

Приближение самосогласованного поля в теории прыжкового переноса в неупорядоченных системах

М.П. Фатеев

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»
ул. Академическая, 1, г. Харьков, 61108, Украина
E-mail: mfateev@kipt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 26 апреля 2005 г., после переработки 27 октября 2005 г.

На основе линеаризованного уравнения баланса рассмотрена задача о прыжковой проводимости системы со случайно распределенными примесными центрами при низких температурах. С использованием диаграммных методов найдено самосогласованное выражение для конфигурационно-усредненной функции Грина, описывающей перенос заряда в неупорядоченной системе с учетом корреляций Ферми. Показано, что выбранное приближение соответствует хорошо известному приближению когерентного потенциала. В пределе низких частот найдено выражение для прыжковой проводимости в зависимости от температуры и частоты для степенного закона плотности состояний. Полученные результаты хорошо согласуются с перколяционным подходом и в статическом пределе приводят к закону Мотта.

На основі лінеаризованого рівняння балансу розглянуто задачу про стрибкову провідність системи з випадково розподіленими домішковими центрами при низьких температурах. З використанням діаграмних методів знайдено самоузгоджений вираз для конфігураційно-усередненої функції Гріна, що описує перенос заряду в неупорядкованій системі з урахуванням кореляцій Фермі. Показано, що обране наближення відповідає добре відомому наближенню когерентного потенціалу. У межі низьких частот знайдено вираз для стрибкової провідності залежно від температури й частоти щодо степеневого закону щільності станів. Отримані результати добре узгоджуються з перколяційним підходом і у статичній межі призводять до закону Мотта.

PACS: 72.20.-i, 72.20.Fg, 72.20.Dp

Ключевые слова: прыжковый перенос, диаграммные методы, функция Грина, корреляции Ферми.

1. Введение

Проблема прыжкового переноса в неупорядоченных системах — аморфных полупроводниках, сильно легированных полупроводниках, жидких металлах и т.д. — привлекает к себе большое внимание исследователей [1–3]. Это обусловлено как возросшей практической важностью таких материалов, так и необычностью многих физических явлений, происходящих в разупорядоченных средах. Центральной проблемой теории прыжкового переноса является нахождение средней электропроводности системы со случайно распределенными примесными центрами, по которым происходит перенос заряда. Для решения этой задачи были развиты различные методы [3]. При этом наиболее

часто используются полуфеноменологические подходы, основанные на теории перколяции и приближении эффективной среды. В этих приближениях прыжковый перенос описывается в терминах проводимости случайной сетки сопротивлений. Перколяционный подход основан на том факте, что существует резкая экспоненциальная зависимость темпов переходов от характерных разностей энергий и расстояний между центрами, обменивающимися зарядом. Таким образом, в применении к задаче о случайной сетке сопротивлений перколяционный подход оказывается эффективным приближенным методом, позволяющим избежать прямого решения кинетического уравнения переноса заряда по случайно расположенным примесным центрам, которые имеют случайное распределение

уровней энергий. В приближении эффективной среды задача о случайной сетке сопротивлений сводится к задаче об упорядоченной сетке эффективных сопротивлений. Из условия самосогласования находится значение эффективного сопротивления, которое определяет усредненную проводимость системы.

Для случая R -протекания или NNN проводимости (NNN – nearest neighbor hopping), когда темпы переходов зарядов зависят только от расстояний между узлами, оба метода приводят к подобным результатам, которые хорошо согласуются с численными расчетами. В случае R, ε - протекания или VRH-проводимости (VRH – variable range hopping), когда темпы переходов зависят как от уровней энергий, так и расстояний между примесями, ситуация более сложная. При этом использование методов теории протекания для расчета проводимости приводит к известному закону Мотта. В то же время стандартное приближение эффективной среды дает заметное отклонение от этого закона [4]. Было предложено несколько искусственных приемов, чтобы обойти эту проблему [5,6]. Однако непонятно, каким образом корректно интегрировать эти подходы в приближение эффективной среды.

