

Теория прыжкового переноса в неупорядоченных системах

© М.П. Фатеев

Национальный научный центр „Харьковский физико-технический институт“,
Харьков, Украина

E-mail: mfateev@kipt.kharkov.ua

(Поступила в Редакцию 22 июля 2009 г.)

На основе линеаризованного уравнения баланса рассмотрена задача о прыжковой проводимости системы со случайно распределенными примесными центрами при низких температурах. С использованием диаграммного метода Гогенауера–Андерсена–Фауэра получено самосогласованное выражение для конфигурационно-усредненной функции Грина, описывающей перенос заряда в неупорядоченной системе с учетом корреляций Ферми. На основе развитого формализма найдено выражение для прыжковой проводимости в зависимости от температуры при степенном законе (ходе) плотности состояний. Полученные результаты хорошо согласуются с перколяционным подходом и в статическом пределе приводят к закону Мотта.

1. Введение

Прыжковый перенос в неупорядоченных системах является объектом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований на протяжении последних десятилетий — с тех пор, как Мотт [1] опубликовал свою знаменитую работу по прыжковой проводимости в режиме переменной длины прыжка (VRH — variable range hopping). Важными примерами таких систем являются кристаллические и аморфные легированные полупроводники и органические молекулярные кристаллы, низкоразмерные полимеры, жидкие металлы, керамики и т.д. Прыжковый транспорт является ключевым механизмом при описании переноса электронных возбуждений (экситонов), других квазичастичных возбуждений, спиновой диффузии в неупорядоченных структурах.

Центральной проблемой прыжкового переноса является нахождение усредненной проводимости (коэффициента диффузии) системы, в которой перенос заряда осуществляется посредством случайных блужданий по локализованным примесным центрам, характеризующимся пространственным и энергетическим беспорядком. Для решения этой задачи были предложены различные теоретические методы, отличающиеся по методологии и начальным приближениям [2]. Все подходы в этом направлении можно подразделить на два класса: полуфеноменологический метод, использующий модель проводимости случайной сетки сопротивлений Миллера–Абрахамса [3], и микроскопический подход, основанный на решении основного кинетического уравнения для диффузионной функции, описывающей блуждание частицы по случайным узлам. Для нахождения проводимости случайной сетки сопротивлений широко используется теория перколяции. Именно в силу резкой экспоненциальной зависимости величин сопротивлений от характерных разностей энергий и расстояний между узлами сетки проводимость системы с логарифмической точностью определяется критическим значением, следующим из теории протекания. Это приводит к известному

закону Мотта для проводимости

$$\sigma = \sigma_0 \exp[-(T_0/T)^{1/4}], \quad (1)$$

где $T_0 = \gamma_p \alpha^3 / N_F$, α — радиус локализации, N_F — плотность состояний на уровне Ферми, γ_p — численный коэффициент. Следует отметить, что теория протекания дает точный численный экспоненциальный множитель только для задачи, в которой темпы переходов зависят от расстояний между узлами и не зависят от энергий (NNH — nearest neighbor hopping). Для модели VRH теория протекания дает лишь оценочный множитель γ_p , поскольку в этом случае критическое значение числа связей на узел зависит от его энергии, и эту величину необходимо каким-либо способом усреднить по энергетической переменной. Было предложено несколько схем усреднения с целью получить хорошее согласие с результатами численного моделирования [4,5]. В силу полумпирического характера этого подхода основным критерием его применимости является не внутренняя самосогласованность теории, а сравнение с данными компьютерных расчетов. Помимо этого возникает еще ряд принципиальных вопросов (нахождение предэкспоненциального множителя для проводимости, исследование частотной зависимости, поведение проводимости в сильных полях и т.д.), которые в рамках теории перколяции описываются только на качественном уровне с привлечением дополнительных феноменологических соображений.

Прямое решение кинетического уравнения для переноса зарядов или возбуждений по случайно расположенным примесным центрам не представляется возможным. С целью преодоления указанных трудностей наряду с развитием феноменологической теории были развиты различные приближенные диаграммные методы решения основного кинетического уравнения для конфигурационно-усредненной диффузионной функции, описывающей перенос носителей заряда или возбуждений как для случая NNH-проводимости, так и для случая с переменной длиной прыжка (VRH). Так, в работе [6] использовалась модель связей в топологии деревьев

