = \sum_s s^j n_s.$$
 (5.7)

Функция m_1 связана с P(x) формулой (5.2), а $m_2 \equiv S(x)$ и аналогична восприимчивости. Поэтому в формулах (5.1) и (5.4) использованы традиционные для критических явлений обозначения для индексов. Дифференцируя F(x, h) по обоим аргументам, можно получить набор функций, аналогичных всем остальным термодинамическим величинам, изучаемым в теории критических явлений.

Продолжая аналогию с теорией фазовых переходов, введем понятие радиуса корреляции ^{70, 83} в задачах протекания. Для этого определим на узлах решетки величину g (**r**, **r**'), положив ее равной единице, если узлы с координатами **r** и **r**' смачивают друг друга и не принадлежат бесконечному кластеру, и равной нулю во всех прочих случаях. После этого введем корреляционную функцию $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, усреднив $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ по всем узлам решетки

$$G(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|, x) = \langle g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rangle.$$
(5.8)

Очевидно, что $G(r, x) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. Мы будем считать, что она содержит единственную характерную длину, которую назовем радиусом корреляции L. Как и в теории фазовых переходов, величина $L \rightarrow \infty$ при $x \rightarrow x_c$ ведет себя следующим образом:

$$L \sim \frac{1}{|x - x_c|^{\nu}}.\tag{5.9}$$

В теории протекания это имеет простой смысл, поскольку характеризует увеличение среднего диаметра кластеров при приближении к порогу



Рис. 6. Функции распределения величин x_{cl} . l = 8 (1), 32 (2) и 128 (3).

протекания. При $x > x_c$ радиус корреляции описывает также характерный размер сетки, которую образует бесконечный кластер. Из определений (5.3) и (5.8) следует важное соотношение

$$S(x) = \sum_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r}, x), \qquad (5.10)$$

совершенно аналогичное известному соотношению для восприимчивости.

Удобный способ для нахождения радиуса корреляции возникает при изучении протекания в конечных объемах. Рассмотрим задачу о протекании с грани на грань в конечном кубе со стороной *l*. Будем увеличивать долю неперекрытых узлов, постепенно добавляя к уже существующим новые случайно расположенные неперекрытые узлы. При некотором значении $x = x_{cl}$ возникает протекание с грани на грань. Ввиду конечности объема величина x_{cl} не воспроизводится при повторении эксперимента. Можно говорить лишь о функции $f(x_{cl})$ распределения величины x_{cl} . При $l \to \infty$ функция $f(x_{cl}) \to \delta(x_{cl} - x_c)$. На рис. 6 изображены функции $f(x_{cl})$, полученные с помощью расчетов на ЭВМ для квадратной решетки ⁸³. Видно, что сдвиг среднего значения $\langle x_{cl} \rangle$ относительно x_c

426

мал по сравнению с шириной кривой. Аналогичная ситуация имеет место и в трехмерном случае⁵⁴. Введем величину $W_l = \sqrt{\langle (x_{cl} - \langle x_{cl} \rangle)^2 \rangle}$ и будем считать. что опа убывает с ростом *l* по степенному закону

$$W_l = \frac{B}{l^{1/\nu}}.$$
 (5.11)

Эта величина изучалась в работах ^{54, 55, 83, 84}. В работе ⁵⁴ для задачи на случайных узлах при d = 3 было получено

$$\mathbf{v} = 0.83 \pm 0.13 \tag{5.12a}$$

(погрешность оценена нами по приведенному в работе ⁵⁴ рисунку). В работе ⁸³ для задачи узлов на кубической и квадратной решетках найдено

$$\mathbf{v} = \begin{cases} 0,90 \pm 0,05 & \text{при} \quad d = 3, \\ 1,33 \pm 0,05 & \text{при} \quad d = 2. \end{cases}$$
(5.126)

В работе ⁸⁴ получено значение $v = 0.97 \pm 0.04$ для простой кубической, $v = 0.92 \pm 0.04$ — для объемноцентрированной кубической и v = $= 1.36 \pm 0.04$ — для плоской треугольной решеток. Можно показать, что индекс v в формуле (5.11) совпадает с индексом радиуса корреляции в формуле (5.9)⁷⁰. Введем вероятность $Q_l(x)$ того, что куб размера l протекаем:

$$Q_{l}(x) = \int_{0}^{x} f(x') dx'.$$
 (5.13)

Эта величина является функцией аргумента

$$\frac{x-x_c}{W_l} = \operatorname{sign} \left(x-x_c\right) \left(\frac{l}{L}\right)^{1/\nu}, \quad \text{где} \quad L = \frac{B^{\nu}}{|x-x_c|^{\nu}}. \tag{5.14}$$

Если $x - x_c < 0$, то при $l \leq L$ вероятность $Q_l(x)$ слабо зависит от l, а при $l \to \infty$ вероятность $Q_l(x) \to 0$. При $x > x_c$ теми же свойствами обладает величина $1 - Q_l(x)$. Таким образом, величина L, определяемая в (5.14), характеризует размеры кластеров и является радиусом корреляции. Индекс радиуса корреляции определяется формулой (5.12) и является третьим известным индексом теории протекания.