В силу полуэмпирического характера этих методов основным критерием их применимости чаще всего является не внутренняя самосогласованность теории, а сравнение с данными компьютерных расчетов. С целью преодоления указанных трудностей и отказа от феноменологического рассмотрения прыжкового переноса посредством случайной сетки сопротивлений были развиты различные диаграммные методы нахождения конфигурационно-усредненной функции Грина, описывающей перенос носителей заряда, как для случая R -протекания, так и для случая R, ε - протекания. В то время как в работе [7] использовалась модель связей в топологии деревьев Кейли, авторы работ [8] и [9] не вводили никакой вспомогательной решетки. В [8] для решения задачи R, ε -протекания использовали модифицированную диаграммную технику Гогенауера, Андерсена, Фауэра (ГАФ) [10], основанную на самосогласованном расчете функции Грина в парном приближении, справедливом для малой концентрации примесей. В отличие от подхода ГАФ авторы [9] использовали общий метод нахождения усредненной функции Грина, впервые предложенный Брыксыным и Яшиным (БЯ) [11] и модифицированный Брыксыным [12], для задачи R -протекания. Этот подход формально справедлив для любой концентрации примесных центров и является близким к методу когерентного потенциала, который широко используется для анализа различных неупорядочен-

ных систем со статическим беспорядком [13]. В случае R -протекания оба подхода приводят к близким результатам, согласующимся с теорией протекания и приближением эффективной среды. Однако обобщение диаграммных методов на случай R, ε - протекания натолкнулось на значительные трудности. В этом случае для нахождения конфигурационно-усредненной функции Грина необходимо решать самосогласованное квантовое диффузионное уравнение, описывающее процесс диффузии в пространстве энергий. В работе [8] это интегральное уравнение аппроксимировалось алгебраическим уравнением. Далее с помощью процедуры самосогласования ГАФ находили диагональную часть усредненной функции Грина, которая в этом приближении определяет проводимость системы. Путем разделения усреднения по длинам прыжков и темпам переходов между примесными узлами найдено выражение для статической прыжковой проводимости в пределе сильного взаимодействия с фононами. Несмотря на совпадение полученных результатов с результатами теории протекания, предложенный метод решения задачи R, ε -протекания нельзя признать полностью удовлетворительным. В работе [9] на основе модифицированного подхода БЯ [12] было впервые получено квантовое диффузионное уравнение для функции Грина в задаче R, ε -протекания. Путем введения неизвестного параметра и перехода к безразмерным масштабным переменным было найдено выражение для прыжковой проводимости как в статическом, так и динамическом режиме с точностью до численных коэффициентов. Неизвестный параметр определяли из условия обращения в нуль дополнительного вклада в выражение для электропроводности. К сожалению, выбранная процедура самосогласования носит чисто подгоночный характер и не имеет строгого диаграммного обоснования [12]. 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 Грина при вычислении проводимости системы для случая R, ε -протекания. Более того некоторые коэффициенты разложения, которые входят в выражение для частотной зависимости электропроводности, обращаются в бесконечность для размерности пространства меньшем или равном двум $d \leq 2$ [9]. Следовательно, несмотря на хорошее совпадение полученных результатов с законом Мотта и частотной зависимостью проводимости, остаются неопределенными некоторые коэффициенты, которые при выбранном условии самосогласования

определяются из решения квантового диффузионного уравнения.

Цель настоящей работы заключается в развитии микроскопического подхода для описания прыжкового переноса, который был бы избавлен от указанных недостатков. Здесь обобщим подход БЯ [11] на случай R, ε -протекания. В отличие от работы [9], будет использовано условие самосогласования, которое основано на диаграммном представлении и которое соответствует известному методу когерентного потенциала. Это позволяет определить прыжковую проводимость как в статическом, так и динамическом случае и найти все неизвестные предэкспоненциальные коэффициенты. При этом удастся избежать нахождения решения сложного интегрального диффузионного уравнения в пространстве энергии.