Кейли, которая была обобщена на случай трехмерной диффузии в обычном пространстве за счет исключения вкладов по замкнутым путям. При этом проводимость системы выражалась через удельную проводимость, зависящую от энергии. Для удельной проводимости было получено самосогласованное интегральное уравнение в пространстве энергий, решение которого находилось численным методом. Из этой теории следует результат Мотта (1), но с численным коэффициентом γ_p , заметно отличающимся от результата теории протекания. В свою очередь авторы работ [7] и [8] не вводили никакой дополнительной решетки. В [7] для решения задачи VRH-проводимости использовалась модифицированная диаграммная техника Гогенауера–Андерсена–Фауэра (ГАФ) [9], основанная на самогласованном расчете функции Грина в парном приближении, справедливом для малой концентрации примесей. При этом получается самосогласованное диффузионное уравнение, описывающее процесс диффузии в пространстве энергий, на что впервые обращено внимание в работе [8]. Авторы [7] это интегральное уравнение заменили простым алгебраическим уравнением. Далее с помощью процедуры самогласования ГАФ находилась диагональная часть усредненной функции Грина, которая в этом приближении определяет проводимость системы. Путем разделения усреднения по длинам прыжков и темпам переходов между примесными узлами найдено приближенное выражение для статической прыжковой проводимости на уровне Ферми, полностью аналогичное результату работы [6]. Несмотря на совпадение полученных результатов с зависимостью Мотта (1), предложенный метод решения VRH-задачи нельзя признать удовлетворительным. В отличие от подхода ГАФ в работе [8] предложен общий метод нахождения усредненной функции Грина, основанный на кумулянтных разложениях. Этот подход формально справедлив для любой концентрации примесных центров и является близким к методу „когерентного потенциала“, который широко применяется для анализа различных неупорядоченных систем со статическим беспорядком [10]. Поскольку точное решение в этом случае получить невозможно, задача упрощалась с помощью замены полной функции Грина на ее диагональную часть в массовом операторе аналогично процедуре ГАФ. Далее в [8] путем перехода к безразмерным масштабным переменным было найдено выражение для прыжковой проводимости как в статическом, так и динамическом режиме с точностью до численных коэффициентов. Незвестный параметр (диагональная часть функции Грина) определялся из условия обращения в нуль дополнительного вклада в выражении для электропроводности. К сожалению, выбранная процедура самогласования носит чисто подгоночный характер и не имеет строгого обоснования [8]. Коэффициент диффузии в этом приближении выражается через полную функцию Грина, которая в свою очередь зависит самосогласованным образом от коэффициента диффузии. Это приводит к необходимости решения сложного интегрального уравнения для функции Гри-

на, определяющей проводимость системы. Более того, некоторые коэффициенты разложения, которые входят в выражение для частотной зависимости электропроводности, обращаются в бесконечность для размерности пространства, меньшего или равного двум: $d \leq 2$ [8]. Следовательно, несмотря на совпадение полученных результатов с законом Мотта (1), в работе [8] не были определены важные численные коэффициенты, которые при выбранном условии самогласования должны найдены из решения квантового диффузионного уравнения.

Цель настоящей работы заключается в развитии последовательного микроскопического подхода для описания прыжкового переноса, который был бы избавлен от указанных недостатков. Эта работа является продолжением и развитием работы [11], где был предложен диаграммный метод, основанный, как и в [8], на кумулянтном разложении. В [11] также получен закон Мотта (1) с численным коэффициентом γ_p , совпадающим с результатами работ [6,7] и сильно отличающимся от результата теории протекания.

В отличие от [7] в настоящей работе получено квантовое диффузионное уравнение для пропагатора в пространстве энергий. На его основе найдено правильное интегральное уравнение для диагональной части функции Грина, описывающее прыжковую проводимость (коэффициент диффузии) как в статическом, так и в динамическом режиме для VRH-задачи. На основе рассмотренного формализма получено выражение для статической прыжковой проводимости, зависящее от вида плотности состояний вблизи уровня Ферми и хорошо согласующееся с результатами теории протекания.

2. Основные уравнения прыжковой проводимости

Для расчета проводимости мы используем микроскопический подход, основанный на введении функции условной вероятности $P_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}(t)$ (диффузионной функции), т.е. вероятности обнаружить электрон на узле n с энергией ε в момент времени t , если при $t=0$ он находился на узле n' с энергией ε' [2]. Согласно этому подходу, в линейном по внешнему электрическому полю \mathbf{E} приближении выражение для тока имеет вид

$$\mathbf{j}(s) = \frac{e^2 s^2}{2T\Omega} \sum_{\substack{n,n' \\ \varepsilon,\varepsilon'}} (\mathbf{R}_{n'} - \mathbf{R}_n) (\mathbf{E} \mathbf{R}_{n'}) P_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}(s), \quad (2)$$

где $P_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}(s)$ — функция условной вероятности в представлении Лапласа, $s = -i\omega$, ω — частота внешнего электрического поля, e — единичный заряд, Ω — объем системы, T — температура, выраженная в энергетических единицах. Отсюда для кубической решетки размерности d получаем соотношения для электропроводности

$$\sigma(s) = \frac{e^2 s^2}{2dT\Omega} \sum_{\substack{n,n' \\ \varepsilon,\varepsilon'}} (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})^2 P_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}(s). \quad (3)$$

Диффузионная функция $P_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}(s)$ удовлетворяет уравнению

$$sP_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'} = \delta_{n,n'}\delta_{\varepsilon,\varepsilon'}F_{n'}(\varepsilon') + \sum_{n'',\varepsilon''} \Gamma_{n,n''}^{\varepsilon,\varepsilon''} \left\{ \frac{P_{n'',n'}^{\varepsilon'',\varepsilon'}}{F_{n''}} - \frac{P_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}}{F_n} \right\}. \quad (4)$$