Естественный путь к установлению связей между введенными выше индексами состоит в формулировке гипотезы подобия ^{82, 83}. По аналогии с теорией фазовых переходов ⁸⁵, предположим, что сингулярные части функций удовлетворяют соотношениям

$$F(\tau l^{y}, h l^{z}) = l^{a} F(\tau, h), \qquad (5.15)$$

$$G(r, \tau) = l^{-d+2-\eta} G(r l^{-1}, \tau l^{y}), \qquad (5.16)$$

где $\tau = (x - x_c)/x_c$, а y, z и η — неизвестные пока индексы. С помощью (5.15), (5.16), а также (5.2), (5.7), (5.10) все введенные до сих пор индексы теории протекания можно выразить через два, например, через y и z. Мы не будем выписывать всех соотношений между индексами, которые полностью аналогичны соотношениям, следующим из статистической гипотезы подобия в теории фазовых переходов ⁸⁵. Остановимся лишь на соотношении, связывающем три исследованных в теории протекания индекса:

$$\mathbf{v} = \frac{\gamma + 2\beta}{d} \,. \tag{5.17}$$

Согласно (5.1) и (5.5) правая часть (5.17) равна $1,33 \pm 0,05$ при d = 2и $0,80 \pm 0,05$ при d = 3; налицо хорошее согласие с расчетными величинами при d = 2 и несколько худшее при d = 3. Индекс п можно вычислить с помощью соотношения

$$\eta = 2 - \frac{\gamma d}{2\beta + \gamma}. \tag{5.18}$$

При d = 2 индекс $\eta = 0.22 \pm 0.05$, а при d = 3 $\eta = -0.09 \pm 0.012$.

Кроме рассмотренных выше трех индексов β , γ и ν , исследован еще один индекс, который, по-видимому, не имеет аналога в теории фазовых переходов. Он связан с поведением при $x > x_c$ проводимости $\sigma(x)$, возникающей, если всем целым связям приписывать одинаковое конечное сопротивление, а всем разорванным — нулевое. Тогда

$$\sigma(x) \sim (x - x_c)^t. \tag{5.19}$$

Величина $\sigma(x)$ имеет смысл не только для задачи связей, но и для задачи узлов. В этом случае при определении проводимости решетки следует считать, что все связи обладают одинаковыми сопротивлениями, а в каждом перекрытом узле разорван контакт между всеми выходящими из него сопротивлениями. Более того, подобную величину легко ввести и в континуальные задачи. Если считать, что области, где $V(\mathbf{r}) < V_{\bullet}$ обладают одинаковой электропроводностью σ_0 , а области с $V(\mathbf{r}) > V$ заполнены изолятором, то при $V \rightarrow V_c + 0$

$$\sigma(V) \sim (V - V_c)^t.$$

Первое исследование о было выполнено Ластом и Таулессом ⁸⁶. На квадратном листе проводящей графитовой бумаги пробивались круглые отверстия с центрами, лежащими в узлах квадратной решетки, и измерялось сопротивление между противоположными сторонами квадрата как функция числа отверстий (отверстия, соответствующие ближайшим узлам, перекрывались). Из-за большого статистического разброса данных, приведенных в работе ⁸⁶, удалось установить лишь неравенство 1 < t < 2. Более детальные исследования были произведены для решеточных задач. Задача узлов исследовалась с помощью куба, собранного из 16 × 16 × 16 стандартных сопротивлений 87 или с помощью куска стандартной металлической сетки с числом ячеек 137 × 137 ⁸⁸. В обоих случаях в соответствии с датчиком случайных чисел механически разрывались контакты в узлах решетки. Одновременно с уменьшением доли целых узлов измерялось сопротивление между противоположными гранями куба и противоположными гранями квадрата. В результате для задачи узлов были получены значения индексов $t_3 = 2$ и $t_2 = 1,38$ для трех и двух измерений соответственно. Наряду с прямым моделированием решеточных задач электропроводность о вычислялась путем решения на ЭВМ системы урав-нений Кирхгофа ^{36, 87}. Расчет ⁸⁷ подтвердил результат модельного эксперимента $t_3 = \hat{2}$. С другой стороны, Киркпатрик³⁶, вычисляя сопротивление кубов с числом ячеек, достигающим 25 × 25 × 25, получил для задачи связей $t_3 = 1.6 \pm 0.1$ и для задачи узлов $t_3 = 1.5 \pm 0.2$. Причина расхождения этих величин с результатом ⁸⁷ пока не ясна. Для двух измерений Киркпатрик³⁶ получил 1 < t₂ < 1,3, что также несколько отличается от экспериментального значения 86.