2. Основные уравнения прыжковой проводимости

Для расчета тока использован подход, основанный на введении функции условной вероятности $P_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}(t)$ (диффузионной функции), которая имеет смысл вероятности обнаружения электрона на узле n с энергией ε в момент времени t , если при $t = 0$ он находился на узле n' с энергией ε' [3]. Согласно этому подходу, в линейном по внешнему электрическому полю \mathbf{E} приближении, выражение для тока имеет вид

$$\mathbf{j}(s) = \frac{e^2 s^2}{2T\Omega} \sum_{n,n'} (\mathbf{R}_{n'} - \mathbf{R}_n) (\mathbf{E} \mathbf{R}_{n'}) P_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}(s), \quad (1)$$

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. Следовательно, для кубической решетки размерности d получаем соотношения для электропроводности:

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

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

$$sP_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'} = \delta_{n,n'} \delta_{\varepsilon,\varepsilon'} F_{n'}(\varepsilon') + \sum_{n'',\varepsilon''} \Gamma_{n,n''}^{\varepsilon,\varepsilon''} \left\{ \frac{P_{n'',n'}^{\varepsilon'',\varepsilon'}}{F_{n''}} - \frac{P_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}}{F_n} \right\}. \quad (3)$$

Здесь $F_n(\varepsilon) = f_F^n(\varepsilon)(1 - f_F^n(\varepsilon))$, где $f_F^n(\varepsilon)$ — функция распределения Ферми с энергией ε 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:

$$\sum_{n',\varepsilon'} sP_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'} = F_n(\varepsilon), \quad (4)$$

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

Ниже полагаем, что Γ не зависит от 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 может быть представлена в виде [1–3]

$$\Gamma_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'} = v_0 \exp \left(-2\alpha |\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}| - \frac{|\varepsilon - \varepsilon'| + |\varepsilon| + |\varepsilon'|}{2T} \right), \quad (6)$$

где α — обратный радиус Бора, v_0 — фоновая частота. Здесь и далее будем считать, что все энергии отсчитываются от уровня Ферми.

3. Диаграммный метод

Предположим, что часть узлов случайным образом занята примесями, которые имеют случайное распределение уровней энергии. В этом случае уравнение (3) можно представить в виде стохастического уравнения:

$$sP_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'} = \delta_{n,n'} \delta_{\varepsilon,\varepsilon'} c_{n'}(\varepsilon') F_{n'}(\varepsilon') + \sum_{n'',\varepsilon''} \Gamma_{n,n''}^{\varepsilon,\varepsilon''} \left\{ c_{n''}(\varepsilon'') \frac{P_{n'',n'}^{\varepsilon'',\varepsilon'}}{F_{n''}} - c_n(\varepsilon) \frac{P_{n,n'}^{\varepsilon,\varepsilon'}}{F_n} \right\}, \quad (7)$$

где $c_n(\varepsilon)$ случайная величина, определяющая распределение примесей по энергиям и пространству:

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

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:

$$\langle c_n(\varepsilon) \rangle = cN(\varepsilon);$$

$$\langle c_n(\varepsilon)c_{n'}(\varepsilon') \rangle = c^2N(\varepsilon)N(\varepsilon'), \quad n \neq n';$$

$$\langle c_n(\varepsilon)c_n(\varepsilon') \rangle = cN(\varepsilon)\delta_{\varepsilon\varepsilon'}. \quad (8)$$

Здесь $N(\varepsilon)$ — вероятность распределения уровней энергии примесей, c — концентрация примесей на узлах решетки. Диффузионное уравнение для функции условной вероятности удобно представить в матричном виде, используя формализм Дирака:

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

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

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

$$\mathbf{F} = \sum_{n,\varepsilon} c_n(\varepsilon) F_n(\varepsilon) |n,\varepsilon\rangle\langle n,\varepsilon| = \sum_{n,\varepsilon} c_n(\varepsilon) \mathbf{f}_n(\varepsilon); \quad (9)$$

где базисные векторы $|n,\varepsilon\rangle$ являются ортогональными и образуют полный набор:

$$\sum_{n,\varepsilon} |n,\varepsilon\rangle\langle n,\varepsilon| = \mathbf{1}.$$

