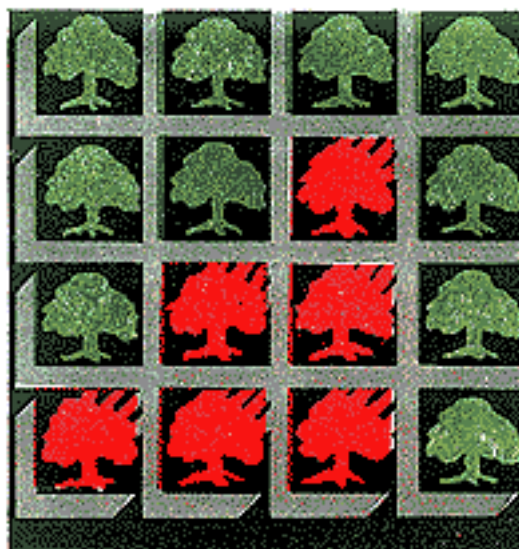




А.Л. ЭФРОС

ФИЗИКА И ГЕОМЕТРИЯ БЕСПОРЯДКА



Часть II



VIVOS VOCO!

<http://vivovoco.nns.ru>



Уважаемые читатели!

В сотрудничестве с редакцией журнала «Квант» мы начали сетевую публикацию некоторых выпусков Библиотечки «Квант». Эти файлы не могут распространяться на коммерческой основе и размещаться на серверах с платным доступом.

Текст и иллюстрации воспроизведены с издания:

А. Л. Эфрос «Физика и геометрия беспорядка»
(Библиотечка «Квант», выпуск 19),
М., Изд. «Наука», Гл. редакция физ.-мат. литературы, 1982 г.

Публикация подготовлена учениками московской гимназии № 1543 Владимиром Александровым, Даниилом Мусатовым, Николаем Винниченко и др. в 1999-2000 гг.

Часть II.

РАЗЛИЧНЫЕ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ ПРОТЕКАНИЯ И ИХ ПРИМЕНЕНИЯ

Глава 5. **ЗАДАЧИ НА ПЛОСКИХ РЕШЕТКАХ**

Мы сажаем фруктовый сад (задача связей). Неравенство, связывающее x_{cb} и x_y . Покрывающие и включающие решетки. Белое протекание и черное протекание. Дуальные решетки. Результаты для плоских решеток. Ориентированное протекание

Глава 6. **ОБЪЕМНЫЕ РЕШЕТКИ И ПРИБЛИЖЕННЫЕ ОЦЕНКИ ПОРОГОВ ПРОТЕКАНИЯ**

Объемные решетки. Пороги протекания для объемных решеток. От чего зависит порог протекания задачи связей? Как оценить порог протекания задачи узлов?

Глава 7. **ФЕРРОМАГНЕТИК С ДАЛЬНОДЕЙСТВИЕМ И ЗАДАЧА СФЕР**

Ферромагнетик с дальним действием. Задача окружностей (сфер). Задача окружностей (сфер) - предельный случай задачи узлов

Глава 8. **ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ПРИМЕСНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ЗАДАЧА СФЕР**

Собственные полупроводники. Примесные полупроводники. Переход к металлической электропроводности при повышении концентрации примесей. Переход Мотта и задача сфер.

Глава 9. **РАЗЛИЧНЫЕ ОБОБЩЕНИЯ ЗАДАЧИ СФЕР**

Охватывающие фигуры произвольной формы. Задача эллипсоидов. Другие поверхности. Еще один эксперимент на домашней кухне и задача твердых сфер.

Глава 10. **УРОВЕНЬ ПРОТЕКАНИЯ**

«Всемирный потоп». Построение случайной функции. Аналогия с задачей узлов. Уровни протекания в плоской и трехмерной задачах. Компенсация примесей в полупроводниках. Движение частицы при наличии потенциальной энергии. Движение электрона в поле примесей.

Глава 5.

Задачи на плоских решётках

5.1. Мы сажаем фруктовый сад (задача связей)

Проектируется фруктовый сад огромного размера. Деревья в нём должны расти не как-нибудь, а регулярно. Они будут посажены в узлах какой-либо периодической решётки, нанесённой на поверхности земли. Таких решёток можно придумать много, но мы ограничимся тремя: квадратной, треугольной и шестиугольной (последняя называется ещё «медовые соты»). Все они изображены на рис. 5.1.

Естественно, что хотелось бы посадить деревья поближе друг к другу — земля дорога, — но по ряду причин сажать деревья близко друг к другу нельзя. Одна из причин состоит в том, что проектировщики опасаются заразных заболеваний деревьев. Допустим, что специалисты по болезням фруктовых деревьев сообщили следующие сведения ¹:

¹Автор не несёт ответственности за эти сведения, и потому призывает не относиться слишком серьёзно к практическим выводам, вытекающим из решения поставленной здесь задачи. Она дана лишь для того, чтобы показать возможности теории протекания.

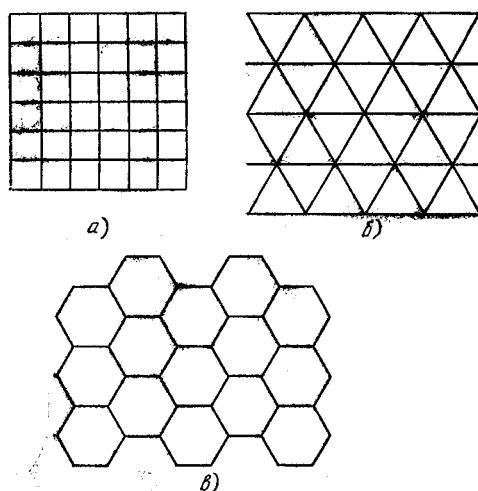


Рис. 5.1. Плоские решётки: а) квадратная; б) треугольная; в) шестиугольные («медовые соты»).

1. Заболевшее дерево может заразить только своих ближайших соседей.
2. Некоторые деревья, являющиеся ближайшими соседями, обязательно заражают друг друга, если одно из них заболело. В других случаях заражения не происходит. (Это может зависеть, например, от расстояния между ветвями данной пары деревьев.) Пару деревьев, внутри которой заражение обязательно происходит, назовём *связанной парой*.
3. Специалисты также предоставили в наше распоряжение вид функции $x(a)$ — вероятность того, что выбранная наугад пара ближайших соседей является связанной. Эта вероятность зависит от расстояния a между ближайшими соседями в данной решётке. Естественно, что функция $x(a)$ возрастает с уменьшением аргумента a : чем ближе друг к другу растут деревья,

тем легче заражают они друг друга.

Мы должны ответить на следующий вопрос: какое количество деревьев может заразить одно заболевшее дерево? Ответ на этот вопрос может быть только вероятностным. Если данное дерево образует с кем-либо из своих соседей связанную пару, то происходит заражение. Заболевшие деревья в свою очередь заражают своих соседей и т. д. Поэтому можно спросить лишь: какова вероятность того, что заболевшее дерево заразит определённое количество деревьев сада?

Для дальнейшего удобно перейти к кластерной терминологии, введённой в предыдущей главе. Будем считать, что между двумя соседними узлами, в которых находятся деревья, образующие связанную пару, имеется связь, которую представим в виде проволоки, соединяющей два узла. Если деревья, являющиеся ближайшими соседями, не образуют связанную пару, то связь между ними (провода) разорвана (рис. 5.2).

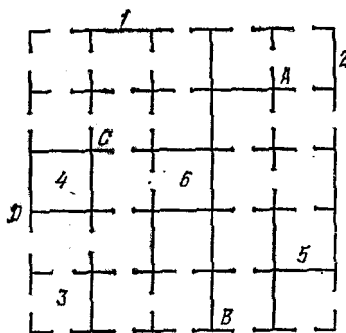


Рис. 5.2. Фрагмент квадратной решётки с разорванными связями. Изображены три кластера из двух узлов (1, 2, 3), один кластер из четырёх узлов (4), один кластер из шести узлов (5) и один кластер из десяти узлов (6)

Назовём два узла *связанными*, если между ними имеется целая связь или если они соединены непрерывной цепочкой узлов, являющихся ближайшими соседями и имеющими между собой целые связи (например, связаны друг с другом узлы A и B , а также C и D на рис. 5.2).

Совокупность связанных узлов назовём кластером. В применении к данной задаче важнейшее свойство кластера состоит в том, что заболевшее дерево заражает все деревья своего кластера и ни одного дерева вне его.

По определению, доля неразорванных связей равна x . Дальнейшие рассуждения такие же, как в гл. 3. При малых значениях x неразорванные связи располагаются по одиночке, почти все кластеры состоят из двух узлов, кластеры из трёх узлов редки, из четырёх — ещё более редки. При больших значениях x существует бесконечный кластер из связанных узлов. При $x = 1$ ему принадлежат все узлы системы. С уменьшением x часть узлов из него выпадает и, наконец, при некотором критическом значении x_c бесконечный кластер прекращает своё существование.

Бесконечный кластер — это и есть то бедствие, от которого мы призваны оградить сад. Пусть $P^{CB}(x)$ — вероятность того, что выбранный наугад узел принадлежит бесконечному кластеру. Если $x < x_c$, так что $P^{CB}(x) = 0$, то одно заболевшее дерево может заразить только несколько других деревьев. Если же $x > x_c$, то одно заболевшее дерево с вероятностью $P^{CB}(x)$ заражает в бесконечном саду бесконечное количество деревьев. Таким образом, в случае $x < x_c$ очаг болезни, случайно занесённый в сад, остаётся локализованным вблизи того места, куда он попал, а в случае $x > x_c$

болезнь может распространиться по всему саду.

Чтобы дать практические рекомендации, нужно найти значение x_c и приравнять к нему функцию $x(a)$, представленную специалистами. Отсюда определяется расстояние a_c , являющееся решением уравнения $x(a_c) = x_c$. Очаг болезни, возникший в саду, остаётся локализованным, если расстояние между деревьями больше a_c , и распространяется по всему саду в противоположном случае.

Сформулированная выше задача о нахождении x_c называется в теории протекания *задачей связей* в знак того, что случайным элементом являются здесь связи, которые с заданной вероятностью могут быть целыми или разорванными. На первый взгляд задача связей похожа на задачу узлов, обсуждавшуюся в предыдущих главах. Однако для заданной решётки эти задачи друг к другу не сводятся и имеют разные ответы.

В этой и последующих главах придётся несколько усложнить обозначения. Обозначим порог протекания задачи узлов через x_u , а порог протекания задачи связей через $x_{св}$. Эти пороги зависят от вида решётки. Примем следующие сокращённые обозначения для названий плоских решёток: К — квадратная, Т — треугольная, Ш — шестиугольная. Тогда $x_u(Ш)$ будет обозначать порог протекания задачи узлов на шестиугольной решётке, $x_{св}(Т)$ — порог задачи связей на треугольной решётке и т. д. Функцию $P^{св}(x)$, введённую в этом разделе для задачи связей, следует отличать от функции $P(x)$, определённой ранее для задачи узлов.

Задачу связей можно сформулировать не только на кластерном языке, но и как задачу о протекании с одной стороны квадрата на другую. Вспомним опыт с экранной сеткой, которым начи-

налась книга. Возможно, у некоторых читателей возник вопрос, почему нужно было блокировать узлы, т. е. разрезать сразу четыре проволоки, входящие в каждый узел, вместо того, чтобы разрезать по одиночке случайно выбранные проволоки (связи). Легко понять, что, разрезая связи, исследователи определили бы порог $x_{\text{св}}(K)$ вместо порога $x_{\text{у}}(K)$, который был найден в их эксперименте. Теперь можно объяснить, почему была выбрана задача узлов: как будет показано ниже, задача связей на квадратной решётке имеет точное аналитическое решение, из которого следует, что $x_{\text{св}}(K) = 0,5$. Поэтому ради $x_{\text{св}}(K)$ не было смысла ставить столь трудоёмкий эксперимент, а $x_{\text{у}}(K)$ известен лишь из приближённых вычислений.

Упражнение

1. Найдите функцию $P^{\text{св}}(x)$ при $1 - x \ll 1$ для трёх решёток, изображённых на рис. 5.1.

5.2. Неравенство, связывающее $x_{\text{св}}$ и $x_{\text{у}}$

При обсуждении задачи узлов вместо функции $P(x)$ часто вводят функцию $P^{\text{у}}(x)$, связанную с $P(x)$ соотношением

$$P(x) = xP^{\text{у}}(x). \quad (5.1)$$

По определению $P(x)$ есть вероятность того, что выбранный наугад узел принадлежит бесконечному кластеру. Её можно представить как произведение вероятностей двух независимых событий. Первое из них на языке задачи о ферромагнетике состоит в

том, что выбранный наугад узел оказался магнитным. Вероятность этого события равна x (см. упр. 1 к гл. 1). Второе событие состоит в том, что этот узел связан с бесконечным кластером из магнитных узлов. Таким образом, функция $P^Y(x)$, определённая формулой (5.1), есть вероятность того, что выбранный наугад магнитный узел связан с бесконечным кластером. Иными словами, $P^Y(x)$ представляет собой долю магнитных узлов, принадлежащих бесконечному кластеру, т. е. отношение числа узлов, принадлежащих бесконечному кластеру, к числу магнитных узлов. Напомним, что $P(x)$ представляет собой отношение числа узлов, принадлежащих бесконечному кластеру, к полному числу узлов. Естественно, что функция $P^Y(x)$ монотонно возрастает с ростом x , равна единице при $x = 1$ и равна нулю при $x \leq x_y$.

Английский математик Хаммерсли, тот, кто первым заговорил о теории протекания, доказал теорему, согласно которой

$$P^Y(x) \leq P^{CB}(x). \quad (5.2)$$

Обе функции, P^Y и P^{CB} , монотонно возрастают с увеличением аргумента x . Поэтому (рис. 5.3) из формулы (5.2) следует, что

$$x_{CB} \leq x_y, \quad (5.3)$$

т. е. для любой решётки (не обязательно плоской) пороговое значение для задачи связей не больше, чем для задачи узлов. Этот результат можно переписать в виде другого неравенства:

$$1 - x_{CB} \geq 1 - x_y, \quad (5.4)$$

и трактовать следующим образом. Допустим, что нужно заблокировать протекание электрического тока по сетке из проводов или

протекание жидкости по сетке труб, и сделать это можно, либо блокируя узлы, либо разрезая связи (провода или трубы), соединяющие эти узлы. Неравенство (5.4) означает, что, вырезая узлы, заблокировать систему легче, чем разрезая связи. Доля заблокированных узлов, при которой прекращается ток, меньше, чем доля разорванных связей. Результат этот представляется совершенно естественным, так как при блокировании одного узла разрывается не одна связь, а все связи, входящие в этот узел.

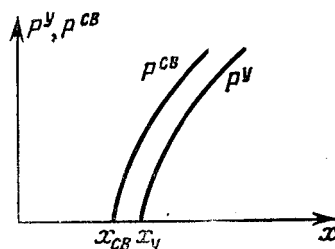


Рис. 5.3.

Упражнение

2. Найдите функцию $P_y(x)$ при $1 - x \ll 1$ для трёх решёток, изображённых на рис. 5.1. Сравните с результатом упр. 1 и проверьте справедливость неравенства (5.2).

Пояснение. В упражнении 1 к гл. 3 мы рекомендовали найти функцию $P(x)$ для задачи узлов при $1 - x \ll 1$. Однако, в этом месте речь шла лишь о главном члене функции, т. е. $P(x) = x$. Если подставить это выражение в формулу (5.1), получим $P^y =$

1. Это правильный результат в том смысле, что $\lim_{x \rightarrow 1} P^Y(x) = 1$. Теперь читателю предлагается найти малые члены, отличающие функцию $P^Y(x)$ от единицы. Разумеется, предел этих членов при $x \rightarrow 1$ равен нулю. Поэтому результат может быть представлен в виде $P^Y(x) = 1 - A(1 - x)^n$, где A и n — положительные численные коэффициенты, определяемые типом решётки.

5.3. Покрывающие и включающие решётки

Задача узлов является более общей, чем задача связей. Задача связей сводится к задаче узлов, но на другой решётке, которая называется покрывающей. Покрывающая решётка строится из исходной по следующим правилам:

1. Посередине каждой связи исходной решётки нужно поставить узел покрывающей решётки.
2. Два узла покрывающей решётки нужно связать друг с другом в том и только в том случае, если связи исходной решётки, на которых поставлены эти два узла, сходятся в узле исходной решётки.

Результатом этого построения является новая периодическая решётка, которая называется покрывающей по отношению к исходной.

На рис. 5.4 изображена покрывающая решётка для случая, когда исходной является квадратная. Тонкими линиями показана исходная квадратная решётка. На том месте, где исходная решётка имеет узлы, нарисованы дуги. Покрывающая решётка состоит из

тонких и толстых линий, но в пересечениях тонких линий нет узлов покрывающей решётки. Они находятся только в пересечениях толстых линий и отмечены на рисунке точками.

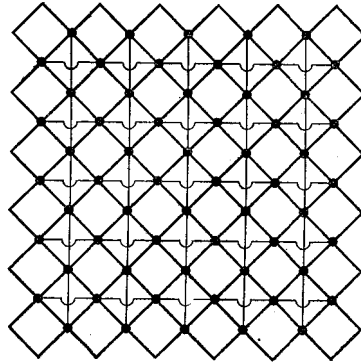


Рис. 5.4. Покрывающая решётка для квадратной решётки.

Каждая связь исходной решётки стыкуется с тремя другими связями на одном своём конце и ещё с тремя связями на другом конце. Поэтому каждый узел покрывающей решётки должен быть связан с шестью другими узлами. Это показано на рис. 5.4. Каждый узел связан с четырьмя другими узлами толстыми линиями и ещё с двумя узлами — тонкими линиями.

Допустим теперь, что на исходной решётке сформулирована задача связей, т. е. определённая доля случайно выбранных связей разорвана.

Предположим, что если связь исходной решётки разорвана, то узел покрывающей решётки, который стоит на данной связи, блокирован. Теперь возникла задача узлов на покрывающей решётке. Узлы на ней оказались блокированными случайно, а доля блокированных узлов равна доле разорванных связей на исходной решётке.

Заметим, что в задаче связей существование бесконечного кластера из связанных друг с другом узлов всегда означает существование бесконечного кластера из стыкующихся друг с другом неразорванных связей. И наоборот, отсутствие бесконечного кластера из узлов означает отсутствие кластера из связей.

По построению покрывающей решётки видно, что существование бесконечного кластера из неразорванных связей на исходной решётке означает существование бесконечного кластера из неблокированных узлов на покрывающей решётке, и, наоборот, отсутствие бесконечного кластера связей на исходной решётке означает отсутствие бесконечного кластера узлов на покрывающей решётке.

