

ков, перенос происходит в основном между состояниями псевдощели. Таким образом, характеризующие перенос свойства аморфного полупроводника (при низких температурах) часто определяются скорее состояниями локальных дефектов (щелевые состояния), чем локализованными состояниями аморфной матрицы (хвостовые состояния).

Хотя плотности состояний, показанные на рис. 42 и 43, типичны в качественном отношении для упомянутых видов твердых тел, они не могут ответить на вопрос о характеристиках плотности состояний, которые определяют свойства некристаллического твердого тела. Для этого необходимы более искусные теоретические модели. Более того, методы, которые следует использовать, зависят от группы рассматриваемых веществ. Например, для сплавов применяют иные методы расчета, чем для аморфных полупроводников.

Действительная трудность при количественных расчетах заключается в необходимости упрощения теоретического подхода. Все методы довольно громоздки, поскольку упрощения, вытекающие из свойств инвариантности кристаллической решетки, теряют смысл, когда имеют дело с неупорядоченным твердым телом. Добавляется еще одна сложность. Даже если бы было возможно рассчитать одноэлектронные энергии для данной неупорядоченной конфигурации атомов, результат не был бы показательным даже для данного некристаллического твердого тела. Следует также учесть *конфигурационное среднее* по различным возможным конфигурациям.

Методы, использовавшиеся до сих пор для вычисления энергетических спектров неупорядоченных решеток, могут быть классифицированы в соответствии со степенью, с которой дальний и ближний порядки рассматриваются как нарушенные (Иоаннопулос и Козн [101.31]). Отсутствие периодического потенциала есть, безусловно, основная характерная черта каждой неупорядоченности. Это, однако, не означает, что потеря дальнего порядка является причиной определенных свойств некристаллической фазы. Более важным здесь могут быть небольшие изменения в ближнем порядке.

Простейшими методами являются те, в которых используется приближение строгого ближнего порядка, а дальний порядок отсутствует. Они будут наиболее успешными, если интересоваться не деталями состояний в псевдощели, а состояниями выше края подвижности. В аморфных полупроводниках эта область важна для объяснения оптического спектра. Поэтому наряду с плотностью состояний делается расчет мнимой части диэлектрической постоянной. В соответствии с (3.4) можно определить последнюю посредством

$$\epsilon_2(E) \sim \sum_{ij} |M_{ij}|^2 \delta(E - E_j + E_i). \quad (3.5)$$

Простейший подход при сравнении кристаллической и некристаллической модификаций вещества получается путем сохранения кристаллической зонной структуры при описании обеих модифика-