Тогда уравнение (7) примет вид

$$s\mathbf{P} = \mathbf{F} + \mathbf{V}\mathbf{P}. \quad (10)$$

Итерация уравнения (7) по свободному члену приводит к ряду

$$\begin{aligned} \mathbf{P} = & s^{-1} \sum_{n,\varepsilon} c_n(\varepsilon) \mathbf{f}_n(\varepsilon) + \\ & + s^{-2} \sum_{\substack{n,\varepsilon \\ n',\varepsilon'}} c_n(\varepsilon) c_{n'}(\varepsilon') \mathbf{v}_n(\varepsilon) \mathbf{f}_{n'}(\varepsilon') + \\ & + s^{-3} \sum_{\substack{n,\varepsilon;n',\varepsilon'; \\ n'',\varepsilon''}} c_n(\varepsilon) c_{n'}(\varepsilon') c_{n''}(\varepsilon'') \mathbf{v}_n(\varepsilon) \mathbf{v}_{n'}(\varepsilon') \mathbf{f}_{n''}(\varepsilon'') + \dots \end{aligned} \quad (11)$$

Усредним каждый член этого ряда по случайному распределению $\{c_n(\varepsilon)\}$ согласно (8). Формально полученный ряд теории возмущений аналогичен решеточным моделям, используемым в теории неупорядоченных сплавов [14]. Для его анализа применим метод куммулянтных разложений [14,15]. При этом произведение любых случайных величин $c_n(\varepsilon)$ может быть разбито на сумму произведений куммулянтных средних от этих величин:

$$\begin{aligned} \langle c_n(\varepsilon) \rangle &= \langle c_n(\varepsilon) \rangle^c; \quad \langle c_n(\varepsilon)c_{n'}(\varepsilon') \rangle = \langle c_n(\varepsilon) \rangle^c \langle c_{n'}(\varepsilon') \rangle^c + \langle c_n(\varepsilon)c_{n'}(\varepsilon') \rangle^c, \\ \langle c_n(\varepsilon)c_{n'}(\varepsilon')c_{n''}(\varepsilon'') \rangle &= \langle c_n(\varepsilon) \rangle^c \langle c_{n'}(\varepsilon') \rangle^c \langle c_{n''}(\varepsilon'') \rangle^c + \langle c_n(\varepsilon) \rangle^c \langle c_{n'}(\varepsilon')c_{n''}(\varepsilon'') \rangle^c + \\ &+ \langle c_{n'}(\varepsilon') \rangle^c \langle c_n(\varepsilon)c_{n''}(\varepsilon'') \rangle^c + \langle c_{n''}(\varepsilon'') \rangle^c \langle c_n(\varepsilon)c_{n'}(\varepsilon') \rangle^c + \langle c_n(\varepsilon)c_{n'}(\varepsilon')c_{n''}(\varepsilon'') \rangle^c; \end{aligned}$$

и так далее. Результат усреднения удобно представить в графическом виде, как показано на рис. 1. Пустой точке сопоставляется множитель $\mathbf{f}_n(\varepsilon)$, жирным точкам сопоставляется $\mathbf{v}_n(\varepsilon)$. Всем тонким внутренним линиям соответствует множитель s^{-1} , пучок пунктирных (примесных) линий, соединяющий m точек, обозначает куммулянтное среднее Q_m от m множителей:

$$Q_m(c; \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_m) = \langle c_1(\varepsilon_1)c_2(\varepsilon_2)\dots c_m(\varepsilon_m) \rangle^c. \quad (12)$$

Если концентрация примесей мала $c \ll 1$, то выражение для куммулянтов Q_m заметно упрощается. Пренебрегая более высокими степенями c^n , имеем

$$\langle c_1(\varepsilon_1)c_2(\varepsilon_2)\dots c_m(\varepsilon_m) \rangle^c =$$

$$= \delta_{12}\delta_{1m}\dots\delta_{(m-1)m}\delta_{\varepsilon_1\varepsilon_2}\delta_{\varepsilon_1\varepsilon_m}\dots\delta_{\varepsilon_{m-1}\varepsilon_m} cN(\varepsilon_1). \quad (13)$$

На рис. 1 видно, что все диаграммы подразделяются на приводимые (которые можно разбить на две или более частей вертикальными сечениями, не пересекающими примесные линии) и неприводи-

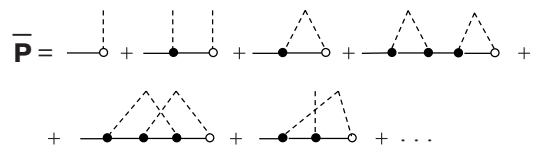


Рис. 1. Диаграммное представление конфигурационно-усредненной функции $\bar{\mathbf{P}}$.