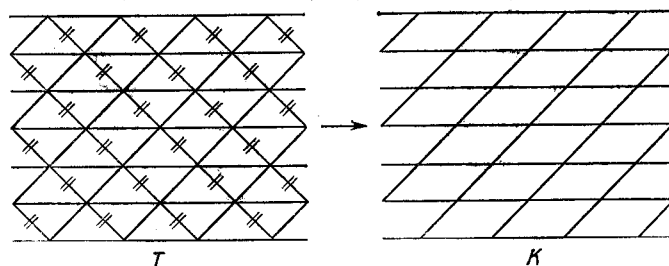


Рис. 5.5. Треугольная решётка включает квадратную.

Отсюда следует, что порог протекания задачи связей на исходной решётке равен порогу протекания задачи узлов на покрывающей решётке. Если обозначить исходную решётку буквой L , а покрывающую — L_{Π} , то сказанное можно записать в виде формулы

$$x_{\text{св}}(L) = x_{\text{у}}(L_{\Pi}). \quad (5.5)$$

Ряд неравенств между порогами протекания для различных решёток можно получить, используя понятие *включающей* решётки. Допустим, что решётка L получается из решётки $L_{\text{вкл}}$ с помощью вычеркивания определённого количества связей. Тогда говорят, что *решётка $L_{\text{вкл}}$ включает решётку L* .

Обратимся, например, к треугольной решётке. Если уничтожить в ней все связи, отмеченные на рис. 5.5 двумя чёрточками, то она перейдёт в решётку, показанную в правой части рисунка. Легко увидеть, что с точки зрения задачи узлов или связей эта новая решётка эквивалентна квадратной. Действительно, то обстоятельство, что углы между связями на новой решётке не равны 90° , не играет никакой роли, если обсуждается вопрос о связи различных узлов друг с другом (новую решётку можно просто мысленно «распрямить»). Порог протекания задачи связей (и задачи узлов!) на этой решётке точно равен порогу протекания на квадратной решётке. Поэтому говорят, что треугольная решётка включает в себя квадратную.

Допустим теперь, что определённая доля связей включающей решётки разорвана. Связи включающей решётки можно разделить на те связи, которые являются общими для неё и для включённой решётки и те, которые являются специфическими для включающей решётки (последние помечены двумя чёрточками на левой части рис. 5.5). Поскольку связи разрываются совершенно случайно, то доля разорванных связей и в той, и в другой категории связей будет одинакова и равна общей по всей решётке доле разорванных связей. Поэтому, чтобы получить включённую решётку с той же долей разорванных связей, необходимо дополнительно

разорвать на включающей решётке те связи, которые остались у этой решётки целыми, но являются для неё специфическими, т. е. вовсе отсутствуют на включённой решётке.

Отсюда видно, что число целых связей, выходящих из каждого узла включающей решётки, не меньше (больше или равно) числа целых связей, выходящих из того же узла включённой решётки. Поэтому вероятность того, что выбранный наугад узел принадлежит бесконечному кластеру для включающей решётки, не меньше, чем для включённой. Итак, получено неравенство

$$P_L^{\text{СВ}}(x) \leq P_{L_{\text{ВКЛ}}}^{\text{СВ}}(x). \quad (5.6)$$

В левой части неравенства (5.6) стоит функция $P^{\text{СВ}}(x)$, вычисленная для включённой решётки, а справа — для включающей. Подобно тому, как из неравенства (5.2) следует неравенство (5.3), из неравенства (5.6) следует, что

$$x_{\text{СВ}}(L_{\text{ВКЛ}}) \leq x_{\text{СВ}}(L), \quad (5.7)$$

т. е. $x_{\text{СВ}}$ у включающей решётки ниже, чем у включённой.

Как уже говорилось, треугольная решётка включает квадратную. Поэтому

$$x_{\text{СВ}}(T) \leq x_{\text{СВ}}(K). \quad (5.8)$$

Допустим теперь, что из квадратной решётки вычеркнуты некоторые связи, как показано на рис. 5.6. При этом получится решётка, показанная в правой части рисунка. Посмотрите на неё внимательно. Она эквивалентна шестиугольной. Нужно немного

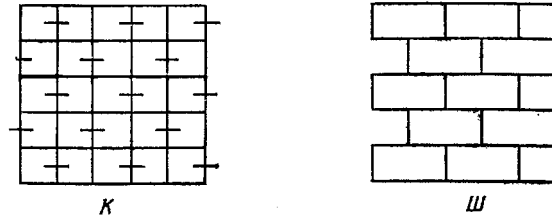


Рис. 5.6. Квадратная решётка включает шестиугольную.

потянуть её вверх, немного деформировать связи, и её ячейки (рис. 5.7) превратятся в «медовые соты», показанные на рис. 5.1. Таким образом, квадратная решётка *включает* шестиугольную и, следовательно,

$$x_{\text{св}}(K) \leq x_{\text{св}}(\overline{\text{III}}) \quad (5.9)$$

Из неравенств (5.8) и (5.9) следует, что

$$x_{\text{св}}(T) \leq x_{\text{св}}(\overline{\text{III}}) \quad (5.10)$$

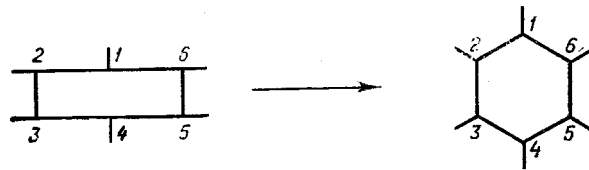


Рис. 5.7. Преобразование одной ячейки, изображённой в правой части рис. 5.6, в «медовые соты».

Обратимся теперь к задаче узлов. Допустим, что на включающей и включённой решётках блокированы одни и те же узлы (соответственно доля заблокированных узлов здесь и там одинакова). Пусть на включённой решётке существует бесконечный кластер

из целых узлов. Это значит, что он существует и на включающей решётке, поскольку дополнительные связи могут только способствовать его появлению. Если же известно, что бесконечный кластер существует при заданной доле узлов на включающей решётке, то отсюда нельзя сделать никаких выводов по поводу существования бесконечного кластера на включённой решётке. Уничтожение ряда связей между узлами при переходе от включающей решётки к включённой может оказаться для бесконечного кластера роковым. Таким образом, порог протекания задачи узлов на включённой решётке не может быть меньше, чем на включающей:

$$x_y(L_{\text{вкл}}) \leq x_y(L). \quad (5.11)$$

Отсюда следует цепочка неравенств для квадратной, треугольной и шестиугольной решёток:

$$x_y(T) \leq x_y(K) \leq x_y(\overline{\text{III}}), \quad (5.12)$$

точно такая же, как для задачи связей.

Обратимся ещё раз к рис. 5.4, где показана покрывающая решётка для квадратной решётки. Допустим, что связи, изображённые тонкими линиями, уничтожены. Легко понять, что в результате получилась квадратная решётка, только повернутая на 45° , что, разумеется, совершенно не существенно для задач теории протекания.

Итак, покрывающая решётка для квадратной решётки включает в себя квадратную решётку. Согласно формуле (5.5)

$$x_y(L_{\Pi}) \leq x_{\text{св}}(K), \quad (5.13)$$

где под L_{Π} понимается покрывающая решётка, изображённая на рис. 5.4. Но из неравенства (5.11) и из того, что данная покрывающая решётка включает квадратную, следует

$$x_{\text{У}}(L_{\Pi}) \leq x_{\text{У}}(\text{К}). \quad (5.14)$$

Из неравенств (5.13) и (5.14) вытекает, что

$$x_{\text{СВ}}(\text{К}) \leq x_{\text{У}}(\text{К}). \quad (5.15)$$

Таким образом, мы получили, что для квадратной решётки порог задачи связей выше, чем порог задачи узлов. Неравенство (5.15) является частным случаем общей теоремы Хаммерсли, которая выражается формулой (5.3) и была приведена нами без доказательства. При выводе (5.15) эта теорема не использовалась, и потому можно сказать, что приведённые выше соображения доказывают её для случая квадратной решётки.

5.4. Белое протекание и чёрное протекание

Взглянем теперь на задачу связей с несколько иной точки зрения. До этого момента говорилось, что существуют целые и разорванные связи, случайно распределённые по решётке, а кластером называлась совокупность узлов, соединённых целыми связями.

Задачу можно сформулировать более симметрично. Переименуем разорванные связи в «чёрные связи», а целые связи — в «белые связи». Совокупность узлов, соединённых белыми связями, будем называть белым кластером, а совокупность узлов, соединённых чёрными связями, — чёрным кластером (по старой терминологии

кластером назывался «белый» кластер). Пусть доля белых связей по-прежнему обозначается через x . Долю чёрных связей обозначим через q . Так как каждая связь либо чёрная, либо белая, то $q = 1 - x$.

В такой формулировке можно говорить и о протекании по белым, и о протекании по чёрным связям.

При малой концентрации x белых связей не существует бесконечного белого кластера, но существует бесконечный чёрный кластер, т. е. бесконечный кластер из узлов, связанных чёрными связями. Наоборот, при малой концентрации q чёрных связей (т. е. при значениях x , близких к единице) существует бесконечный белый кластер и нет бесконечного чёрного кластера.

При изменении x от нуля до единицы происходят два события: исчезает чёрный бесконечный кластер и появляется белый, или, что то же самое, исчезает протекание по чёрным связям и возникает протекание по белым связям. Но в какой последовательности происходят эти события?

Белые и чёрные связи ничем не отличаются друг от друга, кроме названия. Поэтому очевидно, что критическая концентрация $q_{св}$, при которой возникает протекание по чёрным связям, равна концентрации $x_{св}$, при которой возникает протекание по белым связям.

Таким образом, при увеличении x протекание по белым связям возникает, когда $x = x_{св}$, а протекание по чёрным связям исчезает, когда $x = 1 - q_{св} = 1 - x_{св}$. Последовательность, в которой происходят эти события, зависит от знака разности $x_{св} - 0,5$.

Если для осуществления протекания по белым связям необходимо, чтобы белых связей было больше половины (это значит, что в точке протекания белых связей должно быть больше, чем чёрных), то при увеличении x сначала исчезает протекание по чёрным связям, а потом появляется протекание по белым (рис. 5.8, а). В области I на рис. 5.8, а существует только протекание по чёрным связям, в области III — только по белым связям, а в области II отсутствует протекание и по белым, и по чёрным связям.

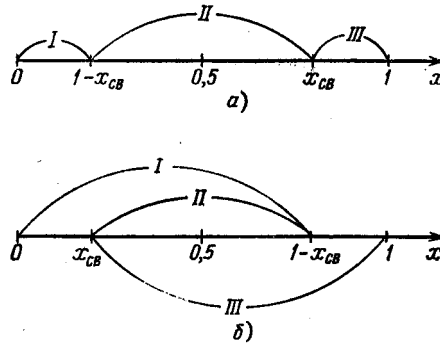


Рис. 5.8.

Если $x_{cb} < 0,5$, то сначала появляется протекание по белым связям и лишь потом исчезает протекание по чёрным. В области I на рис. 5.8, б существует протекание по чёрным связям, в области III — по белым связям, а в области II — и по чёрным, и по белым.

Такая же симметричная формулировка существует и для задачи узлов. Напомним, что в этом случае все связи — целые, зато узлы бывают двух сортов. В задаче о сетке они назывались целыми и заблокированными. В задаче о ферромагнетике — магнитными и немагнитными. Теперь, так же как и в задаче связей, вводится

универсальное обозначение: целые, или магнитные, узлы называются белыми, а заблокированные, или немагнитные, — чёрными. Белые узлы называются связанными, если они являются соседями друг друга или соединены цепочкой белых узлов, являющихся ближайшими соседями. Точно так же могут быть связанными друг с другом и чёрные узлы.

Можно говорить о протекании по белым и чёрным узлам. Если $x_y > 0,5$, то существует область значений x , в которой нет протекания ни по белым, ни по чёрным узлам ($1 - x_y < x < x_y$). Если $x_y < 0,5$, то в области $x_y < x < 1 - x_y$ существует протекание и по белым, и по чёрным узлам.

Симметричный подход оказывается конструктивным, потому что иногда, рассматривая решётку, удаётся выяснить, что на ней не может быть ни белого, ни чёрного протеканий или что на ней обязательно должно быть одно из этих протеканий. Исходя из этого, легко сделать некоторые заключения о пороге протекания.

Рассмотрим, например, задачу узлов на треугольной решётке. Допустим, что по белым узлам есть протекание. Легко увидеть, что при этом не может быть протекания по чёрным узлам. Допустим, что изучается протекание тока слева направо на сетке очень большого размера, как это делалось в эксперименте, с описания которого начиналась эта книга. Только теперь сетка сделана не в виде квадратной, а в виде треугольной решётки. Легко понять, что треугольная решётка устроена так, что наличие пути протекания по белым узлам слева направо исключает возможность протекания по чёрным узлам сверху вниз. Действительно, чёрные узлы не могут «пробиться» через ломаную линию, проходящую через всю

сетку слева направо и соединяющую белые узлы.

Как объяснялось в гл. 3, существование бесконечного кластера обеспечивает протекание в любом направлении, если размер системы достаточно велик. Поэтому следует сделать вывод, что в треугольной решётке при одном и том же значении x не может существовать бесконечного кластера и из белых, и из чёрных узлов, т. е. не может быть протекания и по белым, и по чёрным узлам. Отсюда следует, что

$$x_{\text{Y}}(\text{T}) \geq 0,5.$$

Такой же вывод можно сделать и для квадратной решётки: $x_{\text{Y}}(\text{K}) \geq 0,5$.

Для треугольной решётки доказана теорема, согласно которой $x_{\text{Y}}(\text{T}) = 0,5$. Мы не можем привести здесь её доказательство, но суть дела сравнительно легко понять, используя представление о белом и чёрном протекании. Изобразив различные конфигурации чёрных и белых узлов, можно увидеть, что отсутствие протекания по белым узлам слева направо обязательно влечёт за собой протекание по чёрным узлам сверху вниз (квадратная решётка не обладает таким свойством!).

Итак, на треугольной решётке *не может быть протекания и по белым, и по чёрным узлам сразу и не может не быть протекания хотя бы по одному сорту узлов*. Отсюда следует, что область II на рис. 5.8 (на этом рисунке следует теперь заменить $x_{\text{СВ}}$ на x_{Y}), вырождается в точку, т. е. $x_{\text{Y}}(\text{T}) = 0,5$.

В случае задачи связей такого рода исследования удобно делать с помощью понятия дуальной решётки.

5.5. Дуальные решётки

Дуальными могут быть только плоские решётки. Под плоскими решётками понимают такие решётки, которые могут быть размещены в плоскости, причем так, что связи решётки пересекаются только в тех точках, где находятся узлы решётки. Например, все решётки, изображённые на рис. 5.1, являются плоскими, а покрывающая решётка на рис. 5.4 — не плоская, потому что в местах, показанных дугами, её связи пересекаются, а узлов в точках пересечения нет. (Дуги представляют собой как бы мосты, обеспечивающие развязку путей, идущих слева направо и сверху вниз.)

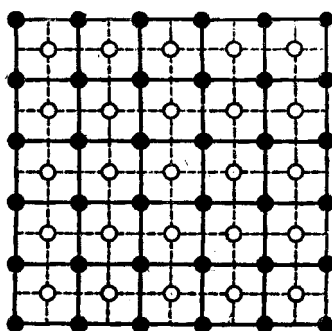


Рис. 5.9. Построение, показывающее, что квадратная решётка дуальна сама по себе. Сплошными линиями и чёрными кружками показаны связи и узлы исходной решётки, штриховыми линиями и светлыми кружками — связи и узлы дуальной решётки.

Каждая плоская решётка разбивает плоскость на ячейки. Решётка L^D называется дуальной к решётке L , если каждая связь L^D пересекает одну и только одну связь решётки L , и, наоборот, каждая связь L пересекает одну и только одну связь L^D .

Кроме того, в каждой ячейке решётки L должен находиться только один узел решётки L^D (и наоборот).

Как видно из определения, свойство дуальности является взаимным: если L^D дуальна к L , то L дуальна к L^D . На рис. 5.9, 5.10 показано, что квадратная решётка является дуальной квадратной решётке, а треугольная и шестиугольная решётки дуальны друг другу.

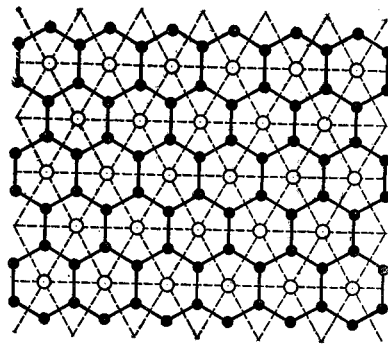


Рис. 5.10. Построение, показывающее, что треугольная решётка дуальна к шестиугольной (и наоборот). Обозначения те же, что и на рис. 5.9.

Вернёмся теперь к задаче связей. Примем, что если некоторая связь на исходной решётке белая (неразорванная), то пересекающая её связь на дуальной решётке чёрная (разорванная). Поэтому если концентрация белых связей на исходной решётке равна x , то концентрация белых связей на дуальной решётке $q = 1 - x$.

Ниже будет удобно говорить о пороге протекания как о таком значении концентрации белых связей, при котором впервые возникает (или исчезает) проводимость слева направо в очень большой сетке с припаянными к ней электродами (см. рис. 1.1). Это та же постановка задачи, которая обсуждалась в самом начале книги,

только теперь нарушаются не узлы сетки, а связи.

Допустим, что на исходной решётке существует путь протекания по белым связям слева направо. Как легко понять, это означает отсутствие пути протекания по белым связям на дуальной решётке сверху вниз. Действительно, белая связь исходной решётки по определению пересекается только чёрной связью дуальной решётки. Поэтому, если на исходной решётке существует нигде не обрывающаяся ломаная линия из белых связей, пересекающая всю сетку слева направо, то это значит, что белые связи дуальной решётки ни в каком месте не могут «пробиться» через неё, чтобы пройти сверху вниз.