Здесь $F_n(\varepsilon) = f_F^n(\varepsilon)(1 - f_F^n(\varepsilon))$, где $f_F^n(\varepsilon)$ — фермиевская функция распределения на узле n , $\Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'} = \Gamma_{n',n}^{\varepsilon',\varepsilon}$ — вероятность прыжка из узла n , ε на узел n' , ε' в единицу времени. Функция условной вероятности P удовлетворяет нормировочным условиям, следующим из принципа детального баланса и закона сохранения полной вероятности

$$\sum_{n',\varepsilon'} sP_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'} = F_n(\varepsilon), \quad (5)$$

$$\sum_{n',\varepsilon'} sP_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'} = F_{n'}(\varepsilon). \quad (6)$$

Далее полагаем, что Γ не зависит от частоты s , что соответствует марковскому пределу для неусредненного уравнения диффузии. Эта зависимость существенна лишь в области высоких частот, начиная с инфракрасного диапазона. В случае низких температур вероятность переходов в приближении слабой связи с фононами может быть представлена в виде [1–3]

$$\Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'} = \nu_0 \exp\left(-2\alpha|\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}| - \frac{|\varepsilon - \varepsilon'| + |\varepsilon| + |\varepsilon'|}{2T}\right), \quad (7)$$

где α — обратный боровский радиус, ν_0 — фононная частота. Здесь и далее считаем, что все энергии отсчитываются от уровня Ферми. Отметим, что результаты теории легко обобщаются на случай произвольной зависимости вероятностей переходов от расстояния и энергии.

3. Диаграммный метод

Предположим, что часть узлов решетки случайным образом занята примесями, которые имеют случайное распределение уровней энергии. Тогда уравнение (3) можно представить в виде стохастического уравнения [11]

$$sP_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'} = \delta_{n,n'}\delta_{\varepsilon,\varepsilon'}c_{n'}(\varepsilon')F_{n'}(\varepsilon') + \sum_{n'',\varepsilon''} \Gamma_{n,n''}^{\varepsilon,\varepsilon''} \left\{ c_n(\varepsilon) \frac{P_{n'',n'}^{\varepsilon'',\varepsilon'}}{F_{n''}} - c_{n''}(\varepsilon'') \frac{P_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}}{F_n} \right\}, \quad (8)$$

где $c_n(\varepsilon)$ — случайные величины (числа заполнения), определяющие распределение примесей по энергиям и пространству,

$$c_n(\varepsilon) = \begin{cases} 1, & \text{если в узле } n \text{ находится примесь} \\ & \text{с уровнем энергии } \varepsilon; \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Для простоты будем предполагать отсутствие корреляций между различными узлами (рассматриваются системы с малой концентрацией примесей). Также считаем, что отсутствуют корреляции между распределением примесей по энергиям и по расположению в пространстве

$$\begin{aligned} \langle c_n(\varepsilon) \rangle &= cN(\varepsilon), \\ \langle c_n(\varepsilon)c_{n'}(\varepsilon') \rangle &= c^2N(\varepsilon)N(\varepsilon'), \quad n \neq n', \\ \langle c_n(\varepsilon)c_n(\varepsilon') \rangle &= cN(\varepsilon)\delta_{\varepsilon,\varepsilon'}. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь $N(\varepsilon)$ — плотность распределения уровней энергии на примесях вблизи уровня Ферми, c — концентрация примесей. Диффузионное уравнение для функции условной вероятности удобно представить в матричном виде, используя формализм Дирака

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_{\substack{n,n' \\ \varepsilon,\varepsilon'}} P_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'} |n, \varepsilon\rangle \langle n', \varepsilon'|,$$

$$\hat{\mathbf{V}} = \sum_{n,\varepsilon} c_n(\varepsilon) \hat{\mathbf{v}}_n(\varepsilon),$$

$$\hat{\mathbf{v}}_n(\varepsilon) = \sum_{n',\varepsilon'} \frac{\Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}}{F_{n'}(\varepsilon')} (|n, \varepsilon\rangle - |n', \varepsilon'\rangle) \langle n', \varepsilon'|,$$

$$\hat{\mathbf{F}} = \sum_{n,\varepsilon} c_n(\varepsilon) F_n(\varepsilon) |n, \varepsilon\rangle \langle n, \varepsilon| = \sum_{n,\varepsilon} c_n(\varepsilon) \hat{\mathbf{f}}_n(\varepsilon). \quad (10)$$

Тогда уравнение (7) примет вид

$$s\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{F}} + \hat{\mathbf{V}}\hat{\mathbf{P}}. \quad (11)$$

Итерация уравнения (7) по свободному члену приводит к ряду

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}} &= s^{-1} \sum_{n,\varepsilon} c_n(\varepsilon) \hat{\mathbf{f}}_n(\varepsilon) + s^{-2} \sum_{\substack{n,\varepsilon; \\ n',\varepsilon'}} c_n(\varepsilon) c_{n'}(\varepsilon') \hat{\mathbf{v}}_n(\varepsilon) \hat{\mathbf{f}}_{n'}(\varepsilon') \\ &+ s^{-3} \sum_{\substack{n,\varepsilon; n',\varepsilon'; \\ n'',\varepsilon''}} c_n(\varepsilon) c_{n'}(\varepsilon') c_{n''}(\varepsilon'') \hat{\mathbf{v}}_n(\varepsilon) \hat{\mathbf{v}}_{n'}(\varepsilon') \hat{\mathbf{f}}_{n''}(\varepsilon'') + \dots \end{aligned} \quad (12)$$