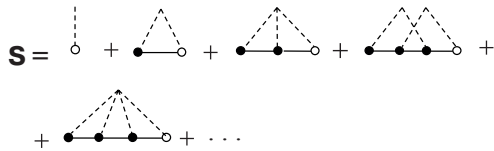


Рис. 2. Диаграммное представление функции \mathbf{S} .

мые. Обозначим через \mathbf{S} сумму всех неприводимых диаграмм, которые содержат пустую точку. Эти диаграммы изображены на рис. 2. Сумму всех остальных диаграмм обозначим через \mathbf{G} . Тогда конфигурационно-усредненная диффузионная функция равна:

$$\bar{\mathbf{P}} = \mathbf{S}\mathbf{G}. \quad (14)$$

В свою очередь, класс диаграмм, относящихся к функции \mathbf{G} , может быть разбит на класс неприводимых диаграмм, сумму которых обозначим через \mathbf{W} (массовый оператор), и класс приводимых диаграмм. Используя стандартную процедуру теории возмущений, легко получить уравнение Дайсона для функции \mathbf{G} :

$$s\mathbf{G} = \mathbf{I} + \mathbf{W}\mathbf{G}, \quad (15)$$

где \mathbf{I} — единичный оператор в пространстве состояний \mathbf{R}, ε . На рис. 3. изображены диаграммы, представляющие массовый оператор \mathbf{W} . Как видно из (15), функция \mathbf{G} представляет собой функцию Грина, описывающую диффузию частицы в пространстве четырех измерений \mathbf{R}, ε . Функция \mathbf{S} учитывает корреляции, которые возникают из-за случайного распределения начальных условий в (7).

4. Температурная и частотная зависимость прыжковой проводимости при низких температурах

Точное суммирование диаграммных рядов для функций \mathbf{W} и \mathbf{S} невозможно. Однако можно провести частичное суммирование этих рядов путем учета только однопучковых диаграмм (см. рис. 4) [11]. В пределе $c \rightarrow 0$, это приближение соответствует приближению когерентного потенциала [14]. Используя формальное сходство ряда для диффузионной функции (11) с рядом теории возмущений для функции Грина в модели сплава с диагональным беспорядком, легко получить уравнения для \mathbf{W} и \mathbf{S} , соответствующие приближению когерентного потенциала для случая $c \ll 1$:

$$\mathbf{W} = \sum_{n, \varepsilon} \mathbf{w}_n(\varepsilon); \quad \mathbf{S} = \sum_{n, \varepsilon} \mathbf{s}_n(\varepsilon);$$

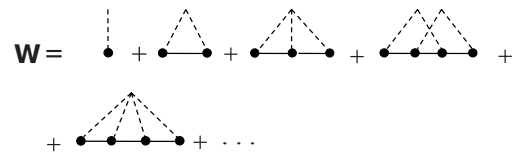


Рис. 3. Диаграммное представление массового оператора \mathbf{W} .

$$\mathbf{w}_n(\varepsilon) = cN(\varepsilon)\mathbf{v}_n(\varepsilon) + \mathbf{v}_n(\varepsilon)\mathbf{G}\mathbf{w}_n(\varepsilon); \quad (16)$$

$$\mathbf{s}_n(\varepsilon) = cN(\varepsilon)\mathbf{f}_n(\varepsilon) + \mathbf{v}_n(\varepsilon)\mathbf{G}\mathbf{s}_n(\varepsilon). \quad (17)$$

На языке диаграммной техники указанное приближение соответствует суммированию всех однопучковых диаграмм с заменой тонких внутренних линий на толстые, соответствующие полным функциям Грина \mathbf{G} (см. рис. 4). К сожалению, точное решение системы уравнений (16), (17) в отличие от модели сплава с диагональным беспорядком невозможно, поскольку оператор $\mathbf{w}_n(\varepsilon)$ является недиагональным. Это приводит к необходимости самосогласованного решения системы зацепляющихся уравнений для матричных элементов операторов $\mathbf{w}_n(\varepsilon)$ и $\mathbf{s}_n(\varepsilon)$. Исключение составляет только случай, когда оператор \mathbf{G} является диагональным оператором. При этом вклады от различных пар узлов расцепляются, и задача сводится к приближению самосогласованного поля для выделенной пары узлов [9,10]. Заменяя в (16) оператор \mathbf{G} на \mathbf{g}_d (где \mathbf{g}_d — диагональная часть оператора \mathbf{G}), с учетом (9) получаем:

$$\mathbf{S} = \langle \mathbf{F} \rangle = \sum_{n, \varepsilon} cF_n(\varepsilon)N(\varepsilon)|n, \varepsilon\rangle\langle n, \varepsilon|,$$

$$\mathbf{W} = \mathbf{W}_d - \mathbf{W}_{nd} = \sum_{\substack{n, n' \\ \varepsilon, \varepsilon'}} cN(\varepsilon) \frac{\Gamma_{n, n'}^{\varepsilon, \varepsilon'} / F_{n'}(\varepsilon')}{1 + \Gamma_{n, n'}^{\varepsilon, \varepsilon'} g_d(s, \varepsilon') / F_{n'}(\varepsilon')} \times$$

$$\times (|n, \varepsilon\rangle\langle n', \varepsilon'|) \langle n', \varepsilon'|,$$

$$\text{где } g_d(s, \varepsilon) = \frac{1}{s + \omega_d(s, \varepsilon)}. \quad (18)$$

В силу трансляционной инвариантности функции $\omega_d = \langle n, \varepsilon | \mathbf{W}_d | n, \varepsilon \rangle$, и $g_d = \langle n, \varepsilon | \mathbf{g}_d | n, \varepsilon \rangle$ не зависят от n . Предполагая, что частота перескоков $\Gamma_{nm'}$ слабо изменяется на атомных расстояниях, можно перейти от суммирования к интегрированию по пространству в (18). В результате диагональная часть массового оператора \mathbf{W} равна:

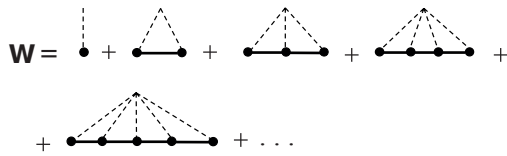


Рис. 4. Диаграммы, представляющие однопучковый вклад в массовый оператор \mathbf{W} .

$$w_d(s, \varepsilon) = \rho \int \frac{N(\varepsilon') \Gamma^{\varepsilon', \varepsilon}(R) / F(\varepsilon)}{1 + \Gamma^{\varepsilon', \varepsilon}(R) / [s + w_d(s, \varepsilon)] F(\varepsilon)} d\mathbf{R}_d d\varepsilon', \quad (19)$$

где ρ — плотность примесей. Уравнение (19) представляет собой замкнутое самосогласованное уравнение для неизвестной величины $w_d(s, \varepsilon)$. В отсутствие разброса по энергиям, когда $N(\varepsilon) = \delta(\varepsilon)$, уравнение (19) совпадает с самосогласованным уравнением, полученным в работе [11] для случая R -протекания.

Предположим, что плотность состояний по энергиям имеет степенной вид вблизи энергии Ферми:

$$N(\varepsilon) = N_0 |\varepsilon|^m. \quad (20)$$

Для того чтобы решить уравнение (19), введем новую безразмерную функцию $\lambda_c(s, \varepsilon)$ так, что

$$v_0 \exp(-\lambda_c(s, \varepsilon) + |\varepsilon|/2T) = (s + w_d). \quad (21)$$

Предполагая, что $\lambda_c \gg \varepsilon/T \gg 1$ с точностью до логарифмических членов, можно выполнить интегрирование в (19) путем замены подынтегрального выражения ступенчатой Θ -функцией Ферми, которая равна нулю, если $\lambda_c > 2\alpha R + (|\varepsilon - \varepsilon'| + |\varepsilon'|)/2T$. В результате интегрирования (19) получаем:

$$w_d(s, \varepsilon) = v_0 \lambda_c(s, \varepsilon)^{m+d+1} \left(\frac{T}{T_0}\right)^{m+1} \times \exp(-\lambda_c(s, \varepsilon) + |\varepsilon|/2T), \quad (22)$$