Если решётка достаточно велика, то наличие пути слева направо по исходной решётке означает, что доля белых связей больше пороговой:

$$x > x_{\text{св}}(L). \quad (5.16)$$

Отсутствие же пути сверху вниз по белым связям дуальной решётки означает, что доля белых связей дуальной решётки $q = 1 - x$ меньше пороговой доли для дуальной решётки, т. е. $1 - x < x_{\text{св}}(L^{\mathcal{D}})$, или

$$x > 1 - x_{\text{св}}(L^{\mathcal{D}}) \quad (5.17)$$

Согласно сказанному выше все значения x , удовлетворяющие неравенству (5.16), удовлетворяют также и неравенству (5.17). Отсюда следует, что $x_{\text{св}}(L) \geq 1 - x_{\text{св}}(L^{\mathcal{D}})$, или

$$x_{\text{св}}(L) + x_{\text{св}}(L^{\mathcal{D}}) \geq 1. \quad (5.18)$$

Для квадратной решётки $L = L^{\mathcal{A}}$, и из неравенства (5.18) следует, что

$$x_{\text{св}}(\text{К}) \geq 0,5, \quad (5.19)$$

а если использовать ещё неравенство (5.15), то получим

$$x_{\text{у}}(\text{К}) \geq 0,5, \quad (5.20)$$

т. е. тот же вывод, что и в предыдущем разделе. Вспомните, что эксперимент с квадратной сеткой, описанный в гл. 1, дал значение $x_{\text{у}}(\text{К}) = 0,59$, что не противоречит неравенству (5.20).

Для двух решёток — квадратной и треугольной — строго доказано, что знак неравенства в формуле (5.18) следует заменить знаком равенства, т. е.

$$x_{\text{св}}(L) + x_{\text{св}}(L^{\mathcal{A}}) = 1. \quad (5.21)$$

Отсюда сразу вытекают два новых результата:

$$x_{\text{св}}(\text{К}) = 0,5 \quad (5.22)$$

и

$$x_{\text{св}}(\text{Т}) + x_{\text{св}}(\text{Ш}) = 1. \quad (5.23)$$

Строгое доказательство формулы (5.21) здесь не приводится: оно требует введения ряда новых понятий, которые не понадобятся в дальнейшем. Однако этой формуле можно дать достаточно ясную интерпретацию. Рисуя различные конфигурации белых и чёрных связей, можно увидеть, что для квадратных и треугольных решёток отсутствие протекания по белым связям слева направо

на исходной решётке всегда означает наличие протекания сверху вниз по белым связям дуальной решётки. Примем это утверждение на веру. Допустим, что доля белых связей такова, что на исходной решётке нет протекания слева направо. Для сетки достаточно большого размера это означает, что

$$x < x_{\text{св}}(L). \quad (5.24)$$

При этом по дуальной решётке есть протекание сверху вниз. Доля белых связей на ней равна $1 - x$. Следовательно, $1 - x > x_{\text{св}}(L^{\text{Д}})$, или

$$x < 1 - x_{\text{св}}(L^{\text{Д}}). \quad (5.25)$$

Согласно сказанному выше все значения x , удовлетворяющие неравенству (5.24), должны удовлетворять и неравенству (5.25). Это возможно, если $1 - x_{\text{св}}(L^{\text{Д}}) \geq x_{\text{св}}(L)$, или

$$x_{\text{св}}(L) + x_{\text{св}}(L^{\text{Д}}) \leq 1. \quad (5.26)$$

Из неравенств (5.18) и (5.26) следует равенство (5.21).

Формула (5.23) не позволяет найти по отдельности $x_{\text{св}}(\text{T})$ и $x_{\text{св}}(\text{Ш})$. Однако, воспользовавшись известным в теории электрических цепей преобразованием «звезда — треугольник», можно получить ещё одно соотношение, связывающее пороги протекания задачи связей на треугольной и шестиугольной решётках. В результате становится известным каждый из порогов

$$\begin{aligned} x_{\text{св}}(\text{T}) &= 2 \sin\left(\frac{\pi}{18}\right) \approx 0,347296, \\ x_{\text{св}}(\text{Ш}) &= 1 - x_{\text{св}}(\text{T}) = 1 - 2 \sin\left(\frac{\pi}{18}\right) \approx 0,652704. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Упражнение

3. Посмотрите на рис. О.4 (с. 257), изображающий преобразование «звезда — треугольник». Если, глядя на него, вы поймёте, как написать соотношение, о котором только что шла речь, и получите формулы (5.27), — то это прекрасно! Если не удастся, то не огорчайтесь — задача эта не простая. Вывод формул (5.27), сделанный впервые в 1963 г. английскими математиками Сайксом и Эссамом, явился событием в теории протекания. Прочитайте внимательно текст, помещённый рядом с рисунком, и вы, наверное, получите удовольствие от красивого применения теории вероятностей, которое привело к столь нетривиальному результату.

5.6. Результаты для плоских решёток

Нам осталось только привести сводную таблицу порогов протекания для плоских решёток (табл. 5.1).

Таблица 5.1.

Тип решётки	$x_{св}$	x_y
Треугольная	0,3473	0,5
Квадратная	0,5	0,59
Шестиугольная	0,6527	0,70

Лишь два числа в этой таблице, а именно, $x_y(K)$ и $x_y(Ш)$, получены приближёнными методами. Все остальные представляют

собой результаты точных решений. Как будет показано в следующей главе, с трёхмерными решётками дело обстоит существенно хуже. Для них не получено *ни одного* точного решения. Это не должно казаться странным. Для аналитического решения задач теории протекания не существует никакого метода. Каждое точное решение, о котором шла речь, производит впечатление чуда. Поэтому на наш взгляд следует скорее удивляться тому, как много таких решений уже известно.

Упражнение

4. Вернёмся к фруктовому саду, о котором шла речь в начале этой главы. Допустим, что расстояние между деревьями выбирается из условия, что доля связанных пар равна пороговому значению. Пусть нам известна функция $a(x)$, представляющая расстояние между соседними деревьями в зависимости от доли связанных пар x . Естественно, что чем больше x , тем меньше расстояние a , так как чем ближе друг к другу растут деревья, тем легче они заражают друг друга. Если $x = x_{св}$, то расстояние между деревьями равно $a(x_{св})$. Найдите площадь, приходящуюся на одно дерево при таком выборе расстояния, для трёх разных решёток. Решётка с наименьшей площадью на дерево является самой выгодной. Можно ли сказать, какая решётка приводит к меньшей площади на дерево, основываясь только на том, что функция $a(x)$ монотонно убывает с ростом x ?

5.7. Ориентированное протекание

Допустим теперь, что в узлах плоской решётки мы посадили не сад, а лес, и наш лес загорелся. Некоторые деревья, являющиеся ближайшими соседями, сильно перепутаны ветвями и передают огонь друг на друга. В соответствии с общей терминологией будем говорить, что узлы, в которых находятся такие деревья, соединены белыми связями. Другие деревья, которые тоже являются ближайшими соседями, не зажигают друг друга. Будем говорить, что соответствующие узлы соединены чёрными связями. Белые и чёрные связи беспорядочно разбросаны по решётке, причём доля белых связей равна x .

Задача состоит в том, чтобы найти критическое значение $x_{\text{св}}$ такое, что при $x < x_{\text{св}}$ возникший очаг пожара остаётся локализованным, а при $x > x_{\text{св}}$ огонь распространяется по всему лесу.

Легко понять, что это просто ещё один пример задачи связей. Значение $x_{\text{св}}$ можно найти, заглянув в табл. 5.1 (с. 112).

Допустим теперь, что во время пожара дует сильный ветер, так что огонь распространяется только по ветру. Это приводит к новой интересной задаче, которая называется задачей об *ориентированном (или направленном) протекании*.

Ориентированные белые связи показаны толстыми линиями со стрелкой, чёрные связи показаны тонкими линиями. Огонь может распространяться слева направо по пути 1 и не может распространяться по пути 2. Двумя чёрточками показаны два участка пути 2, на которых огню пришлось бы двигаться против ветра.

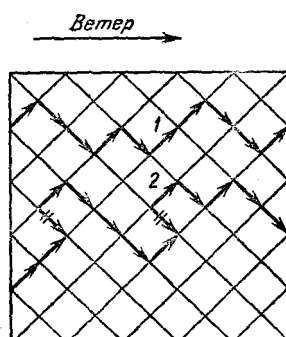


Рис. 5.11. Ориентированные белые связи показаны толстыми линиями со стрелкой, чёрные связи показаны тонкими линиями. Огонь может распространяться слева направо по пути 1 и не может распространяться по пути 2. Двумя чёрточками показаны два участка пути 2, на которых огню пришлось бы двигаться против ветра.

Будем считать, что лес посажен в узлах квадратной решётки, а ветер дует в направлении диагонали квадратов. На рис. 5.11 направление ветра показано стрелкой, а решётка повёрнута на 45° по отношению к обычному способу её изображения. Условия задачи формулируются теперь следующим образом. Каждая белая связь превращается в вектор, стрелка которого поставлена так, что проекция вектора на направление ветра положительна. Чёрные связи по-прежнему не переносят огонь ни в каком направлении, а белые переносят его только в направлении стрелки. Требуется определить критическую долю белых связей, начиная с которой одно загоревшееся дерево в бесконечно большом лесу может вызвать пожар, уходящий на бесконечно большое расстояние.

На рис. 5.11 толстыми линиями со стрелками изображены белые связи и показаны два пути протекания: 1 и 2. Путь 1 может изображать движение огня, а путь 2 не соответствует усло-

виям ориентированного протекания: в двух местах, показанных чёрточками, движение происходит против направления белой связи, т. е. против ветра.

Итак, если при неориентированном протекании белые связи использовались в обоих направлениях, то при ориентированном протекании они могут использоваться только в одном направлении. Отсюда следует, что критическая доля белых связей при ориентированном протекании $x_{\text{СВ}}^{\text{О}}$ не может быть меньше, чем при обычном протекании, т. е. $x_{\text{СВ}}^{\text{О}} \geq x_{\text{СВ}}$.

В настоящее время для ряда задач с ориентированным протеканием получено приближённое решение. В частности, для описанной выше задачи связей на квадратной решётке $x_{\text{СВ}}^{\text{О}} = 0,63$ или $0,64$ (результаты, полученные разными методами, несколько отличаются друг от друга). Напомним, что для неориентированной задачи связей на квадратной решётке $x_{\text{СВ}} = 0,5$.

Многие физические задачи сводятся к ориентированному протеканию. В качестве примера можно назвать движение электрона в сильном электрическом поле в случайно-неоднородной среде. В такой среде, где свойства меняются случайным образом от точки к точке, на пути движения электрона возникают препятствия, которые он должен огибать. В то же время однородное электрическое поле играет роль ветра, который гонит электрон в одну сторону.

Ориентированное протекание возникает и в задаче об электропроводности проволочной сетки (гл. 1), если принять, что в каждую связь между узлами сетки включён диод (выпрямитель), пропускающий ток только в одном направлении. Тогда доля разорванных связей, при которой прекращается ток через сетку, соот-

ветсвует порогу ориентированного протекания. Рассматривалась и смешанная задача, когда диоды включены не во все связи сетки.

Глава 6.

Объёмные решётки и приближённые оценки порогов протекания

Как было показано в гл. 5, порог протекания существенно зависит от типа рассматриваемой решётки. Цель настоящей главы состоит в том, чтобы качественно объяснить, какие именно свойства решёток важны для порогов протекания. Поняв это, можно научиться, не решая задачи, предсказывать (с точностью порядка 10%) пороги протекания. Так как решёток существует великое множество, а расчёт одного порога требует (кроме хорошей квалификации!) около часа работы ЭВМ самого высшего класса, то умение сразу предсказать результат (хотя бы и не очень точно) представляется ценным.

Кроме того, задачи протекания не исчерпываются решёточными задачами. Как мы увидим ниже, для различных приложений важны большей частью задачи, заданные не на решётках. Оказывается, что идеи приближённой оценки, которые изложены в этой главе, весьма плодотворны для нерешёточных задач. На основании этих идей ряд порогов протекания для нерешёточных задач был предсказан с большой точностью задолго

до того, как эти задачи были решены на ЭВМ.

Чтобы набрать необходимый опыт, нужно выйти за рамки плоских решёток, рассмотренных в предыдущей главе, и обратиться к объёмным решёткам.

6.1. Объёмные решётки

Простейшей из объёмных решёток является *простая кубическая* (сокращённо ПК). Она изображена на рис. 3.7. Её основу составляет элементарный кубик, изображённый на рис. 6.1. Векторы a_1 , a_2 , a_3 называются *векторами трансляции*. Удлиняя каждый из векторов трансляции в целое число раз (n_1, n_2, n_3) , а затем складывая получившиеся векторы, можно получить вектор R_{n_1, n_2, n_3} , выходящий из начала координат и упирающийся в любой узел простой кубической решётки:

$$R_{n_1, n_2, n_3} = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3.$$

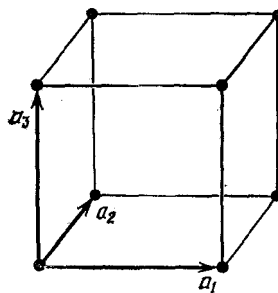


Рис. 6.1. Элементарный кубик простой кубической решётки

В кубические решётках все векторы a_1 , a_2 , a_3 имеют одинаковую длину, равную a , и потому числа n_1 , n_2 , n_3 являются просто

три декартовыми координатами узлов решётки, выраженными в единицах a . Говорят, что простая кубическая решётка получается трансляцией (параллельным переносом) элементарного кубика на векторы, кратные векторам a_1, a_2, a_3 .

Важнейшей характеристикой решётки является число ближайших соседей (его ещё называют *координационным числом*), которое обозначается через z . Для простой кубической решётки $z = 6$.

В форме простой кубической решётки кристаллизуются щёлочно-галлоидные соединения, такие как NaCl (поваренная соль), KCl (каменная соль), LiF , NaI и др. При этом ионы щёлочного металла (например, Na^+) чередуются в узлах решётки с ионами галогена (например Cl^-).

Объёмноцентрированной кубической решётки (сокращённо ОЦК). Эту решётку можно получить из двух простых кубических решёток, если сместить их относительно друг друга на половину диагонали элементарного кубика.

(Диагональю куба называют линию, соединяющую противоположные углы куба и проходящую через центр куба.)

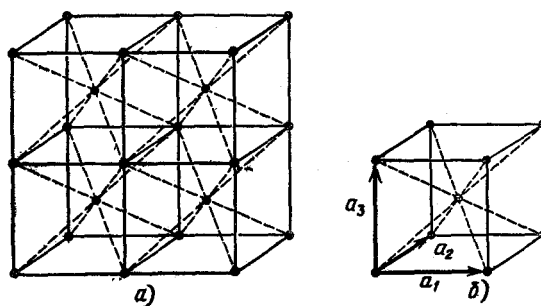


Рис. 6.2. а) Объёмноцентрированная кубическая решётка; б) элементарный кубик ОЦК-решётки.

ОЦК-решётка изображена на рис. 6.2, а. Её основу составляет элементарный кубик, показанный на рис. 6.2, б. ОЦК-решётку можно получить трансляцией этого кубика на векторы a_1 , a_2 , a_3 , однако в этом случае, для того чтобы перебрать все узлы решётки, недостаточно поместить вектор — R_{n_1, n_2, n_3} в начале координат. Надо, кроме того, поместить его начало на центральном атоме. Только тогда будут транслироваться обе простые кубические решётки, составляющие ОЦК-решётку.

Ближайшие соседи каждого узла ОЦК-решётки расположены в направлении диагонали элементарного кубика (рис. 6.2, б). Таких соседей у каждого узла 8, так что $z = 8$. Расстояние до ближайшего соседа равно половине диагонали куба, т. е. $\frac{\sqrt{3}a}{2}$, где буквой a по-прежнему обозначена длина ребра элементарного кубика.

В форме ОЦК-решётки кристаллизуются одновалентные щелочные металлы **Li**, **Na**, **K**, **Rb**, **Cs**, двухвалентный **Ba** и ряд других веществ.

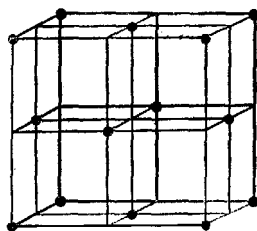


Рис. 6.3. Элементарный кубик гранецентрированной кубической решётки

Гранецентрированная кубическая решётка (сокращённо ГЦК). Элементарный кубик ГЦК-решётки показан на рис. 6.3. От элементарного кубика для ПК-решётки он отличается дополнительными узлами, находящимися в центре каждой грани. Чтобы транс-

лизовать этот кубик, нужно поместить начало вектора R_{n_1, n_2, n_3} , в начало координат, а также в центры трёх непровотивоположных друг другу граней куба. Ближайшие соседи каждого узла ГЦК-решётки расположены в направлении диагоналей грани куба. Расстояние до ближайшего соседа равно $\frac{a}{\sqrt{2}}$. В каждой из трёх взаимно перпендикулярных плоскостей, пересекающихся в данном узле, имеется 4 ближайших соседа этого узла, так что число ближайших соседей z равно 12.

В форме ГЦК-решётки кристаллизуются такие металлы, как медь, серебро, золото, алюминий, свинец.

Последней решёткой, которую мы введём в рассмотрение, является *решётка типа алмаза*. Она изображена на рис. 6.4, а. Её можно представить в виде двух гранецентрированных решёток, сдвинутых относительно друг друга на четверть диагонали куба.

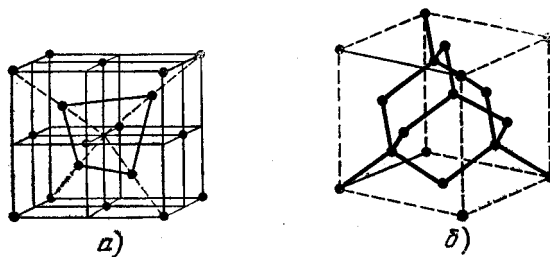


Рис. 6.4. а) Решётка типа алмаза; б) тетраэдрическая структура связей в решётке типа алмаза.

В форме решётки типа алмаза кристаллизуются элементы четвертой группы таблицы Менделеева: углерод (алмаз), а также важнейшие полупроводниковые элементы германий и кремний. Все эти элементы четырёхвалентны, и атомы связаны в решётке ковалентными силами. Упрощённо можно представить, что каждый атом имеет четыре «руки», соответствующие четырём валент-

ным электронам. Этими четырьмя руками атом берёт за руку своих четырёх ближайших соседей. Решётка типа алмаза прекрасно приспособлена для связи такого типа. Каждый узел этой решётки находится в центре правильного тетраэдра, образованного другими узлами (рис. 6.4, б). Число ближайших соседей $z = 4$.

6.2. Пороги протекания для объёмных решёток

Задачи связей и узлов ставятся для объёмных решёток точно так же, как для плоских. По-прежнему предполагается, что связи имеются только между узлами, являющимися ближайшими соседями.