Усредним каждый член этого ряда по случайному распределению $\{c_n(\varepsilon)\}$ согласно (9). Формально полученный ряд теории возмущений аналогичен решеточным моделям, используемым в теории неупорядоченных сплавов [10]. Для его анализа будем использовать диаграммный метод ГАФ [9]. Каждому члену ряда сопоставим диаграммы, состоящие из следующих элементов: 1) каждому узлу (n, ε) сопоставим кружок с индексом (n, ε) ; 2) каждому множителю $\Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}/F_n^\varepsilon$ — сплошную линию со стрелкой, идущей из узла (n, ε) в узел (n', ε') ; 3) каждому множителю $(-1) \cdot \Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}/F_n^\varepsilon$ — сплошную линию и пунктирную линию со стрелками, начинающимися и заканчивающимися на узле (n, ε) (рис. 1). Аналитическое представление каждого графического элемента следующее: 1) каждой жирной точке соответствует фактор $1/s$; 2) каждой сплошной линии со

стрелкой — множитель $\Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}/F_n^\varepsilon$; 3) каждой пунктирной линии со стрелкой — множитель $-\Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}/F_n^\varepsilon$; 4) каждому кружку (n, ε) — множитель $cN(\varepsilon)$ (пунктирный кружок не содержит множителя $cN(\varepsilon)$). По промежуточным индексам узлов производится суммирование. Таким образом, усредненная диффузионная функция $\langle P \rangle$ может быть представлена графически как сумма диаграмм, состоящих из последовательно соединенных сплошными и пунктирными линиями кружков. Все диаграммы можно разбить на два класса: диаграммы, начинающиеся и заканчивающиеся на одном и том же узле, и диаграммы, соединяющие разные узлы. На рис. 2,3 показаны примеры таких диаграмм. Введем функцию Грина, выделяя множитель, связанный с начальным узлом,

$$\langle P_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}(s) \rangle = cN(\varepsilon)F(\varepsilon)(\delta_{n,n'}\delta_{\varepsilon,\varepsilon'}G_1^\varepsilon(s) + G_{2;n-n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}), \quad (13)$$

где G_1 — „сингулярная“ часть функции Грина, которая описывает вероятность (Фурье-образ) того, что за время t диффундирующая частица останется в узле, где она находилась в начальный момент времени; $G_{2;n-n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}(s)$ — вероятность (Фурье-образ) перехода за время t из узла n в узел n' . Приближение ГАФ заключается в учете диаграммы для G_1^ε и $G_{2;n-n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}$, описывающих только последовательные переходы между парами узлов (рис. 2,3). Например, диаграмма V на рис. 2 описывает прыжки между тремя узлами, и ее вклад не учитывается. Как обычно, возникают неприводимые и приводимые диаграммы, которые в приближении ГАФ можно просуммировать. В результате имеем

$$G_\varepsilon^d(s) = \frac{1}{s + W_\varepsilon(s)}, \quad (14)$$

$$W_\varepsilon(s) = \sum_{n',\varepsilon'} \frac{cN(\varepsilon')\Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}/F(\varepsilon)}{1 + \Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}/sF(\varepsilon) + \Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}/sF(\varepsilon')}. \quad (15)$$

Самосогласованное приближение получается заменой в (15) множителей $1/s$ на функцию $G_1(s)$ для каждого узла [9]

$$W_\varepsilon(s) = \sum_{n',\varepsilon'} \frac{cN(\varepsilon')\Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}/F(\varepsilon)}{1 + \Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}G_1^\varepsilon(s)/F(\varepsilon) + \Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}G_1^{\varepsilon'}(s)/F(\varepsilon')}. \quad (16)$$

Аналогичным образом можно просуммировать все парные диаграммы для несингулярной части функции Грина. В результате для полной функции Грина получаем уравнение

$$G_{n-n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}(s) = G_1^\varepsilon(s)\delta_{n,n'}\delta_{\varepsilon,\varepsilon'} + \sum_{n'',\varepsilon''} G_1^\varepsilon(s)W_{n-n''}^{\varepsilon,\varepsilon''}(s)G_{2;n''-n'}^{\varepsilon'',\varepsilon'}(s), \quad (17)$$

где $W_{n-n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}$ находится аналогично (16)

$$W_{n-n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}(s) = \frac{cN(\varepsilon')\Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}/F(\varepsilon)}{1 + \Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}/G_1^\varepsilon(s)F(\varepsilon) + \Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}/G_1^{\varepsilon'}(s)F(\varepsilon')}. \quad (18)$$

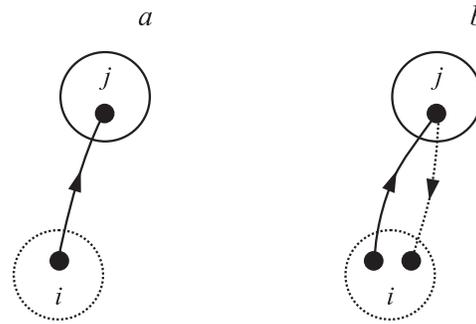


Рис. 1. Структура диаграмм, соответствующих множителям $\Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}/F_n^\varepsilon$ (a) и $-\Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}/F_n^\varepsilon$ (b).