где $\Gamma(x)$ — Гамма функция. В статическом пределе ($s \rightarrow 0$), функция $\lambda_c(s, \varepsilon)$ зависит только от температуры, получаем:

$$\lambda_c = \left(\frac{T_0}{T}\right)^{\frac{m+1}{m+1+d}}, \quad (23)$$

где

$$T_0 = \left(\frac{\alpha^d}{\rho N_0} \frac{2^{d-2} \Gamma(d/2)(m+d+1)!}{\pi^{d/2}(d-1)!m!}\right)^{(1/m+1)}. \quad (24)$$

Найдем выражение для электропроводности. В выбранном приближении диффузионная функция $\overline{\mathbf{P}}$ удовлетворяет уравнению

$$s\overline{\mathbf{P}} = \langle \mathbf{F} \rangle + \mathbf{W}\overline{\mathbf{P}}. \quad (25)$$

Подставляя это соотношение в выражение для электропроводности (2), с учетом условий нормировки (4) и требований трансляционной инвариантности имеем:

$$\sigma(s) = \frac{e^2 c}{2dT\Omega} \sum_{\substack{n, n' \\ \varepsilon, \varepsilon'}} (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})^2 \langle n, \varepsilon | \mathbf{W} | n', \varepsilon' \rangle F_{n'}(\varepsilon'). \quad (26)$$

Переходя от суммирования к интегрированию, с учетом (20), легко выполнить интегрирование в (26). В результате получаем:

$$\sigma(s) = \frac{2^{m+1} m!(d+1)}{(d+m+3)(d+m+2)} v_0 \lambda_c(s)^{m+d+3} \left(\frac{T}{T_0}\right)^{m+1} \frac{e^2 \rho N_0 T^m}{(2\alpha)^2} \exp(-\lambda_c(s)), \quad (27)$$

где функция $\lambda_c(s)$ берется на уровне Ферми. Как видно из (27), в статистическом пределе для постоянной и параболической зависимости плотности состояний от энергии выполняются, соответственно, законы Мота [2] (для $m = 0$) и Эфроса ($m = 2$) [1]:

$$\sigma(0) = \frac{2^{m+1} m!(d+1)}{(d+m+3)(d+m+2)} \frac{e^2 \rho N_0 v_0}{(2\alpha)^2} T^m \left(\frac{T_0}{T}\right)^{\frac{2(m+1)}{m+1+d}} \exp\left(-\left(\frac{T_0}{T}\right)^{\frac{m+1}{m+1+d}}\right). \quad (28)$$

Для произвольной степенной зависимости плотности состояний полученное выражение (28) согласуется с экспоненциальной зависимостью, найденной из перколяционных соображений (критерий

связей) [16]. Непосредственное сравнение по температурной зависимости проводимости (28) с экспериментальными данными затруднено. Действительно, в условиях, когда энергия активации про-

водимости зависит от температуры, трудно с полной уверенностью установить закон изменения проводимости как из-за ограниченности температурного интервала измерений, так из-за неопределенности, связанной с предэкспоненциальным множителем. Так результаты экспериментальных измерений проводимости аморфных германия и кремния в интервале температур 40–400 К описывались зависимостью $\sigma \approx T^n \exp[-(T_0/T)^m]$ [17]. Оказалось, что хорошее согласие с экспериментом может быть достигнуто в широком интервале значений m за счет подбора параметра n . По-видимому, в настоящее время нельзя достаточно точно определить каким значениям n и m соответствуют имеющиеся экспериментальные данные [18].

Используя уравнения (22) и (27) для $(\sigma(s) - \sigma(0))/\sigma(0) \ll 1$, можно найти масштабное соотношение для частотной зависимости проводимости, которое часто используется для анализа экспериментальных данных [19,20]:

$$\frac{\sigma(s)}{\sigma(0)} \ln \frac{\sigma(s)}{\sigma(0)} = \frac{s}{s_0}, \quad (29)$$

где s_0 определяется из выражения

$$s_0 = (m + 1 + d) \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{m+1}{m+1+d}} v_0 \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{\frac{m+1}{m+1+d}} \right]. \quad (30)$$

При получении (29) мы пренебрегли зависимостью от частоты предэкспоненциального множителя в соотношении (27) для проводимости. Масштабное соотношение (29) для случая R, ϵ -протекания было получено впервые в работе [9], но с другим выражением для коэффициента s_0 .