В табл. 6.1 дана сводка порогов протекания задач узлов и связей для описанных выше объёмных решёток. Как уже говорилось, в трёхмерном случае не существует ни одного точного решения. Все результаты, приведённые в табл. 6.1, получены различными приближёнными методами, как правило, использующими ЭВМ. Естественно, что среди имеющихся в научной литературе результатов возникают небольшие противоречия. В табл. 6.1 отображены наиболее достоверные с нашей точки зрения результаты.

Таблица 6.1. Пороги протекания для объёмных решёток

Тип решётки	$x_{св}$	x_y
Простая кубическая	0,25	0,31
Объёмноцентрированная кубическая	0,18	0,25
Гранецентрированная кубическая	0,12	0,20
Типа алмаза	0,39	0,43

Теперь задача состоит в том, чтобы постараться понять, глядя на эту таблицу, а также на табл. 5.1 (с. 112), где даны результаты для плоских решёток, почему для одних решёток пороги протекания сравнительно большие, а для других — маленькие. Начнем с задачи связей.

6.3. От чего зависит порог протекания задачи связей?

Если все связи целые, то каждый узел связан с другими узлами, где число ближайших соседей z сильно меняется от решётки к решётке. При заданной доле целых связей x каждый узел в среднем связан с zx другими узлами. Попробуем проверить следующую гипотезу: может величина zx , представляющая среднее число узлов, с которыми связан каждый узел, содержать информацию, достаточную для того, чтобы сказать, есть в решётке протекание или нет? Может быть, никакой другой информации о свойствах решётки, кроме числа z , и не надо, и протекание возникает у всех решёток при одном и том же значении величины zx ? Довольно ясно, что эта гипотеза не может быть точной. Но может быть она справедлива приближённо?

Проверить это очень просто. Нужно для всех решёток с известными порогами протекания задачи связей вычислить произведение zx_{cv} . Если оно окажется универсальным, т. е. одинаковым для всех решёток или хотя бы приближённо одинаковым, значит, высказанная гипотеза верна или верна приближённо.

Соответствующие данные собраны в табл. 6.2. Видно, что с погрешностью меньше чем 10%, для плоских решёток справедлива

формула

$$zx_{св} = 2 \quad (6.1)$$

а для объёмных решёток формула

$$zx_{св} = 1,5. \quad (6.2)$$

Таблица 6.2. Произведение $zx_{св}$ для разных решёток

Тип решётки	z	$x_{св}$	$zx_{св}$
Плоские решётки			
Квадратная	4	0,5	2,0
Треугольная	6	0,35	2,1
Шестиугольная	3	0,65	2,0
Объёмные решётки			
Простая кубическая	6	0,25	1,5
Объёмноцентрированная кубическая	8	0,18	1,4
Гранецентрированная кубическая	12	0,12	1,4
Типа алмаза	4	0,39	1,6

Таким образом, гипотеза об универсальности среднего числа связей на узел, требуемого для возникновения протекания, не является точной, но приближенно выполняется. Если принять во внимание, что как в группе плоских решёток, так и в группе объёмных решёток каждая из величин z и $x_{св}$ меняется по крайней мере в два раза, то точность, с которой в каждой группе величина $zx_{св}$ постоянна, следует признать высокой.

Итак, чтобы приближенно оценить порог протекания задачи связей, достаточно знать число ближайших соседей и воспользоваться формулой (6.1) в случае плоских решёток и формулой (6.2)

в случае объёмных решёток. Порог протекания задачи связей наиболее чувствителен к числу ближайших соседей и значительно менее чувствителен ко всем прочим свойствам решёток (например, к числу вторых соседей, т. е. соседей, следующих по удаленности от данного узла).

Таким образом, мы получили очень простой и в то же время довольно точный способ оценки порогов протекания задачи связей, пригодный для любой решётки.

6.4. Как оценить порог протекания задачи узлов?

Разберём теперь схему такого же типа для задачи узлов. Естественно сначала испробовать предыдущий вариант, т. е. посмотреть, как меняется от решётки к решётке величина zx_y . Легко убедиться, что она меняется почти так же, как каждая из величин z и x_y по отдельности. Этому не следует удивляться; в случае задачи связей произведение $zx_{св}$ имеет четкий физический смысл — среднее число целых связей, приходящееся на один узел. В случае задачи узлов связь работает, если она соединяет два белых узла и не работает во всех прочих случаях. Поэтому произведение zx_y никакого особого смысла не имеет.

В 1970 г. американские физики Шер и Заллен предложили иной метод оценки порога протекания задачи узлов. Их идея состояла в том, чтобы сопоставить каждому узлу определённую долю пространства. После этого говорилось, что протекание по белым узлам возникает, когда доля пространства, занятая этими узлами, превышает некоторое критическое значение, слабозависящее от

типа решётки.

Вообразим вокруг каждого узла решётки шар (или круг в случае плоской решётки) с радиусом, равным половине расстояния до ближайшего соседа. При этом шары (круги), построенные вокруг соседних узлов, касаются друг друга (рис. 6.5). Белому узлу припишем белый шар, а чёрному узлу — чёрный. Если два белых узла связаны друг с другом, то между ними есть путь по касающимся друг друга белым шарам (рис. 6.5). Поэтому возникновение протекания означает появление путей бесконечной длины по касающимся друг друга белым шарам.

Предположим теперь, что протекание возникает, когда доля полного объёма (площади), занимаемая белыми шарами (в плоском случае кругами), превысит некоторое критическое значение, не зависящее от типа решётки. Чтобы проверить это предположение, нужно вычислить доли объёма, занимаемые белыми шарами при $x = x_y$, для различных решёток с известным значением x_y и сравнить их друг с другом.

Сначала необходимо сосчитать долю объёма, занимаемого белыми шарами при $x = 1$, т. е. в случае, когда все шары - белые. Эту величину обозначают буквой f и называют коэффициентом заполнения. Коэффициент заполнения равен доле объёма, занятой шарами, построенными вокруг каждого узла решётки и имеющими радиус, равный половине расстояния до ближайшего соседа. Коэффициент заполнения существенно зависит от типа решётки, и для каждой решётки его нужно считать отдельно.

Чтобы узнать долю объёма, заполненного белыми шарами при $x < 1$, нужно умножить коэффициент заполнения на долю белых

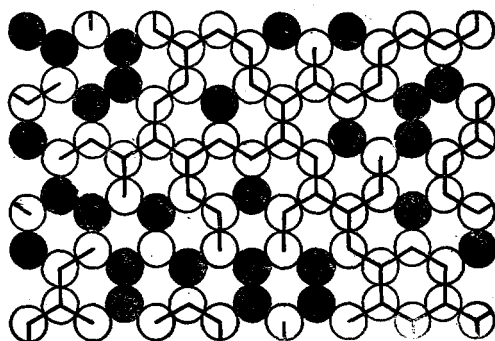


Рис. 6.5. Построение касающихся друг друга окружностей в случае шестиугольной решётки. Сама решётка изображена на рис. 5.1, в. Окружности имеют радиус, равный половине расстояния до ближайшего соседа. Белым узлам соответствует белая, а чёрным — чёрная окружности. Пути протекания по белым окружностям показаны жирными линиями.

шаров, т. е. на x . Таким образом, доля объёма, заполненного белыми шарами, равна fx . На пороге протекания она равна fx_y . Если предположение о универсальности доли объёма, при которой возникает протекание, правильно, то величина fx_y должна быть одинаковой для всех решёток.

Коэффициенты заполнения для различных решёток даны во втором столбце табл. 6.3. Чтобы представить, как они получены, вычислим величину для шестиугольной решётки, изображённой на рис. 6.5. В упражнениях 4 и 5 было показано, что на долю одного узла шестиугольной решётки приходится площадь $\frac{3\sqrt{3}}{4}a^2$, где a — сторона шестиугольника. Этот результат имеет следующий смысл: нарисуем на плоскости, на которую нанесена решётка, квадрат, прямоугольник, круг или любую другую геометрическую фигуру, но обязательно такую, чтобы её размеры были во много раз больше расстояния между соседними узлами решётки. Поделим её площадь на число узлов решётки, оказавшихся внутри этой

фигуры. Площадь, приходящаяся на узел, есть предел этого отношения при неограниченном увеличении размеров фигуры.

Таблица 6.3. Произведения fx_y для разных решёток

Тип решётки	f	x_y	fx_y
Плоские решётки			
Квадратная	0,79	0,59	0,47
Треугольная	0,91	0,5	0,46
Шестиугольная	0,61	0,7	0,43
Объёмные решётки			
Простая кубическая	0,52	0,31	0,16
Объёмноцентрированная кубическая	0,68	0,25	0,17
Гранецентрированная кубическая	0,74	0,20	0,15
Типа алмаза	0,34	0,43	0,15

Доля площади, занятая кругами, равна пределу отношения площади, занятой кругами, к площади большой фигуры. Площадь, занятая кругами, равна произведению числа узлов, принадлежащих большой фигуре, на площадь одного круга. Иными словами, величина f равна отношению площади одного круга к площади, приходящейся на один узел.

Круги, построенные на рис. 6.5, имеют радиус $\frac{a}{2}$ и, следовательно, площадь $\frac{\pi a^2}{4}$. Отсюда получаем

$$f = \frac{\frac{\pi a^2}{4}}{\frac{3\sqrt{3}a^2}{4}} = \frac{\pi}{3\sqrt{3}} \approx 0,605.$$

Аналогично вычисляются коэффициенты заполнения для других решёток, причём, как видно из табл. 6.3, они меняются в широких

пределах.

Произведения $f x_y$ представлены в последнем столбце табл. 6.3. Видно, что предположение о том, что $f x_y$ не зависит от типа решётки, не выполняется точно. Однако и в группе плоских решёток, и в группе объёмных решёток, то произведение меняется мало. Отсюда следует, что с точностью порядка 10–15% справедливы формулы!

$$f x_y = 0,5 \quad (6.3)$$

для плоских решёток и

$$f x_y = 0,16 \quad (6.4)$$

для объёмных решёток.

Так как вычислить коэффициент заполнения f сравнительно просто, формулы (6.3) и (6.4) дают возможность оценить порог протекания задачи узлов для любой решётки.

Легко понять, что критическая доля объёма, заполненная белыми шарами, при которой возникает протекание, монотонно уменьшается с увеличением размерности пространства. В одномерном пространстве, т. е. в линейной цепочке узлов, протекание по белым узлам невозможно при сколь угодно малой концентрации чёрных узлов. Даже один чёрный узел запирает путь протекания, так как обойти его невозможно. В плоской (двумерной) решётке появляется возможность обхода чёрных узлов, а в трёхмерной (объёмной) решётке таких возможностей больше, так как обходные пути не ограничены плоскостью.

Идея критического объёма оказывается плодотворной не только для решёточных задач. В гл. 9 мы столкнёмся с задачей, в кото-

рой белые и чёрные шары вообще не находятся в узлах решётки, а просто беспорядочно насыпаны в банку. Нас будет интересовать вопрос о протекании по касающимся друг друга белым шарам. Оказывается, это протекание тоже возникает, когда объем, заполненный белыми шарами, составляет примерно 0,16 полного объёма. Этот результат слабо меняется, если шары отличаются друг от друга радиусом.

В гл. 10 рассмотрена задача о пространстве, которое раскрашено случайным образом белой и чёрной краской. Оказывается, что протекание по областям одного цвета возникает в плоском случае, когда доля поверхности, выкрашенной этим цветом, точно равна 0,5, а в трёхмерном случае, когда доля объёма, выкрашенного этим цветом, примерно равна 0,16.

Упражнение

1. Проверьте, правильно ли вычислены коэффициенты заполнения, приведенные в табл. 6.3.

Глава 7.

Ферромагнетик с дальним действием и задача сфер.

В задачах узлов и связей, которые рассматривались до сих пор, предполагалось, что каждый узел может быть непосредственно связан лишь со своими ближайшими соседями, а связи между далекими узлами устанавливаются по цепочке узлов, каждый из которых связан со своими ближайшими соседями. В этой главе задача узлов обобщается на случай, когда узлы, не являющиеся ближайшими соседями, непосредственно связаны друг с другом. Такая задача может оказаться практически важной, и потому полезно знать, что она достаточно хорошо разработана.

Если число узлов, с которыми связан данный узел, становится очень большим, то задача узлов превращается в совершенно новую задачу, называемую *задачей сфер*. Эта задача играет в теории протекания особенно важную роль. С её помощью пытаются понять переход к проводимости металлического типа, происходящий в полупроводниках по мере увеличения концентрации примесей. На решении этой задачи основана теория прыжковой проводимости полупроводников — важного и интересного явления, разы-

грывающегося при очень низких температурах. Поэтому задачей сфер занимались многие учёные, для неё и подобных ей задач получены интересные результаты.

Задача сфер интересна ещё и потому, что это первая *нерешёточная задача*, с которой мы сталкиваемся в этой книге. Случайные элементы, которые в ней фигурируют, заданы не на узлах периодической решётки.

7.1. Ферромагнетик с дальним действием

Вернёмся к задаче о ферромагнетике с немагнитными примесными атомами, рассматривавшейся в гл. 3. В этой главе считалось, что магнитные атомы ориентируют свои магнитные моменты параллельно, только если они являются ближайшими соседями или связаны цепочкой магнитных атомов, являющихся ближайшими соседями друг другу. Если же все ближайшие соседи магнитного атома оказывались немагнитными атомами, то магнитный момент такого атома считался ориентированным произвольно.

Такая модель основывалась на том, что взаимодействие между магнитными моментами, приводящее к параллельной ориентации, убывает с расстоянием очень быстро, — так быстро, что магнитные моменты, не являющиеся ближайшими соседями, «ничего не знают» друг о друге, т. е. не взаимодействуют между собой.

Кристаллографы обычно называют группу атомов, являющихся ближайшими соседями некоторого атома, *первой координационной группой*, а число ближайших соседей z , как уже говорилось, называют координационным числом. Совокупность равноправных атомов, являющихся вторыми по степени удалённости

соседями данного атома, называют второй координационной группой и т. д. Рассмотрим в качестве примера простую кубическую решётку (см. рис. 3.7). Первую координационную группу в этой решётке составляют 6 атомов, расположенных на рёбрах куба, выходящих из исходного атома. Вторую координационную группу образуют 12 атомов, лежащих на диагоналях граней куба, проходящих через исходный атом. Наконец, третью координационную группу составляют 8 атомов, лежащих на диагоналях куба, проходящих через исходный атом.

В гл. 3 предполагалось, что взаимодействие между магнитными моментами распространяется только на первую координационную группу. Расчёт критической доли магнитных атомов, при которой возникала (или исчезала) спонтанная намагниченность, сводился в этом предположении к задаче узлов со связями только между ближайшими соседями.

Предположение «о коротком взаимодействии» (или о короткодействии) не всегда оправдывается, и потому имеет смысл рассмотреть задачу, в которой считается, что взаимодействие между магнитными моментами распространяется на несколько координационных групп, и найти критическую долю магнитных атомов, при которой возникает спонтанная намагниченность.

Эта проблема сводится к задаче узлов, в которой связаны не только ближайшие соседи. Её формулировка не содержит по существу ничего нового. Узлы бывают белые и чёрные (магнитные и немагнитные). Два белых узла считаются связанными друг с другом, если связи распространяются на ту координационную группу, в которой находится один из них по отношению к другому. Если

узел A связан с узлом B , а узел B связан с узлом C , то A связан с C . Совокупность связанных узлов образует кластер. Порогом протекания называется доля белых узлов, при которой возникает бесконечный кластер.

Совершенно очевидно, что порог протекания x_y должен уменьшаться по мере того, как связи распространяются на более далёкие координационные группы. Чем больше связей выходит из данного белого узла, тем больше вероятность того, что хотя бы одна из них приведёт к другому белому узлу, и, соответственно, тем меньше нужно белых узлов, чтобы обеспечить протекание.

Разумеется, решить такую задачу ничуть не проще (скорее, сложнее!), чем обычную задачу узлов. Однако целый ряд задач этого рода был решён различными приближёнными методами, и в табл. 7.1 приводятся результаты одного из них. В первой графе таблицы написан тип решётки и номера координационных групп, на которые распространялись связи. Во второй графе стоит число узлов Z , с которыми связан каждый узел, т. е. суммарное число узлов, находящееся в рассматриваемых координационных группах. (В случае одной координационной группы оно совпадает с координационным числом z).

В последней графе таблицы написано произведение Z_{x_y} . Как говорилось в предыдущем разделе, в случае задачи узлов со связями в первой координационной группе это произведение сильно зависит от типа решётки. Однако, как видно из табл. 7.1, при больших значениях Z оно меняется с увеличением Z все слабее и слабее. Особенно хорошо это видно в случае объёмных решёток, где использованы большие значения Z . Произведение Z_{x_y} явно стремится

ся к числу порядка $2,6-2,7$, не зависящему от типа решётки.

В трёхмерном случае число $2,7$ и считается в настоящее время наиболее достоверным значением (с точностью $\pm 0,1$) величины B_c , определенной как предел Z_{xy} при больших Z .

$$B_c = \lim_{Z \rightarrow \infty} Z_{xy}. \quad (7.1)$$

Из следующих разделов станет ясно, почему такой предел существует и почему он не зависит от типа решётки, а зависит лишь от размерности пространства, т. е. от того, является рассматриваемая решётка плоской или объёмной.

Чтобы это понять, нужно получить представление о задаче сфер.

Упражнение

1. Укажите, где находятся 42 узла, принадлежащие трем первым координационным группам ГЦК-решётки.

7.2. Задача окружностей (сфер)

Рассмотрим теперь иную задачу или, говоря точнее, задачу, которая на первый взгляд кажется иной. Допустим, что на плоскости нарисованы окружности с одинаковым радиусом, равным R , центры которых распределены по плоскости совершенно хаотически и в среднем равномерно. Это значит, что обе координаты центров окружностей являются случайными числами, равномерно распределёнными в интервале от нуля до L , где L — очень большая

Таблица 7.1. Пороги протекания задачи узлов со связями между удалёнными соседями (Для случая одной координационной группы приведённые значения порогов не всегда точно совпадают с данными предшествующих таблиц. Это связано с тем, что в них были отобраны наиболее достоверные, с нашей точки зрения, данные. В этой же таблице сравниваются данные, полученные одним и тем же методом.)