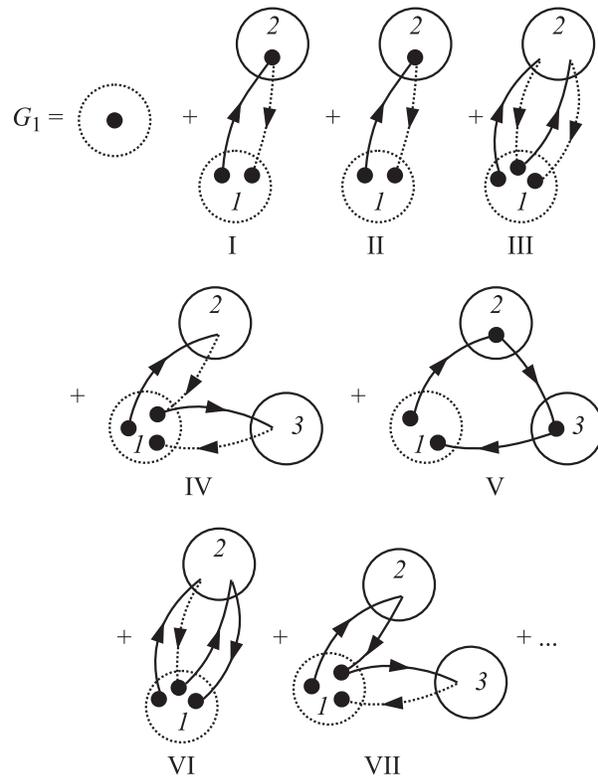


Рис. 2. Диаграммное разложение функции $G_1(s)$. Каждая диаграмма состоит из непрерывной цепочки сплошных и пунктирных стрелок, начинающейся и заканчивающейся на одном и том же узле. Диаграмма V не вносит вклада в парное приближение.

Умножая уравнение (17) на $cN(\varepsilon)F(\varepsilon)$ и используя условия нормировки (5), (6), можно получить квантовое диффузионное уравнение для конфигурационно-усредненной функции $\langle P \rangle$. Имеем

$$s\langle P_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'} \rangle = \delta_{n,n'}\delta_{\varepsilon,\varepsilon'}cN(\varepsilon')F_{n'}(\varepsilon') + \sum_{n'',\varepsilon''} \bar{\Gamma}_{n,n''}^{\varepsilon,\varepsilon''} \left\{ cN(\varepsilon) \frac{\langle P_{n'',n'}^{\varepsilon'',\varepsilon'} \rangle}{F_{n''}} - cN(\varepsilon'') \frac{\langle P_{n,n''}^{\varepsilon,\varepsilon''} \rangle}{F_n} \right\}, \quad (19)$$

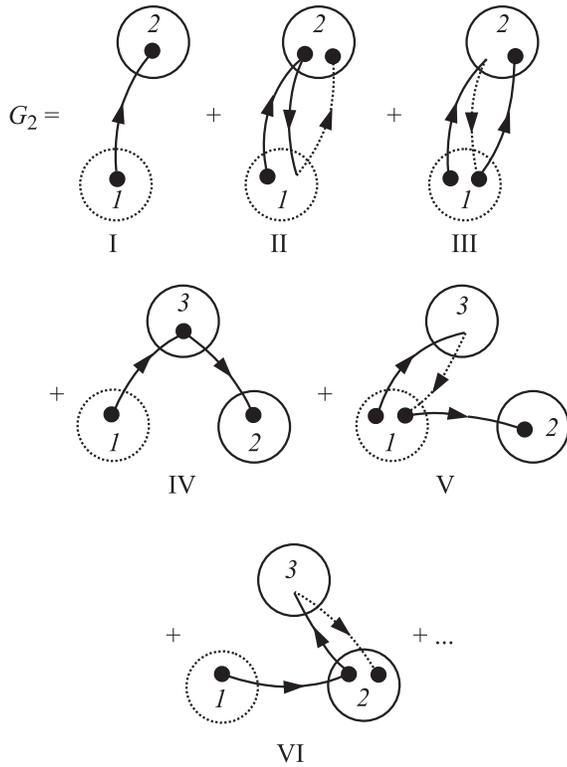


Рис. 3. Диаграммное разложение функции $G_2(s)$. Каждая диаграмма состоит из непрерывной цепочки сплошных и пунктирных стрелок, начинающейся на узле 1 и заканчивающейся на узле 2.

где

$$\bar{\Gamma}_{n-n'}^{\varepsilon, \varepsilon'}(s) = \frac{\Gamma_{n,n'}^{\varepsilon, \varepsilon'}}{1 + \Gamma_{n,n'}^{\varepsilon, \varepsilon'} / G_1^{\varepsilon}(s) F(\varepsilon) + \Gamma_{n,n'}^{\varepsilon, \varepsilon'} / G_1^{\varepsilon'}(s) F(\varepsilon')}. \quad (20)$$

Из выражения (19) видно, что структура квантового диффузионного уравнения полностью аналогична исходному неусредненному уравнению переноса (8) с заменой вероятности переходов Γ некоторой эффективной скоростью переходов $\bar{\Gamma}(s)$, зависящей от частоты s .