Разумно предположить, что индекс t содержит важную дополнительную информации о топологии бесконечного кластера. Однако задача об извлечении этой информации с помощью анализа величин t, β, γ, ν до сих пор не решена. Поэтому мы лишь кратко остановимся на трех шагах в этом направлении.

Ласт и Таулесс⁸⁶ рассуждали следующим образом. Предположим, что при любом *x*, грубо говоря, 1/3 узлов, принадлежащих БК, образует цепочки, соединяющие любые две противоположные грани куба. Тогда

ТЕОРИЯ ПРОТЕКАНИЯ

число цепочек и, следовательно, $\sigma(x)$ должны быть пропорциональны P(x), т. е. индекс t должен совпадать с β . Однако на самом деле $\beta < t$, т. е. вблизи порога $\sigma(x)$ возрастает с ростом x значительно медленне, чем P(x). Это означает, что в действительности подавляющая часть БК не играет роли в электропроводности. Согласно Ласту и Тауллесу эта часть сосредоточена в цепочках, заканчивающихся тупиками (в мертвых концах). Этот вывод, однако, нельзя считать однозначным. Неэффективность БК с точки зрения электропроводности могла бы быть связана и с боль шим числом длинных цепочек, дублирующих малые участки коротких цепочек.

Авторы работы ⁸⁹ предположили, что если отбросить мертвые концы, то оставшаяся часть БК представляет случайную сетку с характерным расстоянием между узлами, равным радиусу корреляции L, причем цепочки, соединяющие узлы этой сетки (макросвязи), не дублированы (одножильны) по крайней мере на половине своей длины. Из этого предположения следует ⁸⁹, что длина макросвязи \mathscr{L} по порядку величины равна $(x - x_c)^{-1}$ и что $t = 1 + v = 1,9 \div 2$ при d = 3 и t = 1 при d = 2. Эти значения t, особенно для d = 3, не слишком далеки от результатов расчетов и измерений. Однако такие рассуждения ⁸⁹ имеют смысл лишь когда длина макросвязи \mathscr{L} не меньше расстояния между ее концами L, т. е. при $v \leq 1$. Как мы видели выше, в последнее время выяснилось, что при d = 2 v = 1,3. Следовательно, в двумерном случае модель одножильной сетки неприменима. Вопрос об адекватности этой модели в трехмерном случае, где $v \approx 0,9-1$, остается открытым. Его выяснению способствовало бы уточнение экспериментальных и расчетных значений индекса t.

Наконец, еще один подход к этой проблеме, предлагаемый в работе 90 позволяет связать индекс t с индексом радиуса корреляции v, не обращаясь к конкретным моделям. Этот подход основан на гипотезе подобия. Сетка сопротивлений является сильно неоднородной во всех масштабах, меньше, чем радиус корреляции. В соответствии с гипотезой подобия предположим, что крупномасштабная структура этой сетки с уменьшением $\tau = |x - x_c|$ остается подобной самой себе и увеличивается с масштабным коэффициентом т^{-v}. Разумеется, это не относится к мелкомасштабной структуре, которая содержит минимальную длину, равную постоянной решетки. Далее, требуется еще одно важное предположение, состоящее в том, что сопротивление сетки определяется крупномасштабной структурой. Тогда сопротивление R кубика, имеющего линейный размер порядка радиуса корреляции L, меняется с т по закону $R \sim L \sim \tau^{-\nu}$. С другой стороны, кубик с размером L можно считать макроскопическим, поэтому удельная электропроводность системы связана с R обычным соотношением

$$\sigma = \frac{L^{d-2}}{R} \sim \tau^{\nu(d-1)}.$$

Таким образом,

$$t = \begin{cases} 2v, & d = 3, \\ v, & d = 2. \end{cases}$$
(5.20)

Согласно (5.12), (5.17), (5.1), (5.5) при d = 2 индекс $v = 1,33 \pm 0.05$, что хорошо согласуется с результатами работ ^{36, 88}. В трехмерном случае согласие также оказывается удовлетворительным.

Заметим, однако, что сделанные при выводе (5.20) предположения отвергают возможность сильной извилистости (клубковой структуры) макросвязей сетки. Рассматривая разрывание БК по мере уменьшения x⁸⁹, можно привести соображения в пользу того, что отсутствие клубковой структуры при произвольном дублировании макросвязей эквивалентно условию $v \ge 1$. Это условие выполняется при d = 2. В трехмерном случае v близко к единице, что делает ситуацию недостаточно ясной.