Тип решётки	Z	x_y	Z_{x_y}
Плоские решётки			
Шестиугольная, 1	3	0,700	2,10
Квадратная, 1	4	0,590	2,36
Треугольная, 1	6	0,500	3,00
Квадратная, 1, 2	8	0,410	3,28
Треугольная, 1, 2	12	0,295	3,54
Шестиугольная, 1, 2, 3	12	0,300	3,60
Квадратная, 1, 2, 3	12	0,292	3,50
Треугольная, 1, 2, 3	18	0,225	4,05
Объёмные решётки			
Типа алмаза	4	0,425	1,70
ПК 1	6	0,307	1,84
ОЦК 1	8	0,253	1,94
ГЦК 1	12	0,195	2,34
ОЦК 1, 2	14	0,175	2,45
ЦК 1, 2	18	0,137	2,47
ГЦК 1, 2	18	0,136	2,45
ПК 1, 2, 3	26	0,097	2,52
ОЦК 1, 2, 3	26	0,095	2,47
ГЦК 1, 2, 3	42	0,061	2,56

длина (по сравнению с R), характеризующая размер рассматриваемой системы. Важная отличительная черта этой задачи состоит в том, что окружности могут сколь угодно перекрываться друг с другом. Среднее число центров окружностей, приходящееся на

единицу площади, равно N . Иными словами, N — концентрация центров окружностей.

Две окружности считаются связанными друг с другом, если центр одной из них находится внутри другой, — такие окружности иногда называют охватывающими. Если окружность A связана с окружностью B , а B связана с C , то A связана с C . Таким образом, далекие друг от друга окружности могут быть связаны по цепочке охватывающих окружностей (рис. 7.1).

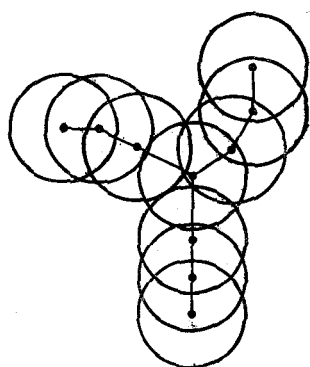


Рис. 7.1. Пути протекания по охватывающим окружностям показаны ломаными линиями. Точки изображают центры окружностей.

Задача состоит в том, чтобы найти критическое значение концентрации N , при котором возникает протекание по охватывающим окружностям, т. е. возникают пути, проходящие через всю систему и состоящие из охватывающих окружностей. (Иными словами, возникает бесконечный кластер связанных друг с другом окружностей.)

В задачу введено два параметра — концентрация N и радиус R . (Есть ещё размер системы L , но ясно, что если система достаточно

велика, критическое значение N слабо зависит от L .) Между тем, легко убедиться в том, что отсутствие или наличие протекания зависит не от двух параметров, а лишь от одного, представляющего собой безразмерное произведение NR^2 . (В случае плоской задачи размерность концентрации есть см^{-2} .) В качестве этого параметра удобно выбрать среднее число центров окружностей, находящееся внутри одной окружности. Оно равно

$$B = \pi NR^2.$$

В том, что протекание возникает при некотором значении параметра B и не зависит от того, чему при этом равны величины N и R по отдельности, легче всего убедиться следующим образом. Допустим, что дана плоскость с нарисованными на ней окружностями. Увеличим данную картину в несколько раз, например, с помощью проектора. Это и будет преобразование, меняющее N и R , но не меняющее B , поскольку среднее число центров окружностей, находящееся внутри окружности, от увеличения не меняется.

Легко также понять, что это преобразование не влияет на протекание. Если протекание отсутствовало на исходной картине, то оно отсутствует и на увеличенной, и, наоборот, если на исходной картине было протекание по охватывающим окружностям, то от увеличения оно не исчезнет.

Итак, преобразование, меняющее N и R , но не изменяющее B , не влияет на протекание. Таким образом, отсутствие или наличие протекания в системе зависит лишь от величины параметра B . При больших значениях этого параметра протекание есть, а при малых значениях его нет.

Эта новая задача, которая была только что сформулирована, называется *задачей окружностей*. Трёхмерный её аналог называется *задачей сфер*. Задача сфер формулируется следующим образом. В трёхмерном пространстве с помощью генератора случайных чисел задаются координаты центров сфер, имеющих радиус R . Две сферы называются связанными друг с другом (или охватывающими, если центр одной сферы находится внутри другой сферы). Требуется определить критическую концентрацию центров, при которой возникает протекание по охватывающим сферам.

Легко понять, что, как и в плоском случае, наличие протекания определяется только значением параметра, представляющего собой среднее число центров сфер, находящихся внутри одной сферы:

$$B = \frac{4\pi}{3}NR^3$$

где N — среднее число центров сфер в единице объема (объемная концентрация имеет размерность см^{-3}).

Как уже говорилось, задача сфер имеет важное значение для теории электропроводности полупроводников при низких температурах. Поэтому она исследовалась многими авторами с помощью самых различных методов. По современным данным критическое значение B_c , при котором возникает протекание по сферам, равно $2,7 \pm 0,1$. Задача окружностей исследовалась менее интенсивно, и в результатах, приводимых разными авторами, имеется значительный разброс. Вероятно, значение $B_c = 4,1 \pm 0,4$.

7.3. Задача окружностей (сфер) — предельный случай задачи узлов

Вернёмся к задаче узлов, в которой связаны друг с другом не только ближайшие соседи, и объясним, почему существует предел, стоящий в правой части формулы (7.1), почему он не зависит от типа решетки и, наконец, почему он обозначен той же буквой B_c , что и пороговые значения задач окружностей и сфер.

Начнём с того, что несколько иначе сформулируем задачу узлов. Для конкретности будем говорить сначала о плоских решётках. Обобщение на объёмные решётки оказывается очень простым.

Построим вокруг каждого белого узла окружность с радиусом R , выбранным так, что он больше, чем расстояние от этого узла до узлов последней координационной группы, с которой данный узел связан, но меньше, чем расстояние до узлов следующей координационной группы. Примем, что окружности связаны друг с другом, если связаны белые узлы, вокруг которых они построены. Это означает, что окружности связаны, если центр одной из них находится внутри другой, т. е. если окружности являются охватывающими.

Появление бесконечного кластера из связанных белых узлов эквивалентно возникновению протекания по охватывающим окружностям. Иными словами при критической доле белых узлов x_y появляется протекание по окружностям радиуса R , построенным вокруг белых узлов (рис. 7.2).

Легко понять смысл величины Z_x . Величина Z представляет

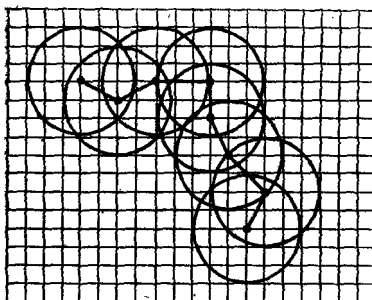


Рис. 7.2. Путь протекания по охватывающим окружностям, построенным на квадратной решётке. Взаимодействие учитывается на расстоянии, втрое большем, чем расстояние между ближайшими соседями. Путь протекания показан ломаной линией.

собой число узлов (и чёрных, и белых), находящихся внутри одной окружности. Величина Z_x есть среднее число лежащих внутри окружности центров других окружностей (или среднее число белых узлов внутри одной окружности). Величина Z_{xy} есть среднее число центров окружностей, лежащих внутри одной окружности, при котором возникает протекание, т. е. возникают бесконечные пути по охватывающим окружностям.

Отсюда видно, что произведение Z_{xy} имеет тот же смысл, что и величина B_c в задаче окружностей. Теперь, наверное, труднее понять, чем отличается задача узлов от задачи окружностей, чем понять, почему они похожи. Однако разница есть, и она очень существенна. Дело в том, что в задаче окружностей центрами окружностей могут быть любые точки на плоскости, а в задаче узлов ими являются лишь узлы рассматриваемой решётки (рис. 7.2). Если число узлов, находящихся внутри одной окружности, невели-

ко, то отличие между двумя задачами оказывается очень важным. Естественно, что при таких условиях критическое значение Z_{xy} зависит от типа решётки. Полное число узлов, находящихся внутри одной окружности, равно Z . Как видно из табл. 7.1, при не очень больших Z значения Z_{xy} для разных решёток, действительно, отличаются.

Однако, если число Z велико, то разница между двумя задачами стирается. Допустим, что мы начали с задачи окружностей, а затем переместили центр каждой окружности до ближайшего к нему узла решётки. Это уже будет задача узлов. Если узлов решётки внутри каждой окружности очень много, то с подавляющей вероятностью такой сдвиг не приведет к тому, что несвязанные окружности станут связанными, или наоборот. Отсюда видно, что при $Z \rightarrow \infty$ задача узлов и задача окружностей становятся эквивалентными. Значение B_c , определяемое формулой (7.1), не зависит от типа решётки и совпадает с величиной B_c , определенной в задаче окружностей.

Эти рассуждения полностью переносятся на трёхмерный случай. Для объёмных решёток величина B_c , определённая формулой (7.1), совпадает с величиной B_c , определённой в задаче сфер.

Итак, при большом значении Z задача узлов на любой плоской решётке сводится к задаче окружностей, а задача узлов на объёмной решётке сводится к задаче сфер. Таким образом, предел в формуле (7.1), действительно, не зависит от типа решётки, но зависит от размерности пространства, в котором решётка задана. (Величины B_c для окружностей и сфер разные!)

Глава 8.

Электропроводность примесных полупроводников и задача сфер

Теория протекания оказалась чрезвычайно полезной для понимания процессов, происходящих в полупроводниках с примесями (их называют *примесными* полупроводниками в отличие от чистых полупроводников, которые называют *собственными*). Можно, пожалуй, сказать, что в настоящее время примесные полупроводники являются одной из главных областей применения теории протекания. О примесных полупроводниках речь идет в нескольких главах книги. Настоящую главу мы начинаем с обсуждения современных представлений о них, прервав на время изложение теории протекания.

8.1. Собственные полупроводники

Поговорим сначала о чистых полупроводниках, взяв за основу полупроводниковые элементы четвертой группы таблицы Менделеева, такие как германий и кремний. Эти элементы кристаллизуются в решётку типа алмаза (рис. 6.4, а, б). На внешней оболочке ка-

ждого атома имеется четыре электрона, которые образуют связи с четырьмя ближайшими соседями. Характер движения внешних электронов таков, что их плотность не распределена равномерно вокруг атома, а сосредоточена в четырёх жгутах, направленных из центра тетраэдра, в котором находится каждый атом, к углам этого тетраэдра. Эти жгуты и стягивают атомы кристалла, не позволяя ему распадаться.

Можно представить себе, что каждый атом имеет четыре руки, которыми он берёт за руки своих четырёх соседей. При этом каждый электрон крепко связан со своими соседями, и если к полупроводнику приложить не очень сильное электрическое поле, то оно не вызовет электрический ток: электронов ровно столько, сколько требуется для образования связей, а для того чтобы вырвать электрон, осуществляющий связь, нужна довольно большая энергия. Эта энергия, точнее, минимальная работа, которая требуется, чтобы перевести электрон из связанного состояния в состояние, в котором он может свободно двигаться по кристаллу, называется *шириной энергетической щели* (или просто шириной щели) и обозначается через E_g .

Ширина энергетической щели — важнейшая характеристика полупроводника, в значительной степени определяющая все его электрические свойства. Рассмотрим, например, электропроводность. В чистом (собственном) полупроводнике электропроводность осуществляется за счёт того, что некоторое количество связей разорвано. При разрыве связи возникает электрон, способный проводить электрический ток и «покалеченный», «трёхрукий», атом. Этот «калека» также является носителем тока, только носи-

телем другого знака, чем электрон. Действительно, под действием электрического поля электрон соседнего атома может перейти на «трёхрукий», почти не изменив своей энергии. В результате «трёхруким» станет другой атом. Этот процесс может продолжаться, причём легко понять, что если электроны под действием поля движутся слева направо, то «трёхрукий» в результате этого же процесса движется справа налево. (Важно понимать, что сами атомы неподвижны. Просто за счёт движения электронов «трёхруким» становится то один, то другой атом) Поэтому «трёхрукий» атом также можно считать носителем тока, причём, в отличие от электрона, ему следует приписывать не отрицательный, а положительный заряд.

В полупроводниках, состоящих из атомов другой валентности, микроскопическая картина несколько иная, но во всех случаях при разрыве связи возникают два носителя тока, имеющих разные знаки. Один из них (отрицательный) называют электроном, а второй (положительный) — дыркой. Таким образом, «трёхрукий» атом является частным случаем дырки.

Энергия, необходимая для разрыва связей, черпается из энергии теплового движения атомов. В статистической физике доказывается, что при высоких температурах на один атом, совершающий малые колебания вблизи положения равновесия, приходится в среднем энергия теплового движения, равная $3kT$, где T — температура в градусах Кельвина, а k — постоянная Больцмана ($k = 1,38 \cdot 10^{-16}$ эрг/К).

Ширину щели E_g , как правило, измеряют в электрон-вольтах (эВ). Один электрон-вольт — это работа, которая совершается од-

ним электроном, когда он проходит участок пути с разностью потенциалов в 1 В: $1 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг}$. В германии $E_g = 0,7 \text{ эВ}$, а в кремнии $E_g = 1,1 \text{ эВ}$. При комнатной температуре (300 К) энергия $3kT$ составляет всего лишь 0,08 эВ. Это значительно меньше, чем требуется для разрыва связи и в германии, и в кремнии.

Однако тепловое движение носит хаотический характер и в отдельные моменты времени энергия движения атома может оказаться очень большой. С каждым отдельным атомом это происходит крайне редко, но зато атомов очень много. Их число в 1 см^3 примерно составляет 10^{22} . (Напомним, что число атомов в одном моле равно постоянной Авогадро $6 \cdot 10^{23}$.)

Поэтому концентрация электронов и дырок, появившихся за счёт разрыва связей, гораздо меньше, чем концентрация атомов, но все же настолько велика, что в определенной области температур может обеспечить заметную электропроводность. Расчёт показывает, что в германии при $T = 300 \text{ К}$ концентрация электронов порядка 10^{13} см^{-3} . В кремнии, где щель шире, при той же температуре концентрация гораздо меньше (10^{10} см^{-3}). С понижением температуры концентрация электронов резко падает и соответственно резко растёт сопротивление собственного полупроводника.

Чем больше ширина энергетической щели, тем меньше носителей тока при заданной температуре. Вся разница между полупроводником и диэлектриком состоит лишь в ширине щели. Вещества с E_g порядка 5 эВ и больше, как правило, называют диэлектриками. При комнатной температуре в них практически нет носителей

тока.

Если разница между диэлектриком и полупроводником скорее количественная, чем качественная, то разница между металлом и диэлектриком носит принципиальный характер. В металле ширина энергетической щели равна нулю, а концентрация носителей тока велика даже вблизи абсолютного нуля температур.

8.2. Примесные полупроводники

Допустим, что в германий или кремний введены в качестве примесей элементы пятой группы таблицы Менделеева, такие как фосфор, сурьма, мышьяк. Атомы этих элементов имеют пять внешних электронов. Если такой атом замещает, например, атом германия, находящийся в центре тетраэдра, то четыре его электрона идут на образование связей с четырьмя соседями, а пятый электрон остается лишним. Этот электрон связан со своим атомом, потому что если электрон уйдет, то атом останется положительно заряженным и будет притягивать свой электрон обратно. Таким образом, для того чтобы удалить электрон на очень большое расстояние от атома, нужно совершить работу против сил притяжения. Эта работа и называется *энергией* связи электрона с атомом.

Как показано чуть ниже, энергия связи лишнего электрона относительно мала, так что этот электрон находится довольно далеко от примесного атома (по сравнению с периодом кристаллической решётки). Поэтому вся структура примесного атома напоминает простейший из атомов атом водорода. Напомним, что атом водорода состоит из положительно заряженного тяжёлого ядра и

лёгкого отрицательного электрона, причём размеры ядра ничтожно малы по сравнению с расстоянием от ядра до электрона.

Аналогичную структуру имеет и примесный атом. При этом роль водородного ядра играет не только ядро примесного атома, но и его внутренние электроны, и четыре электрона, образовавшие связи. Размер всего этого образования, как будет сейчас видно, мал по сравнению с расстоянием до лишнего электрона, а заряд образования положителен и по абсолютной величине равен заряду электрона.

Как известно, в атоме водорода электрон находится от ядра на расстоянии порядка так называемого боровского радиуса a_B , который выражается формулой

$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0,53 \cdot 10^{-8} \text{ см.} \quad (8.1)$$

Здесь $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-27}$ эрг · с — постоянная Планка (деленная на 2π), $m = 9,8 \cdot 10^{-28}$ г — масса электрона, $e = 4,8 \cdot 10^{-10}$ ед. СГСЭ — заряд электрона.

Фундаментальная константа \hbar была введена немецким физиком М. Планком в 1901 г. в связи с гипотезой о квантовом характере электромагнитных волн. Эта константа входит в квантовомеханическое уравнение, описывающее движение электрона около ядра. Кроме неё в уравнение входят только константы e и m . Боровский радиус есть единственная величина, имеющая размерность длины, которую можно составить из e , m и \hbar . Энергия связи электрона в атоме водорода равна

$$E_B = \frac{me^4}{2\hbar^2} \approx 13,6 \text{ эВ.} \quad (8.2)$$

По порядку величины эту формулу можно интерпретировать следующим образом. Положительное ядро создает на расстоянии r потенциал $\frac{e}{r}$. На расстоянии порядка a_B он равен $\frac{e^2}{a_B}$, а на бесконечно большом расстоянии — нулю. Поэтому работа, которую нужно затратить, чтобы перенести электрон, находящийся на расстоянии порядка a_B от ядра, на бесконечно большое расстояние, равна по порядку величины $\frac{e^2}{a_B}$ (разность потенциалов, помноженная на заряд электрона).

Вернемся теперь к примесному атому. Формулы, написанные для атома водорода, необходимо модифицировать, чтобы учесть, что лишний электрон движется не в пустом пространстве, а в кристалле полупроводника. При этом меняется вид закона Кулона. Сила, действующая на электрон, находящийся на расстоянии r от ядра, равна теперь не $\frac{e^2}{r^2}$, а $\frac{e^2}{\varepsilon r^2}$ (ед. СГСЭ), где ε — диэлектрическая проницаемость кристалла. Это обстоятельство можно учесть, заменив в выражениях для a_B и E_B величину e^2 на $\frac{e^2}{\varepsilon}$. Кроме того, следует иметь в виду, что масса, описывающая движение электрона по кристаллу, не совпадает с массой свободного электрона m .

Дело в том, что в кристалле существует периодический электрический потенциал, создаваемый ядрами атомов полупроводника и внутренними электронами. Один из самых интересных выводов квантовой теории твердого тела состоит в том, что если этот потенциал точно периодический, то электрон почти не замечает его. Это «почти» состоит в том, что, выбрасывая периодический потенциал из уравнения движения электрона, нужно одновременно заменить массу электрона m на массу m^* , зависящую от свойств кристалла. Величина m^* называется *эффективной массой*.