4. Проводимость в режиме переменной длины прыжка

Из уравнения (19) легко получить выражение для эффективной проводимости системы. Действительно, умножая (19) на $(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})^2$, используя условие нормировки (5) и трансляционную инвариантность конфигурационно-усредненной функции $\langle P_{n-n'}^{\varepsilon, \varepsilon'} \rangle$, имеем

$$\sigma(s) = \frac{e^2 s^2 c^2}{2dT\Omega} \sum_{\substack{n, n' \\ \varepsilon, \varepsilon'}} (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})^2 N(\varepsilon) N(\varepsilon') \bar{\Gamma}_{n-n'}^{\varepsilon, \varepsilon'}. \quad (21)$$

Для нахождения проводимости системы необходимо найти функцию $W^d(\varepsilon)$ вблизи уровня Ферми. Эта функ-

ция удовлетворяет нелинейному уравнению (15), которое, пользуясь малостью параметра s , можно представить в виде интегрального уравнения

$$W^d(\varepsilon, s) = \rho \iint \frac{N(\varepsilon') \Gamma^{\varepsilon, \varepsilon'}(R) / F(\varepsilon) d\mathbf{R} d\varepsilon'}{1 + \frac{\Gamma^{\varepsilon, \varepsilon'}(R)}{(s+W^d(\varepsilon, s))F(\varepsilon)} + \frac{\Gamma^{\varepsilon, \varepsilon'}(R)}{(s+W^d(\varepsilon', s))F(\varepsilon')}}}, \quad (22)$$

где ρ — плотность примесей. Будем искать решение этого уравнения в статическом пределе $s \rightarrow 0$. При этом вместо величины $W^d(\varepsilon)$ удобно в (22) перейти к новой функции $\mu(\varepsilon) = W^d(\varepsilon)F(\varepsilon)$. Предположим, что плотность состояний по энергиям отлична от нуля только вблизи уровня Ферми и имеет степенной вид [12]

$$N(\varepsilon) = \begin{cases} N_0 |\varepsilon|^m, & |\varepsilon| \leq E, \\ 0, & |\varepsilon| \geq E, \end{cases}$$

где E — полуширина распределения энергии примесных уровней. Введем новый неизвестный параметр $\lambda_c = -\ln \mu(0)$. Тогда, переходя к безразмерным переменным в (22), имеем

$$\frac{\mu(x)}{\mu(0)} = \left(\frac{\lambda_c}{\lambda_0} \right)^{4+m} \times \int_0^\infty \int_{-E/\lambda_c T}^{E/\lambda_c T} \frac{r^2 n(y) dr dy}{\exp(-\lambda_c (1-r - \frac{|x|}{2} - \frac{|y|}{2} - \frac{|x-y|}{2})) + \frac{\mu(0)}{\mu(x)} + \frac{\mu(0)}{\mu(y)}}, \quad (23)$$

где $\lambda_0 = [3(2\alpha)^3 / 4\pi T^{m+1} N_0 \rho]^{1/(4+m)}$ и $n(\varepsilon) = N(\varepsilon) / N_0$. В итоге получаем два уравнения для определения функции $\varphi(x) = \mu(x) / \mu(0)$ и параметра λ_c

$$\varphi(x) = \int_0^\infty \int_{-E/\lambda_c T}^{E/\lambda_c T} \frac{r^2 n(y) dr dy}{\exp(-\lambda_c (1-r - \frac{|x|}{2} - \frac{|y|}{2} - \frac{|x-y|}{2})) + \frac{1}{\varphi(x)} + \frac{1}{\varphi(y)}} \times \left[\int_0^\infty \int_{-E/\lambda_c T}^{E/\lambda_c T} \frac{r^2 n(y) dr dy}{\exp(-\lambda_c (1-r - |y|)) + 1 + \frac{1}{\varphi(y)}} \right]^{-1}, \quad (24)$$

$$1 = \left(\frac{\lambda_c}{\lambda_0} \right)^{4+m} \times \int_0^\infty \int_{-E/\lambda_c T}^{E/\lambda_c T} \frac{r^2 n(y) dr dy}{\exp(-\lambda_c (1-r - \frac{|x|}{2} - \frac{|y|}{2} - \frac{|x-y|}{2})) + \frac{1}{\varphi(x)} + \frac{1}{\varphi(y)}}. \quad (25)$$

Поскольку нахождение аналитического решения этих нелинейных интегральных уравнений не представляется возможным, использовалось численное интегрирование системы (24), (25) методом последовательных приближений. Рассматривался наиболее интересный случай

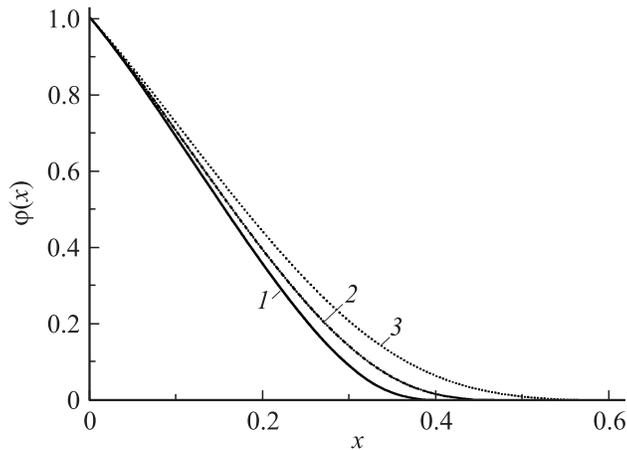


Рис. 4. Зависимость функции $\varphi(x)$ от безразмерной энергетической переменной $x = \varepsilon/T\lambda_c$ для постоянной плотности состояний $m = 0$ при $\lambda_0 = 20$ (1), 50 (2) и 1000 (3).