5. Выводы

Показано, что исследование прыжковой проводимости в системе со случайными примесными центрами может быть проведено на основе метода самосогласованного поля, являющегося аналогом метода когерентного потенциала. Хорошее совпадение полученных результатов со всеми известными предельными случаями указывает на эффективность развитого подхода и возможность его использования для других задач прыжкового переноса. Следует отметить, что альтернативный метод нахождения прыжковой проводимости, основанный на диаграммной технике ГАФ, может быть непосредственно получен в рамках рассмотренного подхода путем выборочного суммирования членов усредненного ряда (11), относящихся к выбранной паре примесей. Этот

подход позволяет учесть интерференционные диаграммы, соответствующие выбранной паре узлов. В результате получается аналогичное (18) уравнение для массового оператора \mathbf{W}_d , матричные элементы которого удовлетворяют условиям симметрии $\langle n, \epsilon | \mathbf{W}_d | n', \epsilon' \rangle F_{n'}(\epsilon') = \langle n', \epsilon' | \mathbf{W}_d | n, \epsilon \rangle F_n(\epsilon)$. Это отличие приводит к несущественным изменениям численных коэффициентов в выражении для электропроводности, как для случая R -протекания, так и для случая R, ϵ -протекания.

1. Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос, *Электронные свойства легированных полупроводников*, Наука, Москва (1979).
2. В.Л. Бонч-Бруевич, И.П. Звягин, Р. Кайпер, А.Г. Миронов, Р. Эндерлайн, Б. Эссер, *Электронная теория неупорядоченных полупроводников*, Наука, Москва (1979).
3. H. Böttger and V.V. Bryksin, *Hopping Conduction in Solids*, Akademie-Verlag, Berlin (1985).
4. O. Bleibaum, H. Böttger, V.V. Bryksin, F. Schulz, *Phys. Rev.* **B51**, 14020 (1995).
5. O. Bleibaum, H. Böttger, and V.V. Bryksin, *Phys. Rev.* **B53**, 13190 (1996).
6. H. Overhoff and P. Tomas, *Phys. Rev.* **B53**, 13187 (1996).
7. B. Movaghar and W. Schirmacher, *J. Phys.* **C14**, 859 (1981).
8. D. Bourbie, *Philos. Mag.* **B73**, 201 (1996).
9. O. Bleibaum, H. Böttger, and V.V. Bryksin, *Phys. Rev.* **B54**, 5444 (1996).
10. C.R. Gochanour, H.C. Andersen, and M.D. Fayer, *J. Chem. Phys.* **70**, 4254 (1979).
11. В.В. Брыксин, Г.Ю. Яшин, *ФТТ* **25**, 3025 (1983).
12. В.В. Брыксин, *ФТТ* **26**, 1362 (1984).
13. J.W. Haus and K.W. Kehr, *Phys. Rep.* **150**, 263 (1987).
14. F. Yonezawa and T. Matsubara, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **53**, 1 (1973).
15. R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **17**, 1100 (1962).
16. M. Pollak, *J. Non-Cryst. Solids* **11**, 1 (1972).
17. A.J. Lewis, *Phys. Rev.* **B13**, 2565 (1976).
18. R.M. Hill, *Phys. Status Solidi* **35**, K29 (1976).
19. J.R. Macdonald, *Phys. Rev.* **B49**, 9428 (1994).
20. J.C. Dyre, *Phys. Rev.* **B48**, 12511 (1993).

Self-consistent approach for the theory of hopping transport in disordered systems

M.P. Fateev

Using the linearized equations of balance the problem of hopping conductivity for a system with random distributed impurity centers is considered at low temperatures. A self-consistent expression for the configuration-average

Green function describing transfer of a charge in the disordered system with due account of the Fermi correlation is found by the diagrammatic methods. It is shown, that the chosen approximation corresponds to the well-known approximation of coherent potential. Within the limits of low frequencies an expression for hopping conductivity as a function of temperature

and frequency for the power-law of density of states is derived. The results obtained are in good agreement with the percolation approach and in a static limit lead to the Mott law.

Keywords: hopping transport, diagrammatic methods, Green function, Fermi correlations.