Примесный атом создает не периодический потенциал, который никак нельзя выбросить. Но описывая движение электрона в этом потенциале, можно не учитывать периодический потенциал кристалла, заменив m на m^* .

Итак, уравнение, описывающее движение лишнего электрона в кристалле вокруг заряженного примесного атома, отличается от уравнения движения электрона в атоме водорода заменами $e^2 \rightarrow \frac{e^2}{\varepsilon}$ и $m \rightarrow m^*$

Обозначим характерное расстояние, на которое удален лишний электрон от примесного атома, через a_B^* , а энергию связи этого электрона — через E_B^* . Пользуясь формулами (8.1) и (8.2), получим

$$a_B^* = 0,53 \cdot 10^{-8} \left(\frac{m}{m^*} \right) \varepsilon \text{ [см]}, \quad (8.3)$$

$$E_B^* = 13,6 \left(\frac{m^*}{m} \right) \frac{1}{\varepsilon^2} \text{ [эВ]}. \quad (8.4)$$

Как правило, в полупроводниках эффективные массы значительно меньше, чем масса свободного электрона, а диэлектрическая проницаемость равна 10–15 (например, в германии $m^* \approx 0,1m$, а $\varepsilon = 16$). Благодаря этому характерное расстояние, на котором находится лишний электрон, составляет в типичных полупроводниках от нескольких десятков до сотен ангстрем ($1\text{Å} = 10^{-8}$ см). что значительно больше, чем межатомное расстояние, (В германии оно равно $2,45 \text{Å}$).

Итак, мы получили, что в примесном атоме лишние электроны удалены от атома на значительное расстояние и удерживаются на

этом расстоянии силами притяжения к ядру. Уже исходя из того, что расстояние a_B^* велико, должно быть ясно, что энергия связи E_B^* мала. Действительно, из приведенных данных видно, что энергия связи типичных полупроводников составляет от нескольких сотых до нескольких тысячных электрон-вольта, т. е. она значительно меньше, чем ширина энергетической щели E_g (0,7 эВ для германия).

Это естественно, так как оторвать лишний электрон от примесного атома легче, чем оторвать электрон, осуществляющий связь между атомами. Тепловая энергия kT сравнивается с 0,01 эВ при температуре порядка 100 К. При такой температуре, как правило, значительная часть лишних электронов отрывается от своих примесных атомов и принимает участие в переносе электрического тока. Таким образом, примесные атомы пятой группы таблицы Менделеева сравнительно легко отдают свои лишние электроны. Поэтому они называются *донорами* (в переводе с английского слово **donor** означает «отдающий»).

Допустим теперь, что примесными атомами являются элементы третьей группы таблицы Менделеева, такие как бор, алюминий, галлий и т. д. У этих атомов на внешней оболочке оказываются три электрона, так что для образования связей с четырьмя соседями им *не хватает* одного электрона. Этот электрон легко заимствуется у соседних атомов полупроводника, но при этом один из соседних атомов становится «трёхруким» или, иными словами, в окрестности примесного атома появляется дырка. Захватив четвёртый электрон, примесный атом становится отрицательно заряженным. Поэтому дырка притягивается к этому атому электрическими си-

лами, и для того чтобы её оторвать, нужно совершить работу. Эта работа называется энергией связи дырки с примесным атомом.

Вычисление энергии связи дырки снова приводит к задаче о водородоподобном атоме, только теперь вокруг отрицательно заряженного ядра движется положительно заряженная дырка. Роль ядра играет примесный атом вместе с захваченным дополнительным электроном. Этот дополнительный электрон превращается в жгут, образующий связь между атомами, и потому область его движения не превышает межатомного расстояния. В то же время дырка связана с примесным атомом гораздо слабее. Расстояние от атома, на котором она находится, и энергия связи определяются формулами (8.3) и (8.4). Нужно только принимать во внимание, что эффективная масса дырки, которую следует использовать в этом случае, вообще говоря, отличается от эффективной массы электрона. Как правило, она также значительно меньше, чем масса свободного электрона, так что дырочный водородоподобный атом тоже имеет размеры порядка десятков ангстрем, а энергию связи порядка нескольких сотых электрон-вольта.

При температуре около 100 К тепловое движение отрывает дырки от примесных атомов, после чего дырки ведут «самостоятельный образ жизни» и, если приложить электрическое поле, принимают участие в переносе тока.

Таким образом, примесные атомы элементов третьей группы обладают способностью легко принимать электрон и образовывать дырку. Поэтому они называются *акцепторами* (в переводе с английского слово *acceptor* означает «принимающий»).

Подведём итоги сказанному. Подвижные носители тока образу-

ются в полупроводниках только за счёт энергии теплового движения. Они могут образовываться за счёт разрыва связей решётки. Для этого нужно совершить работу, равную ширине энергетической щели E_g . При этом одновременно появляются электрон и дырка. Кроме того, они могут рождаться по одиночке за счёт отрыва электрона или дырки от примесного атома. Так как энергия связи электрона и дырки с примесным атомом значительно меньше, чем ширина энергетической щели, то вероятность того, что электрон оторвётся от примесного атома, гораздо больше, чем вероятность, что разорвётся какая-либо связь. С другой стороны, концентрации примесных атомов, как правило, намного порядков ниже, чем концентрация основных атомов. Поэтому при повышении температуры сначала отрываются все носители, находящиеся на примесях, а концентрация собственных носителей (электронов и дырок, возникающих из-за обрыва связей) ничтожно мала. Эту температурную область называют областью примесной проводимости. Однако при дальнейшем повышении температуры концентрация собственных носителей сравнивается с концентрацией примесей и начинает её превосходить. Эта область называется областью собственной проводимости.

Самый важный для дальнейшего изложения вывод состоит в том, что при очень низкой температуре, когда энергия теплового движения kT мала по сравнению с энергией связи электронов на примесях, *в полупроводнике нет никаких носителей, ни примесных, ни собственных*. Связи находятся там, где они должны быть, а примесные электроны и дырки локализованы в окрестности своих атомов. Электропроводность полупроводника в этой

области очень резко обращается в нуль при понижении температуры. Этим полупроводник отличается от металла, в котором концентрация подвижных носителей остается большой при сколь угодно низкой температуре.

8.3. Переход к металлической электропроводности при повышении концентрации примесей

Это принципиальное отличие полупроводника от металла неожиданно исчезает при увеличении концентрации примесей. Если концентрация превышает некоторое критическое значение N_c , то при сколь угодно низких температурах электропроводность остается сравнительно большой и слабо зависит от температуры. Электропроводность с таким поведением называют *металлической*. Это совсем не значит, что по порядку величины электропроводность полупроводника сравнивается с электропроводностью хороших металлов. Электропроводность полупроводника всегда остается на много порядков ниже. Название отражает лишь характер поведения электропроводности при низких температурах. *Переход к металлической электропроводности, происходящий при увеличении концентрации примесей называют переходом диэлектрик-металл или переходом Мотта* (по имени известного английского физика Н. Мотта).

Эксперименты показали, что критическая концентрация примесей N_c , при которой происходит переход Мотта, довольно сильно изменяется от одного полупроводника к другому. Хорошую оцен-

ку величины N_c можно получить с помощью соотношения

$$N_c (a_B^*)^3 \approx 0,02. \quad (8.5)$$

Например, в германии $N_c = 10^{17}$, а в кремнии $N_c = 3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

Удовлетворительной математической теории перехода Мотта в полупроводниках до сих пор не существует. Это одна из сложнейших задач физики твёрдого тела. Качественные соображения состоят в следующем.

По своей структуре примесные атомы похожи на одновалентные элементы первой группы таблицы Менделеева (H, Li, Na, K). Подобно этим элементам, примесный атом имеет один электрон на внешней оболочке. Кристаллизуясь, элементы первой группы образуют хорошие металлы. Водород образует молекулярный кристалл и является диэлектриком. Однако есть все основания думать, что при достаточно большом давлении он тоже становится металлом. (В настоящее время в этом направлении ведётся столь интенсивная работа, что она могла бы стать темой самостоятельной книги.)

Совершенно естественно, что водородоподобные примесные атомы, если они расположены внутри полупроводника достаточно плотно, тоже должны образовывать металлическую систему.

На первый взгляд кажется странным, что это может иметь отношение к переходу Мотта. Действительно, концентрации атомов в металлическом натрии порядка 10^{22} см^{-3} , что примерно в 100 тысяч раз больше концентрации примесей в германии, при которой происходит переход Мотта. Ясно, что при столь низких концентрациях натрия не может быть металлом.

Однако металлизация системы определяется не просто величиной концентрации, а степенью перекрытия электронных оболочек соседних атомов. Если атомы находятся на столь большом расстоянии, что области пространства, в которых движутся их внешние электроны, далеки друг от друга, то это просто изолированные атомы. Если же ядра атомов так близки друг к другу, что области движения их внешних электронов перекрываются (накладываются), то атомы теряют свою индивидуальность. Их внешние электроны «не могут знать», какому из ядер они принадлежат. В системе из большого числа атомов происходит обобществление, коллективизация электронов. Электроны образуют самостоятельную систему, способную проводить электрический ток. Такое вещество является металлом.

Для водородоподобных атомов величина перекрытия определяется безразмерным параметром $N (a_B^*)^3$. (Величина $\frac{4}{3}\pi N (a_B^*)^3$ представляет среднее число ядер атомов, помещающихся внутри сферы с радиусом, равным эффективному боровскому радиусу.) Как уже говорилось, благодаря тому, что примесный атом находится внутри полупроводника, его радиус аномально велик. По этой причине условие (8.5) выполняется уже при $N = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ (для германия).

Из приведённых соображений должно быть ясно, почему переход Мотта во всех проводниках происходит примерно при одном и том же значении параметра $N (a_B^*)^3$, хотя критические концентрации N_c могут сильно меняться. Ведь именно этот параметр определяет перекрытие соседних атомов!

Можно поставить вопрос: какой концентрацией атомов должен

обладать кристалл водорода, чтобы перекрытие его атомов было таким же, как перекрытие примесных атомов, находящихся в полупроводнике, при концентрации, соответствующей переходу Мотта? Перекрытие определяется формулой (8.5), но теперь в неё естественно подставить боровский радиус, полученный из формулы (8.1). Тогда получится чудовищная концентрация, равная 10^{23} см⁻³. Таким, образом, перекрытие, соответствующее переходу Мотта, является очень большим.

Поэтому нет оснований удивляться, что примесные атомы при концентрации, большей, чем N_c , образуют металлическую систему. Этот факт лежит в основе современной теории полупроводников с большой концентрацией примесей.

8.4. Переход Мотта и задача сфер

Теория протекания предлагает упрощённое описание перехода Мотта, учитывающее, что примеси в полупроводнике расположены хаотически и могут образовывать сгущения и разряжения. Допустим, что в некоторой области примесные атомы расположены так близко друг к другу, что их электронные оболочки сильно перекрываются и внешние электроны обобществляются. Такая область представляет собой кусок металла: если к ней приложить разность потенциалов, то потечёт электрический ток.

Однако существование таких областей недостаточно для того, чтобы массивный образец вёл себя как металл. Если металлические области встречаются редко, они не сообщаются друг с другом, а представляют собой лишь изолированные металлические

вкрапления в веществе, которое при низких температурах является диэлектриком. В целом такое вещество ведет себя как диэлектрик.

С повышением концентрации примесей доля пространства, занятая металлическими областями, увеличивается и при некоторой критической концентрации N_c металлические области образуют связанную систему «озёр и каналов», пронизывающую весь полупроводниковый кристалл. Начиная с этой концентрации электропроводность массивного образца приобретает металлический характер.

Ясно, что математическая формулировка изложенных выше представлений должна быть связана с теорией протекания, однако постановка задачи не проста. Главная трудность состоит в том, что нам не известно, при какой концентрации примесей данную область можно считать металлической.

Простейшая модель перехода Мотта, сформулированная в шестидесятых годах, состоит в следующем. Представим, что каждый примесный атом является металлическим шариком с некоторым радиусом r_0 . Шарики могут проникать друг в друга (рис. 8.1, а), т. е. занимаемые ими области пространства могут перекрываться. Шарики образуют цепочки (рис. 8.1, б) и области более сложной формы, которые по определению считаются металлическими. Нужно найти концентрацию шариков N_c , начиная с которой металлические области обеспечивают электропроводность массивного образца.

Из каких же соображений следует выбирать радиус r_0 ? Водородоподобный примесный атом не имеет четких границ. Вероят-

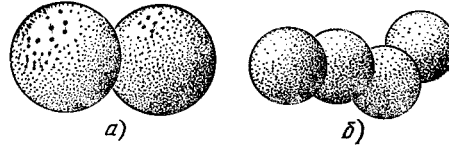


Рис. 8.1. а) Перекрывающиеся шары, изображающие атомы с обобществленными электронами; б) цепочка из перекрывающихся шаров — металлический канал, по которому может распространяться электрический ток.

ность найти электрон на расстоянии r от ядра убывает с увеличением r по закону $e^{\frac{-2r}{a_B^*}}$, где $e \approx 2,718$ — основание натурального логарифма. Вероятность найти электрон при $r = \frac{a_B^*}{2}$ в 2,7 раза меньше, чем при $r = 0$; при $r = a_B^*$ в 7,4 раза меньше, чем при $r = 0$; при $r = 1,5a_B^*$ в 20 раз меньше. Определённо можно сказать, что эффективный радиус атома должен быть пропорционален длине a_B^* :

$$r_0 = qa_B^*. \quad (8.6)$$

Это важное утверждение. Оно означает, что численный коэффициент q должен обладать определенной универсальностью: он сравнительно слабо меняется при переходе от полупроводника к полупроводнику, в то время как величина a_B^* меняется сильно.

Заранее вычислить величину q из каких-либо физических соображений очень сложно. Более простой путь состоит в том, чтобы в рамках сформулированной выше модели найти критическую концентрацию N_c соответствующую переходу Мотта. Она будет выражена через радиус шарика r_0 . Затем, пользуясь формулой (8.6), нужно выразить N_c через q и a_B^* . Согласно экспери-

ментальным данным величина N_c определяется формулой (8.5). Сравнивая теоретически выражение с формулой (8.5), можно найти величину q , т. е. как бы определить её из экспериментальных данных.

Перейдём к осуществлению этой программы. Нужно решить следующую задачу теории протекания. В трёх мерном пространстве построены шары с радиусом r_0 центры которых распределены в пространстве хаотически и в среднем равномерно. Среднее число центров шаров, приходящееся на единицу объёма, равно N . Два шара считаются связанными, если они перекрываются друг с другом (рис. 8.1, б). Нужно найти критическое значение концентрации N_c , при котором возникает протекание по перекрывающимся шарам, т. е. возникают пути, проходящие через всю систему и состоящие из перекрывающихся шаров (рис. 8.1, б).

Эта задача отличается от задачи сфер, сформулированной в предыдущей главе, тем, что в задаче сфер связанными считались охватывающие, а не перекрывающиеся сферы, т. е. сферы, центры которых находятся на расстоянии, меньшем, чем r_0 , а не $2r_0$. Эта разница, однако, малосущественна — результаты одной задача без труда переносятся на другую. Действительно, если при некоторой концентрации центров существует бесконечный путь по охватывающим сферам радиуса $2r_0$, то существует и путь по перекрывающимся сферам радиуса r_0 . Это просто тот же самый путь, т. е. путь по тем же центрам. На рис. 8.2 эта мысль иллюстрируется для случая плоской задачи. (Легко понять, как должен выглядеть соответствующий чертёж для объёмной задачи.) Если нет пути по охватывающим сферам радиуса $2r_0$, то нет и пути по перекры-

вающимся сферам радиуса r_0 . Отсюда следует, что критическая концентрация, соответствующая порогу протекания по охватывающим сферам радиуса $2r_0$, равна критической концентрации, соответствующей порогу протекания по перекрывающимся сферам радиуса r_0 .

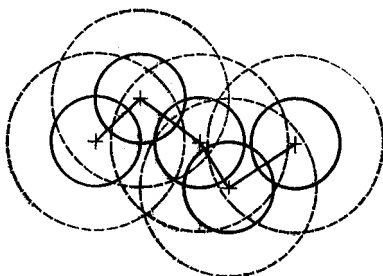


Рис. 8.2. Штриховыми линиями показана цепочка охватывающих окружностей с радиусом $2r_0$. Центры окружностей помечены крестами. Путь протекания по центрам показан ломаной линией. По этим же центрам идет протекания по перекрывающимся окружностям радиуса r_0 .

Согласно результатам предыдущей главы критическая концентрация для протекания по охватывающим сферам радиуса $2r_0$ определяется условием

$$\frac{4\pi}{3}N_c(2r_0)^3 = B_c \approx 2,7. \quad (8.7)$$

Подставляя выражение (8.6) в (8.7), получим

$$N_c(a_B^*) = \frac{0,08}{q^3}. \quad (8.8)$$

Коэффициент q можно теперь найти, сравнивая выражение (8.8) с полученным из экспериментальных данных выражением (8.5). Для того чтобы эти выражения совпадали, следует положить

$q = 1,6$. Следовательно, эффективный радиус r_0 равен $1,6a_B^*$. Вероятность найти электрон в точке, находящейся на расстоянии $r = r_0$ от ядра, в 24 раза меньше, чем в точке $r = 0$.

Самое главное в этом описании перехода диэлектрик–металл состоит, конечно, не в вычислении величины q , определяющей эффективный радиус атома, а в том, что теория протекания позволяет представить, как устроено полупроводник при концентрации примесей, близкой к N_c

Если предложенное описание правильно, то в полупроводнике имеется система металлических каналов, пронизывающая его насквозь. По этим каналам, как по проводам, течёт электрический ток. Как будет показано в третьей части книги, доля объёма полупроводника, занятая этими каналами, очень мала, если концентрация примесей близка к N_c . С этим связаны специфические свойства электропроводности и других важных характеристик полупроводника.

Упражнение

1. Антимонид индия (**InSb**) представляет собой полупроводник с очень малой шириной щели (0,18 эВ при комнатной температуре). У таких полупроводников малы и эффективные массы. Считая, что эффективная масса m^* электрона равна $0,015m$, а диэлектрическая проницаемость $\varepsilon = 18$, вычислите эффективный боровский радиус a_B^* и критическую концентрацию N_c , соответствующую переходу Мотта диэлектрик–металл.

Глава 9.