Перейдем теперь к обсуждению физических задач, в которых электропроводность выражается через критические индексы теории протекания. В тех случаях, когда есть основания полагать, что система представляет собой смесь элементов только двух типов — проводящих и непроводящих, — электропроводность сводится к вычислению $\sigma(x)^{36}$. Считают, что к таким задачам относится вопрос об электропроводности вольфрамовых. бронз М_хWO₃ при изменении концентрации х щелочного металла. Согласно ⁷ в эксперименте наблюдается зависимость вида (5.19) с $t = 1.8 \pm 0.2$ и $x_c = 0.17$. Аналогичный вид имеют зависимость электропроводности ртути от ее плотности вблизи критической точки и зависимость электропроводности металл-аммиачных растворов при изменении концентрации металла⁸. Интересно отметить, что во всех этих случах точка x_c , по-видимому, является особой и для постоянной Холла: $R_H(x) \sim (x - x_c)^{-g}$, где 0 < g < 1. Киркпатрик ⁸ высказал аргументы в пользу того, что при $x \to x_c$ $R_H(x) \simeq P^{-1}(x)$, т. е. $g = \beta$. В работе ⁸⁹ эти аргументы критикуются, и на основе модели одножильной сетки утверждается, что при d=3имеет место равенство g = v. Соображения, аналогичные изложенным в ⁸⁹, приводят к выводу, что в двухмерном случае g = 0. Более общим способом, используя аргументы, приводящие к (5.20), можно получить те же результаты⁹⁰. В работе ⁹⁰ измерялась постоянная Холла проводящей бумаги со случайно пробитыми отверстиями. Оказалось, что при приближении к порогу протекания R_H не зависит от числа отверстий. Это согласуется с изложенными выше результатами.

Обратимся теперь к применениям, связанным с прыжковой проводимостью.

б) Электропроводность полупроводниковых пленок

Аморфные полупроводники, в которых исследуют прыжковую проводимость, как правило, получают в виде пленок. При этом еще в довольно толстых пленках наблюдается очень сильная зависимость сопротивления от толщины пленки $b^{91, 92}$. Для вычисления показателя экспоненты электропроводности вдоль пленки σ_f применим общий рецепт (4.13), т. е.

$$\sigma_f(b) = \sigma_0 e^{-\xi_{cb}},\tag{5.21}$$

где ξ_{cb} — пороговое значение ξ , при котором впервые возникает БК из узлов, находящихся внутри пленки и связанных друг с другом согласно критерию (4.14). Если мысленно заполнить все пространство узлами с той же концентрацией, что и внутри пленки, то очевидно, что пленочный БК всегда является частью объемного БК и существует только тогда, когда существует объемный. Если, однако, ξ очень близко к объемному пороговому значению ξ_c , то объемный БК может быть столь редким, что внутри пленки, он разбивается на отдельные несвязанные друг с другом куски, и пленочный БК не существует. Поэтому ясно, что $\xi_{cb} \ge \xi_c$. Очевидно, что ξ_{cb} зависит от параметра $b/a\xi_c$, где согласно (4.14) $a\xi_c$ по порядку величины есть среднее расстояние между ближайшими связанными узлами (средняя длина прыжка). Согласно (4.16) и (4.36)

$$a\xi_{\rm c} \approx N^{-1/3} \tag{5.22}$$

в режиме проводимости с постоянной энергией активации и

$$a\xi_{\rm c} \approx a \left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/4} \tag{5.23}$$

в режиме моттовской проводимости.

При $b/a\xi_c \ll 1$ возникает просто двумерная задача протекания ($\xi_{cb} \equiv \xi_{c2}$). В условиях моттовской прыжковой проводимости по аналогии с выводом (4.36) можно получить ^{71, 93-95}

$$\xi_{c_2} = \left(\frac{T_{02}}{T}\right)^{1/3}, \tag{5.24}$$

где $T_{02} = \tilde{\lambda} (g(\mu) a^2 b)^{-1}$, а $\tilde{\lambda} = 13.8 \pm 0.8^{74}$. Формула (5.24) была экспериментально подтверждена в работе ⁹⁴. Определение параметров T_0 и T_{02} , входящих в выражения (4.2) и (5.24), позволило найти $g(\mu)$ и a в аморфном Ge⁹⁴.

