весия входит в вероятность перехода. Для достаточно низких температур ($k_BT \ll W$) она дается больцмановским фактором $\exp(-W/k_BT)$. В целом имеем, таким образом, для вероятности перескока

$$w_{ij} = w_0 \exp\left(-\frac{2R}{\lambda} - \frac{W}{k_BT}\right) \quad \text{для} \quad W > 0. \tag{3.9}$$

Фактор w_0 может быть вычислен, только когда мы сделаем дальнейшие предположения о локализованных состояниях и электрон-фононном взаимодействии. В фундаментальной работе Миллер и Абрахамс нашли (для ссылок относительно перескоков различной длины см., например, обзор Оверхофа [103.XVI]), что

$$w_{ij} = \frac{E_1^2 A_0^2 W}{\pi \rho_0 s^5 \hbar^4} \exp\left(-\frac{2R}{\lambda} - \frac{W}{k_BT}\right) \qquad (W > 0). \tag{3.10}$$

Здесь E_1 — постоянная деформационного потенциала (ч. II, § 49), ρ_0 — плотность и A_0 — обменный интеграл.

При заданной W вероятность перехода w_{ij} уменьшается с увеличением расстояния и падением температуры. Однако, поскольку W является функцией R (сопоставьте с рис. 44), w_{ij} будет иметь максимальное значение при определенном R. Ниже мы вернемся к этому.

До сих пор мы рассматривали только вероятность перескока в состояние более высокой энергии. В противоположном случае, при перескоке от E_j обратно к E_i, находят соответствующие формулы для w_{ji}, в которых опущен лишь фактор $\exp(-W/k_BT)$. Это видно проще всего из требования, что в состоянии равновесия скорости переходов в двух направлениях должны быть одинаковыми. Скорости переходов определяются как произведение вероятности перехода, вероятности заполнения начального состояния и вероятности незаполнения конечного состояния. Таким образом, в состоянии равновесия

$$\Gamma_{ij}^0 \equiv f_i(1-f_j)\, w_{ij} = f_j(1-f_i)\, w_{ji} \equiv \Gamma_{ji}^0, \tag{3.11}$$

откуда при $f_i^{-1} = 1 + \exp[(E_i - E_F)/k_BT]$ немедленно следует, что

$$w_{ji} = w_{ij} \exp\left(\frac{E_j - E_i}{k_BT}\right) = w_{ij} \exp\left(\frac{W}{k_BT}\right). \tag{3.12}$$

Равенство (3.11) может быть упрощено, если считать все энергии большими по сравнению с k_BT. Тогда вероятность заполнения $f_i = [1 + \exp(x/k_BT)]^{-1}$ есть 1 для отрицательных x и равна $\exp(-x/k_BT)$ для положительных x. Находим

$$\Gamma_{ij}^0 = \gamma_0 \exp[-2R/\lambda - \\ - (|E_i - E_F| + |E_j - E_F| + |E_i - E_j|)/2k_BT]. \tag{3.13}$$

Здесь фактор γ_0 лишь слабо зависит от W.