определением важных особенностей, требуемых для формулировки теории, объясняющей переход от упорядоченности к неупорядоченности, и дадим читателю ссылки, которые позволят ему исследовать эту область более глубоко. Обратим особое внимание на тему аморфных полупроводников, в которых разница между кристаллической и некристаллической разновидностями твердого тела видна особенно ясно.

Наиболее важными источниками по вопросу неупорядоченных твердых тел являются книги Лекомбэра и Морта [131], Митра [111f], Мотта [93], Мотта и Дэвиса [94], Тауца [99], доклады конференций [116, 119—132], обзорные статьи Адлера в [110.2] и Марча и Стоддарда в [111 с. 31]. Дополнительные ссылки даны в следующих параграфах.

§ 29. Локализованные состояния

Мы уже встречались с концепцией локализованных состояний в гл. 1 в связи с локальным описанием неискаженных решеток и в гл. 2 в связи с локализованными состояниями вблизи точечных дефектов. Однако там вообще не давалось точного определения этого понятия. Теперь попытаемся это сделать в связи с локализацией одноэлектронных состояний, которые могут иметь место при неупорядоченности.

В принципе каждое состояние является локализованным, если соответствующая ему волновая функция исчезает достаточно быстро на бесконечности, т. е. если интеграл $\int \psi^* \psi \, d\tau$ конечен. Как увидим ниже, это определение далеко нас не ведет. Начнем с одномерного примера, который быстро покажет некоторые важные аспекты проблемы. Предположим некую последовательность одномерных потенциальных барьеров, в качестве которых простоты ради выберем δ-функции:

$$V(x) = \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \Omega_i \delta(x - x_i). \qquad (3.1)$$

Сначала не делаем предположений о распределении величины x_i. Уравнение Шредингера с выбранным потенциалом имеет вид

$$\left[-\nabla^2 + \sum_i \Omega_i \delta(x - x_i) - k^2 \right] \psi(x) = 0, \quad \text{где} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \qquad (3.2)$$

Прежде всего рассмотрим отдельную δ-функцию при $x = 0$. Для $x < 0$ решением уравнения Шредингера является

$$\psi_-(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx).$$

Для $x > 0$

$$\psi_+(x) = C \exp(ikx) + D \exp(-ikx).$$