Письма в ЖЭТФ, том 17, вып. 9, стр. 522 – 525 5 мая 1973 г.

УРОВЕНЬ ПРОТЕКАНИЯ В ТРЕХМЕРНОМ СЛУЧАЙНОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

А.С.Скал, Б.И.Шкловский, А.Л. Эфрос

В последние годы идеи теории протекания стали широко применяться в теории неупорядоченных систем, в особенности для описания электропроводности легированных кристаллических [1, 2] и аморфных полупроводников [3 – 6]. При этом естественным образом возникла математическая задача о протекании в континууме, которая в идейном отношении связана с исследовавшимися ранее решеточными задачами "узлов" и "связей" [7], но не сводится к ним. Эта новая задача формулируется следующим образом. Пусть во всем пространстве задана произвольная случайная функция $V(\mathbf{r})$ с конечным радиусом корреляции (потенциальная энергия). Без ограничения общности будем считать, что среднее значение $\langle V \rangle$ равно нулю. Требуется определить так называемый уровень протекания ϵ_{Π}, т. е. то минимальное значение энергии ϵ, при котором классически доступные области, где $\epsilon > V(\mathbf{r})$, образуют пути, уходящие на макроскопические расстояния.

В работах [1, 2] показано, что в целом ряде случаев величина ϵ_{Π} определяет энергию активации проводимости, с достаточной точностью измеряемую экспериментально.

Метод решения континуальных задач о протекании на ЭВМ был впервые предложен нами в работе [8]. Там же этот метод был проверен с помощью двухмерной задачи, для которой известно точное решение. В этой работе впервые сообщаются результаты, касающиеся трехмерных задач.

Цель нашей работы состояла в том, чтобы понять, сколь сильно зависит результат от тех или иных свойств потенциала. Нас в основном интересовал гауссов потенциал V, определяемый соотношением

$$V(\mathbf{r}) = \int K(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\, f(\mathbf{r}')\, d^3 r', \tag{1}$$

где f – случайная гауссова функция с коррелятором

$$\langle f(\mathbf{r})\, f(\mathbf{r}') \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \tag{2}$$

а ядро $K(\mathbf{r})$ достаточно быстро убывает с r за пределами радиуса корреляции r_o. Функция распределения потенциала

$$F(V) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\,\gamma} \exp\left(-\frac{V^2}{\gamma^2}\right), \quad \text{где} \quad \gamma^2 = 2\int K^2(\mathbf{r})\, d^3 r. \tag{3}$$

Ниже мы будем говорить не об энергии протекания ϵ_{Π}, а о безразмерной величине ν_c – доле пространства, где $V < \epsilon_{\Pi}$.

$$\nu_c = \int_{-\infty}^{\epsilon_{\Pi}} F(V)\, dV. \tag{4}$$

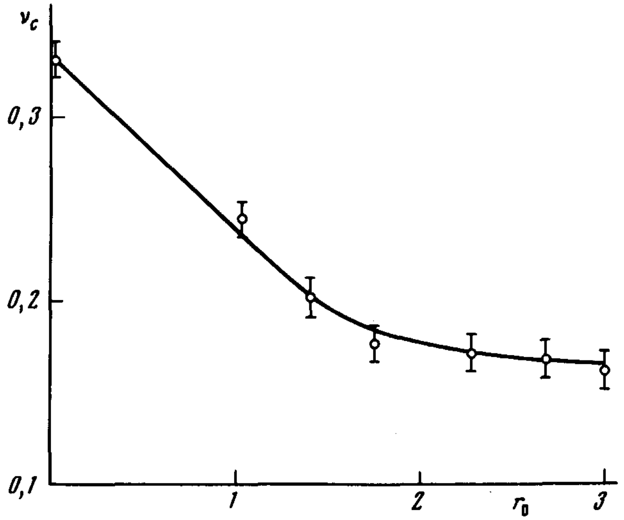
Мы хотели не только вычислить величину ν_c для какого-либо конкретного вида функции $K(\mathbf{r})$, но и проверить, сколь чувствителен результат к ее выбору. Совершая преобразование координат $x_i' = a_i x_i$, легко показать, что величина ν_c инвариантна по отношению к замене $K(\mathbf{r}) = K(a_1 x,\ a_2 y,\ a_3 z)$, где a_i – произвольные числа. Поэтому мы ограничились исследованием изотропных функций $K(r)$. Расчеты производились со следующими функциями

$$K_1(r) = \begin{cases} 1 & r < r_o \\ 0 & r > r_o, \end{cases} \qquad K_2(r) = \begin{cases} 1 - r/r_o & r < r_o \\ 0 & r > r_o \end{cases} \tag{5}$$

$$K_3(r) = \begin{cases} 1/r & r < r_o \\ 0 & r > r_o \end{cases} \qquad K_4(r) = \frac{1}{r} e^{-r/r_o}, \quad K_5(r) = e^{-r/r_o}$$