В работе ⁹⁶ была найдена функция ξ_{cb} при $b/a\xi_c \gg 1$. При этом использовались эвристические соображения, основанные на представлении об объемном БК как о некоторой сетке с характерным размером, равным радиусу корреляции L (ξ), который для задачи на случайных узлах имеет вид

$$L(\xi) \approx a\xi_{c} \left(\frac{\xi_{c}}{\xi - \xi_{c}}\right)^{\nu} \quad \text{при} \quad \frac{\xi - \xi_{c}}{\xi_{c}} \ll 1. \tag{5.25}$$

В рамках такого представления очевидно, что если $L(\xi) \gg b$, то части объемного БК не объединяются в пленочный БК. В то же время при $L(\xi) \ll b$ внутри пленки имеется много слоев сетки объемного БК, образующих пленочный БК. Таким образом, ξ_{cb} определяется условием $L(\xi_{cb}) = b$ или

$$\xi_{cb} = \xi_c \left[1 + D \left(\frac{a\xi_c}{b} \right)^{1/\nu} \right], \qquad (5.26)$$

где D — неизвестное число порядка единицы, а v — индекс радиуса корреляции трехмерной задачи.

Вопрос о зависимости порога протекания вдоль ограниченного двумя параллельными плоскостями массива можно рассматривать и на примере задачи узлов. Если граничные плоскости находятся на расстоянии *n* периодов решетки, то рассуждения, аналогичные приведенным выше, дают

$$x_c(n) = x_c(\infty) \left(1 + \frac{D_1}{n^{1/\nu}}\right).$$
 (5.27)

В работе ⁸⁴ была предпринята проверка формулы (5.27) с помощью прямого расчета x_c задачи узлов на простой кубической решетке методом Монте-Карло. Величина *п* пробегала значения от 1 до 10. Оказалось, что зависимость x_c (*n*) хорошо описывается (5.27) со значением $v = 1 \pm 0.08$, которое в пределах погрешности совпадает с приведенным выше результатами для индекса радиуса корреляции при d = 3.

Формула (5.27) аналогична выражению для температуры перехода ферромагнитной пленки из *n* атомарных слоев

$$T_{\mathbf{c}n} = T_{\mathbf{c}\infty} \left(1 + \frac{D_2}{n^{1/\nu}} \right),$$

где v — трехмерный индекс радиуса корреляции магнитного момента. Эта формула весьма убедительно подтверждена численными расчетами ^{97, 98}.

Из соотношений (5.26) и (5.21) видно, что сопротивление начинает экспоненциально возрастать с уменьшением *b* при $b \approx (a\xi_c) \xi_c^{v}$, т. е. еще при $b/a\xi_c \gg 1$. В условиях моттовской проводимости из (5.26) и (5.21) следует, что

$$\ln \frac{\sigma_f(b)}{\sigma(\infty)} = -D\left(\frac{T_0}{T}\right)^{\frac{\nu+1}{4\nu}} \left(\frac{a}{b}\right)^{1/\nu}, \qquad (5.28)$$

где, согласно (5.12), $v \approx 0.9$.

в) Предэкспоненциальный множитель прыжковой проводимости

До сих пор мы обсуждали только структуру экспоненциального множителя прыжковой проводимости. Как должно быть ясно из главы 3, для долучения предэкспоненциального множителя σ_0 в формуле (4.13) необходима информация о топологии БК вблизи порога протекания. Этот вопрос обсуждался в работах ^{38, 89} на основе конкретных предположений о структуре БК. В работах ^{54, 99} был дан общий вывод формулы для прыжковой проводимости, позволяющий определить предэкспоненциальный множитель и основанный лишь на концепции протекания в конечном объеме. Этот вывод мы излагаем ниже.

Найдем электропроводность случайной сетки с сопротивлениями (4.9). Для этого рассмотрим куб со стороной l, настолько малой, чтобы при заданном разбросе сопротивлений R_{ij} можно было с хорошей точностью считать, что все сопротивления куба определяются сопротивлением одного элемента. Этот элемент имеет самое большое сопротивление среди всех элементов, которые нужно включить (начиная с самых маленьких), чтобы возникло протекание с грани на грань. Пусть соответствующая ему величина ξ_{ij} равна ξ_{cl} . Тогда удельная электропроводность рассматриваемого куба σ_l равна

$$\sigma_l = (R_0 l)^{-1} e^{-\xi_0 l}. \tag{5.29}$$

^В соответствии со сказанным в разделе а) величина ξ_{cl} флуктуирует от реализации к реализации, а ее среднеквадратичная флуктуация описывается формулой

$$W_l = B' \xi_c \left(\frac{a\xi_c}{l}\right)^{1/\nu},\tag{5.30}$$

где $a\xi_c$ — порядка среднего расстояния между ближайшими связанными узлами, определяемого (5.22), (5.23). При увеличении l максимальное сопротивление перестает играть выделенную роль и σ_l больше не зависит от l, так как число существенных сопротивлений становится пропорциональным объему куба. При этом σ_l совпадает с искомой удельной электропроводностью макроскопической системы. Другим критерием перехода от условия (5.29) к макроскопической электропроводности, происходящего при увеличении l, является исчезновение больших относительных флуктуаций σ_l . Это происходит при $W_l \approx 1$, т. е. при

$$l = L \approx (a\xi_c) \xi_c^{\mathsf{v}}. \tag{5.31}$$

Подставляя (5.31) в (5.29), получим окончательно

$$\sigma \approx (R_0 a)^{-1} \xi_c^{-1-\nu} e^{-\xi_c}.$$
 (5.32)