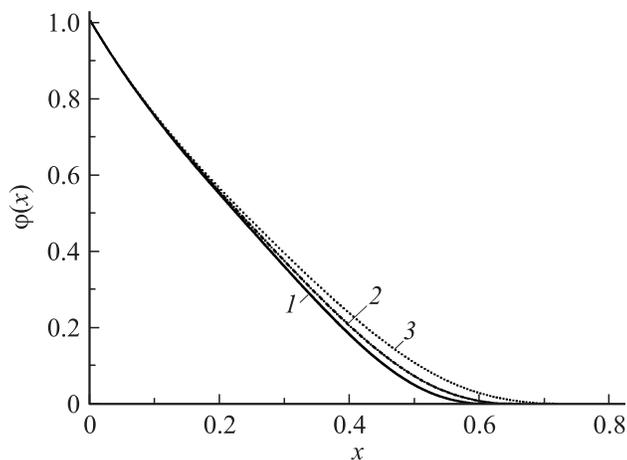


Рис. 5. Зависимость функции $\varphi(x)$ от безразмерной энергетической переменной $x = \varepsilon/T\lambda_c$ для квадратичной плотности состояний $m = 2$ при $\lambda_0 = 20$ (1), 50 (2) и 1000 (3).

достаточно широкого распределения по энергиям примесных центров, когда параметр $E/\lambda_c T \geq 1$ ($\lambda_c, \lambda_0 \gg 1$). Именно в этом режиме при низких температурах часто наблюдается зависимость Мотта (1) для проводимости. Решение уравнения (24) представлено на рис. 4, 5 для постоянной плотности состояний ($m = 0$) и для случая, когда имеется кулоновская щель в распределении по энергиям ($m = 2$) [12]. Непосредственное вычисление величины $\gamma_m = (\lambda_c/\lambda_0)^{m+4}$ с помощью (24), (25) при $\lambda_0 \rightarrow \infty$, что соответствует случаю протекания, дает $\gamma_0 \approx 7.3$ для постоянной плотности состояний $m = 0$. Это значение близко к значению $\gamma_0 \approx 8.9$, полученному методом теории протекания с учетом усреднения по эффективному слою с весовой функцией, пропорциональной плотности состояний и среднему числу связей центра с энергией ε [13]. Для случая кулоновской щели, когда $m = 2$, вычисление величины γ_2 с помощью (24), (25) дает $\gamma_2 \approx 204.9$, что также неплохо согла-

суется с расчетами, выполненными с помощью метода теории протекания. Для этого случая с учетом дополнительного усреднения [4,5] можно получить значение $\gamma_2 \approx 253.6$. Предыдущие результаты, полученные в работах [6,7,11] на основе диффузионного кинетического уравнения (8), дают соответственно $\gamma_0 = 2$ и $\gamma_2 = 30$, что намного меньше значений этих величин, следующих из теории протекания и расчетов настоящей работы.

Подставляя найденные решения в уравнение (21), которое теперь имеет вид

$$\sigma(s) = \frac{e^2 s^2 \rho^2}{2dT} \iiint \frac{N(\varepsilon') R^2 \Gamma^{\varepsilon, \varepsilon'}(R) d^3 R d\varepsilon d\varepsilon'}{1 + \frac{\Gamma^{\varepsilon, \varepsilon'}(R)}{(s+W^d(\varepsilon, s))F(\varepsilon)} + \frac{\Gamma^{\varepsilon, \varepsilon'}(R)}{(s+W^d(\varepsilon', s))F(\varepsilon')}}}, \quad (26)$$

находим проводимость системы в прыжковом режиме

$$\sigma_m(0) = \frac{\nu_0 e^2 \rho N_0 \gamma T_0^m}{40\alpha^2} \left(\frac{T_0}{T}\right)^{\frac{3}{m+4}} \exp\left(-\left(\frac{T_0}{T}\right)^{\frac{m+1}{m+4}}\right) A_m, \quad (27)$$

где

$$T_0 = \left(\frac{\gamma b \alpha^3}{\pi N_0 \rho}\right)^{\frac{1}{m+1}} \quad (28)$$

и A_m — численный коэффициент. Предэкспоненциальный множитель в (27) численно отличается от результатов работ [7,8,11], поскольку здесь корректно учтена зависимость функции Грина $G_1(\varepsilon)$ от энергии.