(функция $K_4(r)$ нужна для вычисления энергии активации прыжковой проводимости при слабой компенсации [2]). Полученный нами результат состоит в том, что $\nu_c = 0{,}17 \pm 0{,}01$ и с указанной точностью не зависит от выбора $K(r)$. Доказать инвариантность ν_c от выбора $K(r)$ аналитически нам не удалось. В литературе имеется большое число различных интуитивных оценок для величины ν_c (см. [6]). Наш результат ближе всего к оценке Заллена и Шера [6]. Подставляя $\nu_c = 0{,}17$ в (4), получим $\epsilon_{\text{П}} = -0{,}68\ \gamma$.

Заметим, что полученный нами результат $\nu_c = 0{,}17$ относится к более широкому классу потенциалов. Преобразуем гауссов потенциал V с помощью функции $\phi(V)$, такой, что $\phi(V) > \phi(\epsilon_{\text{П}})$ при $V > \epsilon_{\text{П}}$ и $\phi(V) < \phi(\epsilon_{\text{П}})$ при $V < \epsilon_{\text{П}}$. Частным случаем функции $\phi(V)$ может быть любая монотонная в интервале $(-\infty, \infty)$ функция. Полученный таким образом потенциал ϕ не является, вообще говоря, гауссовым, однако, как легко убедиться, уровень протекания в нем равен $\phi(\epsilon_{\text{П}})$, а критическая доля пространства ν_c оказывается такой же, как и в гауссовом потенциале V. Как оказалось, выход из определенного выше класса потенциалов может привести к значительному изменению ν_c. Мы исследовали потенциалы $V'(\mathrm{r}) = V^{-1}$ и $V''(\mathrm{r}) = -|V|$, где V – гауссов потенциал, полученный с помощью функции $K_1(r)$. В результате получилось $\nu_c' = 0{,}27$, $\nu_c'' = 0{,}24$.



Расчеты производились на БЭСМ-6. Функция f задавалась с помощью датчика случайных чисел в узлах простой кубической решетки с единичным периодом, находящихся внутри куба $20 \times 20 \times 20$. В каждом узле вычислялся потенциал, согласно (1). С помощью метода, подробно описанного в [8], находился уровень протекания, соответствующий возникновению путей между противоположными гранями куба. На рисунке представлена зависимость доли узлов, в которых $V < \epsilon_{\text{П}}$ от r_0 при $K(r) = K_1(r)$. Каждая точка получалась усреднением примерно по 10 реализациям f. При этом абсолютная погрешность вычисления среднего не превышала 0,01. При $r_0 \to 0$ значения потенциала в узлах оказываются совершенно некоррелированными, и мы получаем результат решеточной задачи узлов $\nu_c = 0{,}32$ [7]. При $r_0 \gg 1$ величина ν_c перестает зависеть от r_0, что соответствует переходу к континуальной задаче. Предельное значение ν_c и представляет интересующую нас критическую долю объема. Аналогичным образом были получены результаты для других упомянутых выше потенциалов.

Физико-технический институт
им. А.Ф.Иоффе
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
26 марта 1973 г.

Литература

[1] Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос. ЖЭТФ, **60**, 867, 1971; ЖЭТФ, **61**, 816, 1971.

[2] A.L.Efros, B.I.Shklovsky, I.Y.Yanchev. Phys. Stat. Sol.(b). 5045, 1972.

[3] H.Fritzsche, T.Non-Cryst. Solids, **6**, 49, 1971.

[4] V.Ambegaokar, B.I.Halperin, T.S.Langer. Phys. Rev., **4**, 2612, 1971.

[5] Б.И.Шкловский. Письма в ЖЭТФ, **14**, 397, 1971.

[6] R.Zallen, H.Sher. Phys. Rev., **4**, 4471, 1971.

[7] V.K.S.Shante, S.Kirkpatrick. Adv. Phys., **20**, 325, 1971.

[8] А.С.Скал, Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос. ФТТ, **15**, вып 5, 1973.