Согласно формулам (5.31) и (5.25) характерный размер сетки, которая определяет электропроводность системы, порядка радиуса корреляции при $\xi - \xi_c \approx 1$. Это кажется естественным ввиду экспоненциальной зависимости σ_l от ξ_{cl} . Согласно (4.16), (4.36)

$$\sigma \approx (R_0 a)^{-1} (N^{1/3} a)^{1+\nu} e^{-[(2r c^{/a}) + (e_3/T)]}$$
(5.33)

в режиме постоянной энергии активации и

$$\sigma \approx (R_0 a)^{-1} \left(\frac{T_0^3}{T} \right)^{-(1+\nu)/4} \exp\left[-\left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/4} \right]$$
(5.34)

в режиме моттовской проводимости. Заметим, что приведенный вывод не позволяет определить численный коэффициент в предэкспоненциальном множителе в формулах (5.32) — (5.34). Кроме того, следует иметь в виду, что рассматривалась модель, в которой сопротивление элементов определяется соотношением (4.9), причем R_0 не зависит от индексов узлов і и ј. Если R₀ зависит от ξ_і, то обобщение результата состоит в том, что в выражение (5.32) следует подставить величину R₀ |_{ξ11=ξc}, которая может внести дополнительную степенную зависимость от N и T^{38,89}.

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе АН СССР, Ленинград

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- 1. S. R. Broadbent, J. M. Hammersley, Proc. Camb. Phil. Soc. 53, 629

- S. R. BroadDent, J. M. Hanneller (1957).
 P. W. Anderson, Phys. Rev. 109, 1492 (1958).
 E. N. Economou, M. H. Cohen, ibid. B5, 2931 (1972). S. F. Edwards, D. J. Thouless, J. Phys. C5, 907 (1972).
 T. P. Eggarter, M. H. Cohen, Phys. Rev. Lett. 25, 807 (1970). T. P. Eggarter, Phys. Rev. A5, 2496 (1972).
 D. E. Holcomb, J. J. Rehr, ibid. 183, 773 (1969).
 R. Fuchs, J. Chem. Phys. 42, 3781 (1965).
 P. A. Lightsly, Phys. Rev. B8, 3586 (1973).
 S. Kirkpatriick, in: Proc. of 2nd Intern. Conference on Liquid Metals, London. 1972, p. 351.
- 9. D. J. Morgan, G. S. Rushbrooke, Mol. Phys. 4, 291 (1961); 6, 477 (1963).
 G. S. Rushbrooke, in: Critical Phenomena in Alloys, Magnets and Superconductors, N.Y., Mc Grow-Hill, 1971, p. 155.
 - G. S. Rushbrooke, R. A. Muse, R. L. Stephenson, K. Pirnie, J. Phys. C5, 3371 (1972). I. Ya. Korenblit, E. F. Shender, B. I. Shklovsky, Phys. Lett. A46,
 - 275 (1973).
- 10. S. Katsura, F. Matsubara, Can. J. Phys. 52, 120 (1974). 11. Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, ЖЭТФ 60, 867 (1971). 12. V. Ambegaokar, B. I. Halperin, J. S. Langer, Phys. Rev. B4, 2612 (1971).

- (1971).
 13. A. Miller, E. Abrahams, ibid. 120, 745 (1960).
 14. M. Pollak, J. Non-Cryst. Sol. 11, 1 (1972).
 15. V. K. S. Shante, S. Kirkpatrick, Adv. Phys. 20, 325 (1971).
 16. H. L. Frisch, J. M. Hammersley, J. Ind. Appl. Math 11, 894 (1963). C. Domb, Adv. Phys. 19, 339 (1970). J. W. Essam, in: Phase Transitions and Critical Phenomena, Ed. C. Domb and M. S. Green, v. 2, L.—N. Y., Academic Press, 1972, p. 73.
 17. Б. И. Шкловский, ФПІ 6, 1197 (1972).
 18. J. М. Натmersley, J. Math. Phys. 2, 728 (1961).
 19. H. L. Frisch, J. M. Hammersley, D. J. A. Welsh, Phys. Rev. 126, 949 (1962).