5. Обсуждение результатов и выводы

Несмотря на кажущееся различие описанных теоретических методов, основанных на решении основного кинетического уравнения, все они приводят к похожим выражениям для усредненной функции Грина. Это не является случайным совпадением, а есть следствие того, что исходная задача диффузии частицы по „случайным узлам“ тем или иным приближенным способом заменяется задачей диффузии по „случайным связям (барьерам)“. Проблема диффузии по случайным узлам является несравнимо более сложной задачей, поскольку в этом случае необходимо учитывать корреляции между связями, имеющими общий узел. Для решения задачи диффузии на решетках со статическим беспорядком ближайших барьеров была развита теория самосогласованного поля, которая позволила корректно описать поведение коэффициента диффузии в широкой области концентраций случайных связей, в том числе и вблизи порога протекания [14]. Попытка построения такой теории для задачи диффузии на решетках со статическим беспорядком узлов была предпринята в работе [15]. Оказалось, что приближение обобщенного „когерентного потенциала“, учитывающее корреляции связей, имеющих общий узел, достаточно хорошо описывает диффузию в задаче случайных узлов на решетке в широком диапазоне изменения их концентрации. Однако при подходе к порогу протекания этот метод

оказывается несостоятельным. Причиной этого является необходимость учета следующих членов разложения для диффузионной функции по концентрации доступных узлов вблизи порога протекания. Это приводит к выходу за рамки одноузельного приближения, что ведет к чрезвычайно сложному усложнению диаграммных рядов и не позволяет получить замкнутые выражения для диффузионной функции. Таким образом, построение последовательной микроскопической теории прыжкового переноса, которая, как известно, эквивалентна соответствующей задаче протекания, следует проводить на основе модели случайных барьеров с учетом прыжков носителей заряда на произвольные расстояния. Наиболее удобным подходом в этом случае оказывается диаграммный метод ГАФ [9]. Несмотря на то что этот метод был развит для задачи узлов [9], предположения, выдвинутые при его обосновании, фактически сводят соответствующую задачу узлов к некоторой эффективной задаче барьеров с прыжками на произвольные состояния. Единственное различие заключается в замене полной функции Грина в (20) на ее сингулярную часть G_1 , что справедливо для задачи барьеров вблизи порога протекания [14]. Таким образом, выбранное приближение, учитывающее многократные перескоки между парами узлов и пренебрежение корреляций между связями (парами узлов), полностью аналогично приближенно самосогласованного поля для задачи барьеров.

Попытка построить следующее за парным трехчастичное приближение (9) в рамках этого подхода не является последовательным разложением по концентрации случайных узлов, и, по-видимому, не дает улучшения двухчастичного приближения.

Итак, мы показали, что исследование прыжковой проводимости в системе со случайными примесными центрами в режиме переменной длины прыжка (VRH) может быть проведено на основе микроскопического подхода с использованием диффузионного кинетического уравнения. Для его решения использовался диаграммный метод ГАФ, полностью аналогичный методу „когерентного потенциала“ для задачи барьеров. При этом в отличие от ранее рассмотренных методов для усредненной диффузионной функции получается уравнение, структура которого имеет тот же вид, что и структура неусредненного уравнения. Решение этого уравнения для сингулярной части функции Грина, определяющей зависимость прыжковой проводимости от энергии, имеет пороговый вид, что принципиально отличается от предыдущих результатов, полученных на основе диффузионного уравнения [6–8,11]. Это означает, что примесные уровни с энергиями, лежащими на краях примесной зоны, не вносят вклада в проводимость. Это полностью согласуется с предположениями работ [4,5]. При этом для прыжковой проводимости получается закон Мотта (1) с численными коэффициентами, близкими по величине к значениям, получаемым в рамках теории протекания. Хорошее совпадение полученных результатов со всеми известными предельными случаями указывает на эффективность развитого подхода и возможность

его применения для других задач прыжкового переноса как в статическом, так и в динамическом режиме.

Список литературы

- [1] N.F. Mott. *Phil. Mag.* **19**, 835 (1969).
- [2] H. Böttger, V.V. Bryksin. *Hopping conduction in solids.* Akademie Verlag, Berlin (1985). 236 p.
- [3] A. Miller, E. Abrahams. *Phys. Rev.* **120**, 745 (1960).
- [4] M. Pollak. *J. Non-Cryst. Solids* **11**, 1 (1972).
- [5] H. Overhof. *Phys. Status Solidi B* **67**, 709 (1975).
- [6] B. Movaghar, W. Schirmacher. *J. Phys. C* **14**, 859 (1981).
- [7] D. Bourbie. *Phil. Mag.* **B 73**, 201 (1996).
- [8] O. Bleibaum, H. Böttger, V.V. Bryksin. *Phys. Rev. B* **34**, 5444 (1996).
- [9] C.R. Gochanour, H.C. Andersen, M.D. Fayer. *J. Chem. Phys.* **790**, 4254 (1979).
- [10] F. Yonezawa, T. Matsubara. *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **53**, 1 (1973).
- [11] М.П. Фатеев. *ФНТ* **32**, 879 (2006).
- [12] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. *Электронные свойства легированных полупроводников.* Наука, М. (1979). 351 с.
- [13] H. Overhoff, P. Tomas. *Phys. Rev. B* **53**, 13 187 (1996).
- [14] J.W. Haus, K.W. Kehr. *Phys. Rep.* **150**, 263 (1987).
- [15] М.П. Фатеев. *ТМФ* **149**, 253 (2006).