Различные обобщения задачи сфер

9.1. Охватывающие фигуры произвольной формы

Как уже говорилось, движение электрона в кристалле описывается так называемой эффективной массой m^* , которая может существенно отличаться от массы свободного электрона, т. е. массы электрона, находящегося в пустом пространстве. Оказывается, что эффективная масса может отличаться от массы свободного электрона не только по величине. Дело в том, что в кристалле не все направления эквивалентны. Например, характер движения электрона вдоль ребер куба может отличаться от характера его движения вдоль диагоналей куба и диагоналей граней куба. Поэтому эффективная масса может быть разной в разных направлениях. Тогда область, в которой движется электрон в окрестности донорного атома, уже не будет иметь вид шара. Она может быть эллипсоидом или ещё более сложной фигурой.

В связи с этим задача сфер была обобщена на случай фигур произвольной формы. Новая задача формулируется так: заданы узлы, распределенные в пространстве хаотически и в среднем равномерно-

но. Концентрация узлов равна N . Вокруг каждого узла построена одна и та же замкнутая поверхность произвольной формы.

Поверхности, построенные вокруг разных узлов, не только одинаковы по форме, но и одинаково ориентированы в пространстве. Если, например, поверхности имеют форму рыбы, то хвосты всех рыб должны смотреть в одну сторону.

Объём, находящийся внутри одной поверхности, равен V . Два узла считаются связанными друг с другом, если один из них находится внутри поверхности, построенной вокруг другого (охватывающие поверхности). Нужно найти критическое значение концентрации N , при котором возникает протекание по связанным узлам.

Как и в задаче сфер, наличие или отсутствие протекания определяется только значением параметра B , представляющего собой произведение VN . Это есть среднее число узлов, находящихся в объёме, ограниченном одной поверхностью. Оно не изменится, если увеличить или уменьшить масштабы вдоль всех трёх направлений, т. е. умножить или разделить координаты всех узлов системы и всех точек, лежащих на поверхностях, на одно и то же число. Ясно также, что такое изменение масштабов не уничтожит протекание, если таковое имеется, и не создаст его. Таким образом, протекание «не реагирует» на изменения N и V , при которых не меняется величина B . Поэтому, как и в задаче сфер, удобно говорить не о критической концентрации N_c , а о критическом значении параметра B :

$$B_c = N_c V. \quad (9.1)$$

Если, не меняя формы поверхности, построенной вокруг каждого узла, увеличить объём V , ограниченный этой поверхностью, например, в два раза, то критическая концентрация N_c уменьшится в два раза, а параметр B_c не изменится. Он зависит лишь от формы поверхности. Формула (9.1) обобщает формулу

$$B_c = \frac{4}{3}\pi N_c R^3, \quad (9.2)$$

использованную ранее для задачи сфер.

В общем случае критическое значение B_c , при котором возникает протекание, не должно совпадать со значением $B_c = 2,7$, полученным для задачи сфер. Вопрос о значениях B_c для разных фигур является в настоящее время предметом интенсивного изучения.

9.2. Задача эллипсоидов

Советские ученые Я. Г. Синай и Б. И. Шкловский доказали, что некоторые разные поверхности имеют одно и то же значение B_c . В частности, такими поверхностями являются эллипсоид и сфера (а в плоском случае эллипс и окружность).

Напомним сначала, что такое эллипс и эллипсоид. Эллипсом называют изображённую на плоскости замкнутую кривую, которая получается из окружности растяжением (или сжатием) вдоль одной из осей (рис. 9.1). Для того чтобы произвести растяжение или сжатие, нужно преобразовать каждую точку M , лежащую на окружности и имеющую координаты x, y , в точку M' с коорди-

натами $x' = kx, y' = y$, где k — коэффициент растяжения ($k > 1$ соответствует растяжению, а $k < 1$ — сжатию).

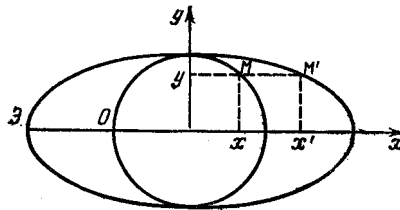


Рис. 9.1. Эллипс Э, полученный из окружности O растяжением вдоль оси x .

Поверхность, которая получается из сферы растяжением (или сжатием) вдоль одной из осей, называется эллипсоидом вращения. Для того чтобы произвести растяжение или сжатие вдоль оси z , необходимо каждую точку, лежащую на сфере и имеющую координаты x, y, z , преобразовать в точку с координатами $x' = x, y' = y, z' = kz$. Фигура, которая при этом получается, изображена на рис. 9.2. Она называется эллипсоидом вращения, потому что переходит сама в себя при повороте на любой угол вокруг оси z (называемой осью вращения). Если рассечь её плоскостью, проходящей через ось z , то в сечении получится эллипс. Сечение плоскостью, перпендикулярной оси z , представляет собой окружность.

Эллипсоид общего вида получается из эллипсоида вращения путём растяжения (или сжатия) вдоль одной из осей, перпендикулярных оси вращения. Новый коэффициент растяжения может отличаться от k . Сечение эллипсоида общего вида любой из плоскостей, параллельной плоскостям xOy, xOz, yOz , представляет

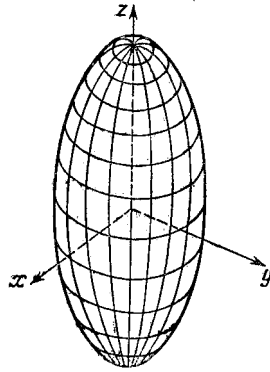


Рис. 9.2. Эллипсоид вращения.

собой эллипс.

Докажем теперь, что значения B_c для эллипсоидов и сфер одинаковы. Пусть заданы узлы, хаотически распределённые в пространстве со средней концентрацией, равной N . Вокруг каждого узла построена сфера с радиусом R . Если $B = \frac{4}{3}\pi NR^3 > B_c^{CB}$, то протекание по сферам есть, а при выполнении обратного неравенства протекание по сферам нет. Здесь $B_c^{CB} = 2,7 \pm 0,1$.

Произведём растяжение вдоль осей z и x по закону $y' = y$, $x' = k_1 x_1$, $z' = k_2 z$ так, чтобы этому преобразованию подверглись и координаты узлов, и координаты точек, лежащих на сферах. (Если бы речь шла о плоской задаче, то можно было бы представить, что узлы и окружности нанесены на резиновой полосе, которую затем растягивают в одном направлении. А можно вообразить и трёхмерное «резиновое пространство», внутри которого помечены точки, изображающие узлы и поверхности сфер. Затем это «резиновое пространство» растягивается в двух направлениях.)

Если x — координаты узлов представляют случайные числа, равномерно распределённые в интервале от 0 до L , где L — раз-

мер системы, то новые координаты x' , полученные умножением на k_1 , также представляют собой случайные числа, равномерно распределённые в интервале от 0 до k_1L . Координаты z' равномерно распределены в интервале $(0, k_2L)$, а координаты y не изменились. Концентрация узлов N' стала отличаться от концентрации N .

Все сферы преобразовались в эллипсоиды с объёмом V . (Можно показать, что $V' = k_1k_2 \cdot \frac{4}{3}\pi R^3$. Для дальнейшего вывода это не существенно.) Поэтому в результате из задачи сфер получилась задача эллипсоидов. Для неё нужно ввести величину $B' = N'V'$ и найти критическое значение B' , при котором возникает протекание по эллипсоидам. Обозначим его через $B_C^{\text{э}}$.

Дальнейшее доказательство разбивается на следующие пункты:

1. $B = B'$. Все узлы, которые до преобразования лежали внутри некоторой сферы, после преобразования оказываются внутри эллипсоида, получившегося из этой сферы. Действительно, если сфера растягивается (или сжимается), то на любом этапе растяжения внутренние по отношению к ней точки остаются внутренними, а наружные — наружными. Следовательно, среднее число узлов B , которое до преобразования находилось внутри одной сферы, равно среднему числу узлов B' , которое после преобразования находится внутри одного эллипсоида.

2.

$$\text{Если } B > B_C^{\text{сф}}, \text{ то } B > B_C^{\text{э}} \quad (9.3)$$

$$\text{Если } B < B_C^{\text{сф}}, \text{ то } B < B_C^{\text{э}} \quad (9.4)$$

Действительно, если до преобразования две сферы были связаны, т. е. центр одной из них находился внутри другой, то два эллипсоида, возникшие из этих сфер, также будут связанными, поскольку в результате преобразования внутренние точки останутся внутренними, а наружные — наружными. Если две сферы не были связаны, то получившиеся из них эллипсоиды также не будут связанными. Отсюда следует, что если $V > V_c^{\text{сф}}$, т. е. существуют бесконечные пути протекания по связанным сферам, то существуют бесконечные пути протекания по связанным эллипсоидам, что в свою очередь означает, что V' больше, чем пороговое значение $V_c^{\text{э}}$. Так как $V' = V$ отсюда получаем условие (9.3). Если $V < V_c^{\text{э}}$, т. е. протекания по связанным сферам не существует, то не существует и протекания по связанным эллипсоидам, т. е. $V' < V_c^{\text{э}}$. Отсюда следует условие (9.4).

3. Так как условия (9.3) и (9.4) должны выполняться при любом значении V , то из них вытекает, что $V_c^{\text{сф}} = V_c^{\text{э}}$, что и требовалось доказать.

9.3. Другие поверхности

Задача эллипсоидов очень важна для физики полупроводников, однако в ряде случаев ее недостаточно. Поэтому физиков очень интересовал вопрос о том, как зависит критическое значение V_c от формы поверхности в тех случаях, когда точные соотношения отсутствуют. С этой целью производились расчеты на ЭВМ по ме-

тоту Монте-Карло, которые продемонстрировали удивительный и очень важный факт: B_c очень слабо зависит от формы поверхности.

Изучались фигуры, имеющие вид куба и тетраэдра. Оказалось, что в пределах точности расчёта ($\pm 0,1$) критические значения для этих фигур не отличаются ни друг от друга, ни от значения B_c для задачи сфер. Старались найти фигуру, максимально «непохожую» на сферу. В качестве такой фигуры выбрали «трёхмерный крест» — фигуру, образованную тремя вытянутыми параллелепипедами, пересекающимися в начале координат (рис. 9.3). Оказалось, что для такой поверхности значение B_c всего на 20% меньше, чем для сферы.

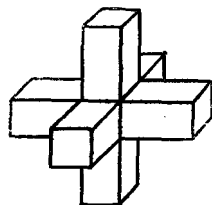


Рис. 9.3. "Трёхмерный крест"

То же самое выяснилось и для плоских фигур. Исследования показали, что значение B_c для квадратов отличается от значения B_c для окружностей всего на 2%.

Итак, в классе фигур одной размерности (т. е. либо плоских, либо объёмных) величина B_c является с хорошей точностью универсальной. Может быть, за этим кроются какие-либо соотношения, подобные доказанному в предыдущем разделе, и там, где расчёты на ЭВМ обнаруживают слабое отличие или не обнаруживают от-

личия в пределах точности, на самом деле имеют место строгие равенства. (К слабым отличиям, полученным с помощью ЭВМ, следует относиться критически, так как правильно оценить точность результатов не всегда просто.) К сожалению, ничего, кроме сказанного, в настоящее время не известно.

9.4. Ещё один эксперимент на домашней кухне и задача твердых сфер

Три студента Гарвардского университета (США) выполнили следующий простой опыт. В сосуд положили 5000 маленьких шариков, часть которых была сделана из алюминия, а другая часть — из пластика. Шарик были заранее тщательно перемешаны. Сосуд хорошенько потрясли, чтобы добиться максимально плотной упаковки шариков. На дне сосуда был электрод из фольги, сверху положили ещё один электрод и сдавили систему нагрузкой в 15 кг.

Алюминий является хорошим металлом, а пластик — диэлектриком. Цель опыта состояла в том, чтобы найти критическую долю x_c шариков из алюминия, при которой возникает ток между электродами, т. е. возникают пути до касающимся друг друга алюминиевым шарикам. Оказалось, что $x_c \approx 0,25$.

Кроме того, опыт позволял исследовать электропроводность системы в зависимости от x при $x > x_c$.

Речь идёт ещё об одной задаче теории протекания — задаче твёрдых сфер. Пожалуй, ближе всего эта новая задача стоит к задаче узлов. Вспомним построение, обсуждавшееся в гл. 6 в связи

с приближенной оценкой порога протекания задачи узлов. Вокруг каждого узла решётки строится сфера с радиусом, равным половине расстояния до ближайшего соседа. Сферы, построенные вокруг белых узлов, называются белыми, а построенные вокруг чёрных узлов, — чёрными. Протекание по белым узлам эквивалентно существованию путей по касающимся друг друга белым сферам (см рис. 6.5).

Различие между задачей узлов и новой задачей состоит в том, что в задаче узлов центрами сфер являются узлы регулярной решётки, а в новой задаче центры сфер могут находиться где угодно. Ниже показано, что это различие не очень важно.

Разница между новой задачей и задачей сфер, обсуждавшейся в предыдущих главах и предыдущих разделах этой главы, состоит в том, что сферы, фигурирующие в новой задаче, предполагаются твёрдыми: они не перекрываются друг с другом. Это различие очень существенно.

В гл. 6 показано, что в случае задачи узлов протекание по белым узлам возникает, когда доля пространства, заполненная построенными вокруг этих узлов шарами, равна примерно 0,16. Оказалось, что это число почти не зависит от типа решётки. Естественно предположить, что раз оно почти не зависит от типа решётки, то оно не должно сильно зависеть от того, есть ли вообще решётка. Если это правильно, то доля объёма, заполненного металлическими шариками, при которой по этим шарикам возникает протекание, должна примерно равняться 0,16.

Как и в гл. 6, обозначим через f коэффициент заполнения, т. е. долю объёма, занятую всеми шариками — и алюминиевыми, и пла-

стикowymi. Величина x по определению представляет отношение числа алюминиевых шариков к полному числу шариков. Поэтому доля объёма, занятая алюминиевыми шариками, равна fx . Если на пороге протекания эта доля объёма равна 0,16, то критическое значение x_c можно найти из условия $fx_c = 0,16$.

Коэффициент заполнения для системы плотно упакованных, но случайно расположенных шариков хорошо известен. Подобная система знакома человечеству с античных времён. Когда нужно было отмерить определённое количество зерна или какого-нибудь другого сыпучего товара, его насыпали в специальный сосуд (меру), трясли и уминали. В современной науке эта система служит моделью расположения атомов в аморфных металлах. Аморфные металлы или, как их ещё называют, металлические стекла — это вещества с металлической электропроводностью, но без кристаллической структуры. Оказалось, что расположение атомов в аморфном металле очень напоминает расположение плотно упакованных несжимаемых шаров. Благодаря этому, свойства плотно упакованных случайно расположенных шаров изучались с большой тщательностью (главным образом, с помощью ЭВМ). Выяснилось, что доля объёма, занимаемого шарами, равна $f = 0,637$.

Вернемся к задаче о протекании по металлическим шарам. Определив x_c по формуле $x_c = \frac{0,16}{f}$, получим $x_c = 0,25$, что совпадает с результатом трёх студентов.

Впоследствии эксперименты по определению порога протекания многократно повторялись с использованием более совершенной техники. Ставились опыты, в которых фигурировала смесь шаров разного радиуса. В этой смеси менялись в широких пре-

делах и радиусы металлических, и радиусы диэлектрических шаров. Оказалось, что в этом случае критическая доля объёма $f x_c$ приблизительно равна 0,17 и не отличается в пределах точности эксперимента от случая шаров одного радиуса.

Итак, порог протекания в задаче твёрдых сфер можно сравнительно легко оценить, считая, что критическая доля объёма, заполненная металлическими шарами, равна примерно 0,16. Заметим, что в задаче перекрывающихся сфер это число значительно больше.

Задача твёрдых сфер оказалась очень важной в прикладном отношении. Она лежит в основе теории гетерогенных материалов, представляющих собой диэлектрики с очень мелкими металлическими включениями. В настоящее время такие материалы широко изучаются. Они изготавливаются и используются как в виде тонких плёнок, так и в виде объёмных образцов. Вблизи порога протекания эти вещества обладают удивительными электрическими свойствами. Например ёмкость конденсатора, заполненного таким материалом, неограниченно растёт, если доля объёма, занятого металлом, приближается к порогу протекания. Это явление связано с аномальной взаимной ёмкостью больших металлических кластеров. Описание электрических свойств гетерогенных материалов в настоящее время превращается в самостоятельный раздел теории протекания.

Глава 10.

Уровень протекания

10.1. «Всемирный потоп»

Ходит ветер шесть дней, семь ночей,
Потопом буря покрывает землю,
При наступлении дня седьмого
Буря с потопом войну прекратили,
Успокоилось море, утих ураган — потоп прекратился,
Я открыл отдушину — свет упал на лицо мне,
Я взглянул на море — тишь настала.
И всё человечество стало глиной!
Плоской, как крыша, сделалась равнина.

Так описывает всемирный потоп шумерский миф о Гильгамеше — древнейшее литературное произведение, относящееся примерно ко второму тысячелетию до нашей эры (перевод И. Дьяконова).

Когда вода стала спадать, показались над её поверхностью самые высокие на Земле горы. Вода опускалась всё ниже и ниже, пока не достигла своего обычного уровня. Вообразите грандиозную картину: огромная горная система, например Тянь-Шань, постепенно выходит из воды. Сначала появились как острова самые

высокие вершины, потом показались зоны альпийских лугов, и, наконец, вода опустилась в предгорье.

Допустим, что нас интересует вопрос: до какого уровня должна опуститься вода, чтобы исчез последний водный путь, проходящий через всю горную систему (рис. 10.1)? Ясно, что такой путь существует, пока определенная часть перевалов не вышла из воды, а затем он исчезает.

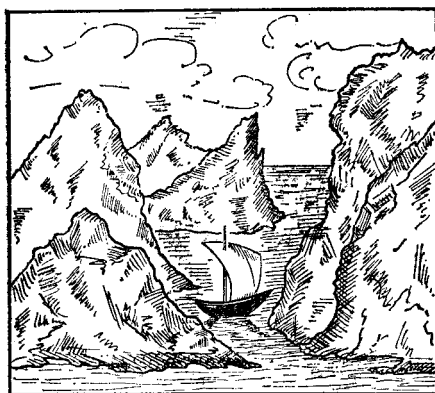


Рис. 10.1. Путешествие во время потопа.

На рис. 10.2 показана географическая карта горной системы, на которой тонкими линиями изображены горизонталы (линии одинаковой высоты). Толстыми линиями обведены горизонталы, соответствующие уровню воды. Они отделяют воду от суши. Участки, залитые водой, на рисунке заштрихованы. На рис. 10.2, а показано самое начало потопа: водные озёра ещё не сообщаются друг с другом. Затем вода поднялась выше, и на рис. 10.2, б уже возникли водные пути, пересекающие всю систему. На рис. 10.2, в из воды поднимаются лишь отдельные горные вершины.