- 949 (1962).
- 949 (1962).
 20. P. W. Kasteleyn, C. M. Fortuin, J. Phys. Soc. Japan, Suppl. 26, 11 (1969).
 21. V. A. Vyssotsky, S. B. Gordon, H. L. Frisch, J. M. Hammersley, Phys. Rev. 123, 1566 (1961).
 H. L. Frisch, E. Sonnenblick, V. A. Vyssotsky, J. M. Hammers-ley, ibid. 124, 1021.
 22. P. Dean, Proc. Camb. Phil. Soc. 59, 397 (1963).
 23. C. Domb, M. F. Sykes, Phys. Rev. 122, 77 (1960).
 24. M. F. Sykes, J. W. Essam, ibid. A 133, 310 (1964).
 25. M. F. Sykes, J. W. Essam, Phys. Rev. Lett. 10, 3 (1963); J. Math. Phys. 5, 4147 (1964).

- 1117 (1964).
- 3 УФН, т. 117, вып. 3

- 26. J. M. Ziman, J. Phys. C1, 1532 (1968). **ТГБР ГР** 27. H. Scher, R. Zallen, J. Chem. Phys. 53, 3759 (1970). 28. Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, ЖЭТФ 61, 816 (1971). 29. R. Zallen, H. Scher, Phys. Rev. B4, 4471 (1971).

- 23. А. Дыхне, ЖЭТФ 59, 111 (1970). 31. Б. И. Шкловский, Иисьма ЖЭТФ 14, 397 (1971). 32. А. С. Скал, Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, ФТТ 15, 1423 (1973). 33. А. С. Скал, Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, Письма ЖЭТФ 17, 522 (1973).
- 34. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Электродинамика сплошных сред, 5 М., Физматгиз, 1959, стр. 67.

- Оняматиза, 1959, стр. 67.
 35. D. A. G. Bruggeman, Ann. d Phys. (Lpz.) 24, 636 (1935).
 36. S. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys. 45, 574 (1973).
 37. S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. 27, 1722 (1971).
 38. S. Kirkpatrick, Technical Report of ISSP, ser. B, No. 15, §18 (1973).
 39. C. H. Seager, G. E. Pike, Phys. Rev. B10, 1435 (1974).
 40. B. Gudden, W. Schottky, Zs. tech. Phys. 16, 323 (1935).
 41. N. F. Mott, W. Twose, Adv. Phys. 10, 107 (1961) [см. перевод УФН 79, 691 (1963)] (1963)).
- (1903)).
 42. Н. Мотт, Э. Дэвис, Электронные процессы в некристаллических веществах, М., «Мяр», 1974.
 43. Н. Fritzsche, M. Cuevas, Phys. Rev. 119, 1238 (1960).
 44. A. H. Clark, ibid. 154, 750 (1967).
 P. A. Walley, A. K. Jonscher, Thin Sol. Films 1, 367 (1968).
 45. N. F. Mott, Phil. Mag. 22, 7 (1970).
 46. И. С. Шамак, Б. И. Никулин, Письма ЖЭТФ 15, 30 (1972).

- 45. N. F. Mott, Phil. Mag. 22, 7 (1970).
 46. И. С. Шлимак, Е. И. Никулин, Письма ЖЭТФ 15, 30 (1972).⁵
 47. О. В. Емельяненко, Д. Н. Наследов, Е. И. Никулин, И. Н. Тимченко, ФТП 6, 2283 (1972).
 48. F. R. Allen, C. J. Adkins, Phil. Mag. 26, 1027 (1972).
 49. N. W. Dalton, C. Domb, M. F. Sykes, Proc. Phys. Soc. 83, 496 (1964).
 50. C. Domb, N. W. Dalton, ibid. 89, 856 (1966).
 51. F. D. K. Roberts, S. H. Storey, Biometrika 55, 258 (1968).
 52. D. E. Holcomb, M. I wasawa, F. D. K. Roberts, ibid. 59, 207 (1972).
 53. A. C. Скал, Б. И. Шкловский, ФТП 7, 1589 (1973).
 54. J. Kurkijarvi Phys. Bev. B9, 770 (1974).

- 53. А. С. Скал, Б. И. Шкловский, ФПП 7, 1589 (1973).
 54. J. Kurkijarvi, Phys. Rev. B9, 770 (1974).
 55. G. E. Pike, C. H. Seager, ibid. B10, 1421.
 56. J. P. Gayda, H. Ottavi, J. de Phys. 35, 393 (1974).
 57. О. В. Емельяненко, Т. С. Лагунова, Д. Н. Наследов, Д. Д. Н. Чеогло, И. Н. Тимченко, ФПП 7, 1919 (1973).
 58. Б. И. Шкловский, ЖЭТФ 61, 2033 (1974).
 59. Б. И. Шкловский, И. С. Шлимак, ФПП 6, 129 (1972).
 60. Н. Бріхаловский, И. С. Шлимак, БОП 6, 69 (1958).

- 60. H. Fritzsche, J. Phys. and Chem. Sol. 6, 69 (1958).
- 61. Б. И. Шкловский, ФТП 8, 416 (1974). 62. R. J. Sladek, J. Phys. and Chem. Sol. 5, 157 (1958).

