

ного состояния акцепторов, связанную с химическим сдвигом. Последнее обстоятельство открывает перспективы анализа химической природы основных разновидностей акцепторов в этом материале.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] S. M. Kogan, T. M. Lifshits. Phys. St. Sol. (a), 39, 11 (1977); A. Ramadas, S. Rodrigez. Rep. Progr. Phys., 44, 1297 (1981).
- [2] Б. Л. Гельмонт, М. И. Дьяконов. ФТП, 5, 2191 (1971).
- [3] C. R. Ridgeon, R. N. Brown. Phys. Rev., 146, 575 (1966).
- [4] R. J. Elliott, R. J. Loudon. Phys. Chem. Sol., 15, 196 (1960).

Редактор Т. А. Полянская

ФТП, том 27, вып. 4, 1993

### ТЕОРИЯ ПРОТЕКАНИЯ И ПЕРЕХОД МОТТА В ЛЕГИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

А. Г. Кязым-заде

Бакинский государственный университет им. М. Э. Расулзаде,  
370148, Баку, Азербайджан  
(Получено 26.10.1992. Принято к печати 2.12.1992)

Одним из наиболее известных примеров перехода диэлектрик—металл, обусловленного корреляцией, является переход Мотта в легированных полупроводниках [1]. Однако, несмотря на наличие многочисленных экспериментальных работ по изучению перехода Мотта в легированных полупроводниках, удовлетворительная математическая теория для его количественного описания к настоящему времени отсутствует. Поэтому трудно оценить критическую концентрацию  $N_c$ , при которой происходит переход Мотта. Лишь в [1] получено приближенное соотношение

$$N_c^{1/3} a \approx 0.2 \quad (1)$$

для оценки  $N_c$  в легированных полупроводниках при расположении примесных атомов с эффективным боровским радиусом  $a$  по узлам простой кубической подрешетки. В данной работе показано, что критерий для перехода Мотта практически не зависит от типа структуры примесной подрешетки.

Прежде всего отметим, что примесные атомы часто распределяются в пространстве хаотически, и совокупность экспериментальных данных показывает, что в некоторых случаях хорошую оценку величины  $N_c$  можно получить с помощью соотношения [2]

$$N_c^{1/3} a \approx 0.27. \quad (2)$$

В этом случае критерий для перехода Мотта в принципе может быть определен и на основе задачи сфер теории протекания [2]. При этом предполагается, что каждый примесный атом представляет собой сферу с эффективным радиусом  $r_0 = qa$  и переход Мотта происходит при выполнении условия

$$\frac{4\pi}{3} N_c (2r_0)^3 \approx 2.7, \quad (3)$$

где  $r_c = 2r_0$  называется перколяционным радиусом. Однако при этом трудно оценить значение численного коэффициента  $q$ . Можно лишь заметить, что формула (3) совпадает с экспериментальной формулой (2) при  $q \approx 1.6$ . Если принять, что коэффициент  $q$  обладает определенной универсальностью, то естественно, что критерий для перехода Мотта при расположении атомов по узлам правильной примесной подрешетки также может быть получен на основе задачи узлов теории протекания. Легко можно видеть, что критическая концентрация  $N_c$  при этом не зависит от типа примесной подрешетки в структурах одинаковой размерности. Это следует из правила Заллена и Шера [3], согласно которому произведение  $fx_c(s)$  (где  $f$  — плотность упаковки,  $x_c(s)$  — порог протекания для данной решетки в задаче узлов) является приближенным инвариантом теории протекания:

$$fx_c(s) \approx 0.16. \quad (4)$$

Если обратить внимание на то, что в рамках теории протекания переход Мотта происходит при образовании бесконечного кластера из соприкасающихся друг с другом примесных атомов с эффективным радиусом  $r_0 = qa$ , то нетрудно понять [4], что плотность упаковки

$$f = \frac{4\pi}{3} (qa)^3 N \quad (5)$$

и

$$fx_c(s) = \frac{4\pi}{3} (qa)^3 N_c, \quad (6)$$

где  $N$  — полная концентрация узлов примесной подрешетки. Из сравнения (6) с (4) можно получить соотношение

$$N_c^{1/3} a \approx 0.21, \quad (7)$$

которое хорошо согласуется с соотношением (1).

Соотношение (7) представляет интерес в том случае, когда атомы примеси замещают атомы основного кристалла. Хотя атомы примеси замещают атомы основного кристалла случайно, однако следует учитывать, что вплоть до области перехода примесные атомы располагаются друг от друга на расстоянии  $s \geq 2qa$ , так как в противном случае возникает квантово-механическое отталкивание из-за перекрытия волновых функций электронов. Поскольку симметрия кристалла сохраняется в макроскопическом смысле, то нетрудно понять, что условие (7) представляет определенный интерес и не случайно, что экспериментальные значения критической концентрации в некоторых случаях хорошо описываются формулой (7). В случае внедрения примесные атомы распределяются совершенно случайно и переход Мотта описывается соотношением (2). Что касается изменения критической концентрации при переходе от упорядоченной решетки к случайной, то это связано с особенностями перколяционных процессов в упорядоченных и случайных системах [2].

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Н. Ф. Мотт. Переходы металл—изолятор, 344. М. (1979).
- [2] Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос. Электронные свойства легированных полупроводников, 416. М. (1979).
- [3] H. Scher, R. Zallen. J. Chem. Phys., 53, 3759 (1970).
- [4] А. Г. Кязым-заде. ФТП, 26, 169 (1992).