Уровень воды, при котором появляется (или исчезает) водный путь, называется *уровнем протекания*. Задача о его определении

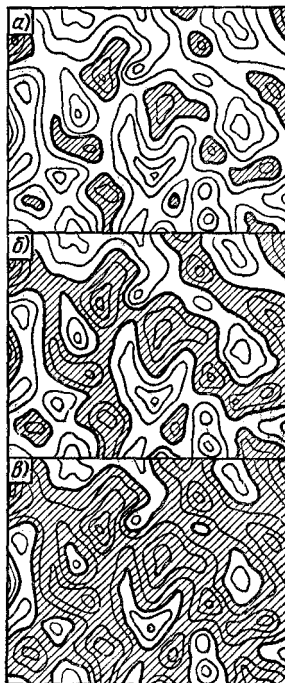


Рис. 10.2. Карта горной системы, залитой водой. Залитые области заштрихованы.

представляет собой плоскую задачу теории протекания. Она может быть сформулирована и иначе. Допустим, что плоскость хаотически раскрашена белой и чёрной краской. Пусть доля площади, раскрашенной белой краской, равна x . При малых x белые куски образуют изолированные острова, а при значениях x , близких к единице, изолированы, наоборот, чёрные куски. Нужно найти критическое значение x , при котором исчезает (или появляется) сквозной путь через всю систему, идущий только по белым областям.

Аналогичным образом можно сформулировать и объемную задачу, заполнив большой объём белым и чёрным веществом. Затем нужно менять долю объёма, заполненную одним из веществ, пока

по нему не возникнет протекание.

10.2. Построение случайной функции**

Новая задача не является решёточной. Разберем её математическую формулировку в плоском случае. Необходимо задать на всей плоскости случайную функцию $V(X, Y)$, где X и Y — координаты. В задаче о «всемирном потопе» эта функция представляет высоту над уровнем моря в точке земной поверхности с заданными координатами. Ограничимся случаем гауссовых случайных функций (названных по имени великого математика К. Гаусса).

Простейший способ построения гауссовой случайной функции состоит в том, чтобы приписать каждой точке пространства случайное число, никак не связанное с соседним случайным числом. Такая случайная функция называется «белый шум». Её значения в соседних точках резко отличаются, т. е. она является разрывной. Чтобы получить непрерывную функцию, белый шум «сглаживают». Эта процедура состоит в том, что каждой точке пространства приписывается величина, представляющая собой среднее от значений, принимаемых функцией «белый шум» в некоторой области пространства, окружающей данную точку. Эти величины и образуют непрерывную случайную функцию. При переходе к соседней точке значения функции меняются мало, поскольку мало меняется область пространства, по которой усредняется белый шум. Обозначим через r_0 размер области пространства, по которой ведется усреднение. Этот размер называют радиусом корреляции случайной функции. Главное его свойство состоит в том, что при изме-

нении аргумента функции на величину, малую по сравнению с r_0 , значение функции изменяется мало.

Можно ввести функцию распределения величин V . Обозначим её через $f(V)$. По определению вероятность того, что во взятой наугад точке пространства функция $V(X, Y)$ имеет значение, заключенное в малый интервал от V_1 до $V_1 + \Delta V$, равна $f(V_1)\Delta V$.

Функцию $V(X, Y)$ всегда можно построить так, что её среднее по всем точкам плоскости значение равно нулю. Для этого нужно при построении функции «белый шум» использовать случайные числа, симметрично распределенные относительно нуля. Можно показать, что функция $V(X, Y)$, полученная из такого «белого шума», обладает гауссовым распределением (см. гл. 2) вида

$$f(V) = \frac{1}{\delta\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{V^2}{2\delta^2}}. \quad (10.1)$$

Заметим, что плотность вероятности (10.1) симметрична относительно положительных и отрицательных значений V . На «языке гор» это означает, что пики и впадины встречаются с одинаковой вероятностью.

Теперь легко сформулировать задачу протекания. Горизонталы, изображённые на рис. 10.2, определяются условием $V(X, Y) = \text{const}$. Для того чтобы задать уровень воды, нужно ввести число t , изменяющееся в интервале от $-\infty$ до ∞ . Участки плоскости, в которых $V(X, Y) < t$, назовем белыми (залитыми водой), а участки, где $V(X, Y) > t$, — чёрными (выступающими из воды). Толстые линии на рис. 10.2 определяются условием $V(X, Y) = t$.

Уровнем протекания называется критическое значение t_c , при котором белые области образуют пути, пронизывающие всю си-

стему. Можно также говорить о критической доле пространства x_c , заполненной белыми областями в момент возникновения протекания. Эта доля пространства равна вероятности того, что непрерывная случайная величина V принимает какое-либо значение в интервале $-\infty < V < t_c$. По смыслу функции распределения

$$x_c = \int_{-\infty}^{t_c} f(V) dV. \quad (10.2)$$

Формула (10.2) связывает критическую долю пространства x_c с уровнем протекания t_c .

10.3. Аналогия с задачей узлов**

Представьте себе, что на географическую карту, показанную на рис. 10.2, нанесена плоская решётка (всё равно какая) с малым периодом. Пусть период решётки будет значительно меньше, чем характерные размеры областей суши и воды. Назовём узлы решётки, попавшие в области, залитые водой, белыми, а узлы, попавшие на сушу, — черными. Так же, как в обычной задаче узлов, будем считать белые узлы связанными, если они являются ближайшими соседями. Критическая доля площади, заполненная водой, равна критической доле белых узлов, при которой по ним возникнет протекание.

Однако новая задача не тождественна задаче узлов. Вспомним гл. 4, где подробно описано построение системы белых и черных узлов. (В этой главе назывались блокированными и неблокированными.) Важным моментом этого построения было то, что каждый

узел становился белым или чёрным по воле генератора случайных чисел и без всякой связи с тем, какой цвет имели узлы, являющиеся его ближайшими соседями. Вследствие этого белые и чёрные узлы были хорошо перемешаны друг с другом. В новой задаче это совсем не так. Поскольку период решётки очень мал, чёрные и белые узлы располагаются большими блоками. Соседом белого узла с подавляющей вероятностью является белый узел, а соседом чёрного узла — чёрный узел. (Размеры блоков определяются радиусом корреляции r_0).

Следует понимать, что введение решётки в задачу об уровне протекания является чисто формальным приёмом. По существу задача не является решёточной и её ответы не должны зависеть ни от периода решётки (если он достаточно мал), ни от типа решётки. Однако такой приём позволяет воспользоваться хорошо разработанным аппаратом решёточных задач.

В гл. 4 приведён алгоритм решения задачи узлов методом Монте-Карло на ЭВМ. Этот алгоритм полностью переносится на задачу об уровне протекания. Тем же способом, который описан в гл. 4, с помощью случайной функции $V(X, Y)$ составляется массив $K(X, Y)$, состоящий из нулей и единиц. Белым узлам соответствуют единицы, а чёрным — нули. Тем же способом осуществляется поиск путей протекания и определение критической доли пространства, при которой возникает протекание.

10.4. Уровни протекания в плоской в трёхмерной задачах**

Плоская задача имеет точное решение, если свойства случайной функции $V(X, Y)$ в среднем симметричны относительно значения $V = 0$. Такими свойствами обладают, в частности, описанные выше гауссовы функции.

Для того чтобы получить точное решение, следует воспользоваться симметричной формулировкой задачи протекания, которая была дана в гл. 5. Как и раньше, будем называть области, в которых $V(X, Y) < t$, белыми, а области, где $V(X, Y) > t$, — чёрными. Кроме уровня протекания по белым областям t_c , можно ввести уровень протекания по чёрным областям t_c . Дальнейшее доказательство разбивается на следующие пункты:

1. Из симметрии функции $V(X, Y)$ следует, что $t_c = -t'_c$. Действительно, заменим в каждой точке плоскости V на $-V$. При этом получится функция $V' = -V$, в среднем обладающая теми же свойствами, так что уровни протекания, вычисленные с её помощью, должны быть такими же, как уровни, вычисленные с помощью исходной функции. Из неравенства $V < t_c$ следует неравенство $-V > -t_c$, т. е. $V' > -t_c$. При $t = t_c$ белые с точки зрения функции V области ($V < t_c$) образуют бесконечный кластер. Эти же самые области пространства являются чёрными, если рассматривать функцию V' и $t = -t_c$. Ведь в них $V' > -t_c$. Следовательно, значение $t = -t_c$ является уровнем протекания по чёрным областям для функции V' . Но, как уже говорилось, уровни протекания у функций V и V'

должны быть одинаковыми. Следовательно, и для функции V уровнем протекания по чёрным областям является $t'_c = -t_c$.

2. Если $t_c < 0$, то по мере увеличения t сначала появляется протекание по белым областям (при $t = t_c < 0$), а затем (при $t = -t_c > 0$) исчезает протекание по чёрным областям. В области $t_c < t < -t_c$ существует протекание и по белым, и по чёрным областям. Если $t_c > 0$, то сначала исчезает протекание по чёрным областям, а затем появляется протекание по белым областям. При этом в области $-t_c < t < t_c$ нет никакого протекания.
3. В случае плоской задачи протекание по чёрным областям исключает протекание по белым областям, и наоборот. Действительно, если по горной системе можно проплыть с запада на восток на корабле, значит, по ней нельзя пройти с севера на юг посуху. Следовательно, случай $t_c < 0$ исключается. С другой стороны, отсутствие протекания по белым областям обязательно означает наличие протекания по чёрным областям с севера на юг. (В этом можно убедиться, изучая картинки типа рис. 10.2.) Таким образом, исключается и случай $t_c > 0$. Следовательно, остается одна возможность $t_c = 0$. В этом и состоит результат: уровень протекания равен нулю.

С помощью формулы (10.2) можно вычислить критическую долю площади x_c . Из условия нормировки функции распределения (см. формулу (2.1)) следует, что при $t_c = \infty$ правая часть формулы (10.2) равна единице. Из симметрии функции $f(y)$ вытекает, что при $t_c = 0$ доля площади $x_c = 0,5$.

В трёхмерном случае протекание по белым областям с запада на восток не исключает протекания по чёрным областям с севера на юг, так как каналы протекания легко могут быть развязаны. (Вспомните развязки на шоссе, которые делаются на разных уровнях высоты.) Поэтому в трёхмерном случае $t_c < 0$ и, согласно формуле (10.2), $x_c < 0,5$. Расчёт, произведенный методом Монте-Карло по указанной выше схеме для гауссовых случайных функций, показал, что в трёхмерном случае $x_c = 0,16 \pm 0,01$.

Для приближённой оценки величины x_c можно воспользоваться методом, с помощью которого в гл. 6 оценивались пороги протекания задачи узлов. Метод состоит в том, что вокруг каждого узла строятся шары (или круги в плоском случае) с радиусом, равным расстоянию до ближайшего соседа. Шар, построенный вокруг белого узла, считается белым, а построенный вокруг чёрного узла — чёрным. Оказалось, что протекание по касающимся друг друга белым шарам возникает, когда доля пространства, заполненного этими шарами, примерно одинакова для всех решёток. Естественно предположить, что эта доля должна быть близка к значению x_c , которое фигурирует в задаче об уровне протекания. Согласно формулам (6.3) и (6.4), в плоском случае доля поверхности, занятой белыми кругами, примерно равна 0,5, а в трёхмерном случае доля объёма, занятого белыми шарами, примерно равна 0,16. Таким образом, обе оценки удивительно точно совпадают с решением задачи об уровне протекания. Можно надеяться, что $x_c = 0,16$ даёт неплохую оценку и для негауссовых случайных функций.

10.5. Компенсация примесей в полупроводниках

Уровень протекания играет очень важную роль в теории полупроводников с примесями. Допустим, что в полупроводник введены примерно в одинаковом количестве и донорные, и акцепторные примеси. Донорные примеси имеют лишний электрон на внешней оболочке, а акцепторным примесям, наоборот, не хватает одного электрона. Поэтому доноры охотно отдают свои электроны акцепторам и становятся при этом положительно заряженными. Акцепторы принимают электроны и заряжаются отрицательно. (Это явление называют компенсацией примесей.) Так как примеси в полупроводниках расположены неупорядоченно, то возникает хаотическая система положительно и отрицательно расположенных зарядов. Каждый заряд создает вокруг себя электрический потенциал, равный $\pm \frac{e}{\epsilon r}$, где e — абсолютная величина заряда электрона, ϵ — диэлектрическая проницаемость, r — расстояние от заряда. Знак потенциала определяется знаком заряда.

Потенциал любой точки пространства представляет собой сумму потенциалов, создаваемых всеми примесями. Так как примеси расположены в пространстве случайно, то потенциал также представляет собой случайную функцию.

Если доноров немного больше, чем акцепторов, то часть электронов остается на донорах. Если энергия связи электронов с донорами относительно мала, то тепловое движение атомов легко отрывает эти электроны. В принципе они могут участвовать в переносе электрического тока, но этот перенос затруднен тем, что в пространстве существует электрический потенциал, создаваемый

заряженными примесями. Электрический потенциал, помноженный на заряд электрона, представляет собой потенциальную энергию взаимодействия электрона с электрическим полем примесей. Потенциальная энергия существенным образом меняет характер движения электрона.

10.6. Движение частицы при наличии потенциальной энергии

Полная энергия частицы E складывается из кинетической энергии, равной $\frac{mv^2}{2}$, где m — масса частицы, а v — скорость, и потенциальной энергии $V(\mathcal{R})$ зависящей от координат точки, в которой находится частица:

$$E = \frac{mv^2}{2} + V(\mathcal{R}), \quad (10.3)$$

Здесь \mathcal{R} — вектор, проведенный из начала координат в точку, где находится частица.

Движение частицы описывается функцией $\mathcal{W}(t)$, где t — время. Основным принцип механики состоит в том, что во время движения полная энергия частиц E не меняется. Это значит, что при изменении скорости частицы меняется таким образом, чтобы скомпенсировать изменение функции $V(\mathcal{R})$. Закон сохранения энергии, а также тот факт, что кинетическая энергия $\frac{mv^2}{2}$ должна быть величиной положительной, накладывают важные ограничения на движение частицы.

Допустим для простоты, что V зависит лишь от одной координаты (от X) и скорость тоже направлена вдоль оси X . Пусть (X)

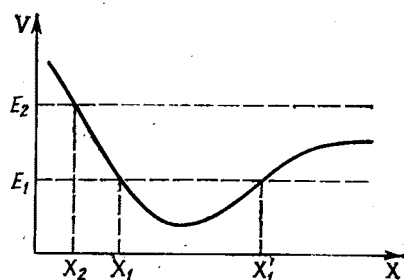


Рис. 10.3. Потенциальная энергия электрона V как функция координаты X (сплошная линия).

имеет вид, изображённый на рис. 10.3. Характер движения частицы определяется величиной её полной энергии. Если энергия равна E_1 , то кинетическая энергия положительна лишь в области $X_1 < X < X_1'$. Точки X_1 и X_1' определяют границы движения. Скорость в этих точках обращается в нуль, и потому эти точки называются *точками остановки*. Частица, имеющая энергию E_1 , захвачена *потенциальной ямой*, находящейся между точками остановки, и не может выйти из области этой ямы. Область её движения ограничена с двух сторон. Частица, имеющая энергию E_2 , не может проникнуть левее точки X_2 , зато область её движения не ограничена с правой стороны.

Таким образом, в зависимости от соотношения между полной и потенциальной энергиями движение частицы может быть ограниченным или неограниченным.

Заметим, что квантовая механика допускает проникновение частицы в область с отрицательной кинетической энергией. Однако, если функция $V(\mathcal{R})$ достаточно плавная (а именно так и обстоит дело в случае полупроводников с большой концентрацией компен-

сированных примесей) это проникновение не играет особой роли.

10.7. Движение электрона в поле примесей

Потенциальная энергия электрона, связанная с потенциалами хаотически расположенных примесей, является случайной функцией координат. Если полная энергия E электрона невелика, то он может совершать движение лишь в ограниченной области пространства, окруженной со всех сторон точками остановки. При достаточно большой энергии электрон получает возможность двигаться по всему пространству. Только в этом случае он может участвовать в переносе электрического тока.

Следует понимать различие между одномерной задачей, обсуждавшейся в предыдущем разделе, и двумерной или трёхмерной задачей. Если частица может двигаться только вдоль некоторой прямой, то для того чтобы движение было неограниченным в обоих направлениях, энергия частицы должна быть больше всех значений, которые принимает на этой прямой потенциальная энергия. Таким образом, должно выполняться жесткое условие $E > V_{\max}$, где V_{\max} — максимальное значение потенциальной энергии.

В двумерном и трёхмерном случаях это условие не требуется. Частица может *огibtать* области, в которых её движение запрещено. Нужно только, чтобы разрешенные для движения области образовывали систему «озер и каналов», по которым частица могла бы уйти в бесконечной системе на бесконечное расстояние.

Отсюда видно, что возникла задача об определении уровня протекания. Пусть $V(\mathcal{R})$ — случайная функция, представляю-

щая собой потенциальную энергию электрона. Зафиксировав полную энергию E , назовем белыми областями пространства области, в которых $E > V(\mathcal{R})$ (кинетическая энергия положительна), а чёрными — области, где $E < V(\mathcal{R})$. Нужно найти уровень протекания, т. е. критическое значение E_c , при котором возникает протекание по белым областям.

Только те электроны, которые имеют энергию, большую, чем E_c , являются свободными и принимают участие в переносе электрического тока (эту энергию иногда называют *порогом подвижности*). При низких температурах энергия E_c значительно больше, чем энергия теплового движения атомов kT . Поэтому вероятность того, что электрон приобретает энергию E_c , мала. Соответственно мала и концентрация электронов, способных переносить ток. С повышением температуры эта концентрация резко возрастает, вследствие чего возрастает и электропроводность системы. Таким образом, порог протекания E_c определяет температурную зависимость электропроводное полупроводника с компенсированными примесями.

При очень низких температурах электроны скапливаются в самых глубоких потенциальных ямах и не принимают участия в переносе тока. Поэтому при низких температурах полупроводник с компенсированными примесями превращается в диэлектрик.

Как говорилось в гл. 8, при достаточно большой концентрации примесей одного сорта (например, доноров) полупроводник приобретает металлическую проводимость, слабо зависящую от температуры вплоть до абсолютного нуля температур (переход Мотта). Компенсация примесей (например, добавление акцепторов)

приводит к росту хаотической потенциальной энергии и к срыву металлической проводимости. Существует детальная теория этого явления, основанная на представлениях об уровне протекания.