- 63. J. A. Chroboczek, R. A. Sladek, Phys. Rev. 151, 595 (1966). 64. А. Р. Гаджиев, И. С. Шлимак, ФТП 6, 1582 (1972). 65. J. Chroboczek, А. Klokocki, К. Кораlko. J. Phys. C7, 3042 (1974)
- 66. О. В. Емельяненко, Д. Н. Наследов, Д. Д. Недеогло, Н. В. Сиукаев, ФТП 5, 334 (1971).
 67. L. Halbo, R. J. Sladek, Phys. Rev. 173, 794 (1968).
 68. О. В. Емельяненко, Д. Н. Наследов, Н. А. Урманов, ФТП 3,
- **1612 (1969).**

H. Kahlert, J. Geiger, G. Landwerk, A. Shclachetzki, H. Salow, in: Proc. of 12th Intern. Conference on Physics of Semiconductors, Stuttgart 1974, p. 269.

- р. 209. 69. N. Mikoshiba, Phys. Rev. 127, 1962 (1962). 70. А. С. Скал, Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, ФТТ 17, 506 (1975). 71. Е. М. Наmilton, Phil. Mag. 26, 1043 (1972). 72. А. L. Efros, B. I. Shklovskii, J. Phys. C8, L 49, (1975). 73. R. Jones, W. Shaich, ibid. C5, 43 (1972). 74. А. С. Скал, Б. И. Шкловский (1972).

- 74. А. С. Скал, Б. И. Шкловский, ФТТ 16, 1820 (1974).

- 75. Б. И. Шкловский, ФТН 7, 112 (1973).
 M. Pollak, Phys. Stat. Sol. b66, 483 (1974).
 76. A. L. Efros, B. I. Shklovskii, I. Ya. Yanchev, ibid. b50, 45 (1972).

- 77. Л. В. Келдыш, Г. П. Прошко, ФТТ 5, 3378 (1963). 78. Ю. С. Гальперин, А. Л. Эфрос, ФТП 6, 1081 (1972). 79. I. S. Shlimak, V. V. Еmtzev, Phys. Stat. Sol. **b47**, 325 (1971).

- 80. Б. Л. Гельмонт, Гаджиев, Б. И. Шкловский, И. С. Шлимак, A. Л. Эфрос, ФТН 8, 2377 (1974).
 81. М. F. Sykes, M. Glen, D. S. Gaunt, J. Phys. A7, L105 (1974).
 82. J. W. Essam, R. M. Gwilym, ibid. C4, L288 (1971).
 83. М. Е. Левинштейн, Б. И. Шкловский, М. С. Шур, А. Л. Эфрос, WPTD 60, 296 (4075).

- ЖЭТФ 69, 386 (1975).
- 84. А. В. Шейнман, ФТП 9, 2146 (1975).

- 84. А. В. Шенман, ФПІ 9, 2140 (1975).
 85. Г. Стенли, Фазовые переходы и критические явления, М., «Мир», 1973.
 86. В. J. Last, D. J. Thouless, Phys. Rev. Lett. 27, 1719 (1971).
 87. D. Adler, Z. P. Flora, S. D. Senturia, Sol. State Comm. 12, 9 (1973).
 88. В. Р. Watson, P. L. Leath, Phys. Rev. B9, 4893 (1974).
 89. А. С. Скал, Б. И. Шкловский, ФТП 8, 1586 (1974).
 90. М. Е. Левинштейн, М. Г. Шур, А. Л. Эфрос, ЖЭТФ, 69 (12) (1975)
 91. С. J. Adkins, E. М. Натilton, in: Proc. of 2nd Intern. Conference on Conduction in Low mobility. Matorials Fillst 4074 220

- 91. C. J. Adkins, E. M. Hamilton, in: Proc. of 2nd Intern. Conference on Conduction in Low-mobility Materials, Eilat, 1971, p. 229.
 92. J. J. Hauser, A. Staudinger, Phys. Rev. 8, 607 (1973).
 93. W. Brenig, P. Wölfle, G. Döhler, Zs. Phys. 246, 1 (1971).
 94. M. L. Knotek, M. Pollak, T. M. Donovan, H. Kurtzman, Phys. Rev. Lett. 30, 853 (1973).
 95. V. K. S. Shante, Phys. Lett. A43, 249 (1973).
 96. B. I. Shklovskii, ibid. A51, 289 (1975).
 97. M. E. Fisher, in: Critical Phenomena, Ed. M. S. Green, N.Y., Academic Press, 1971, p. 73.

- 1971, p. 73. 98. K. Binder, P. C. Hohenherg, Phys. Rev. **B9**, 2194 (1974).
- 99. Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, Письма ЖТФ 1, 174 (1975).