

ций, по в пренебрежении в некристаллическом случае правплами отбора по k при вычислении матричных элементов M_{ij} . В улучшенном методе, например, потеря дальнего порядка описывается корреляционными функциями, которые все еще дают определенные положения для ближайших соседей отдельного атома в случае кристалла, но для более удаленных атомов вводят некоторую неопределенность положения, отражая тем самым постепенную потерю дальнего порядка (см. Крамер [103.XII]). Такие методы позволяют очень хорошо описывать оптические спектры аморфных полупроводников. С другой стороны, плотность состояний часто воспроизводится плохо. Поскольку эти методы исходят из изменения в кристаллической зонной структуре, обусловленного потерей дальнего порядка, они не могут описывать детали на краю подвижности и не дают информации относительно локализации состояний.

Для этих случаев можно использовать только такие методы, которые делают более точные предположения об отклонениях ближнего порядка от идеала. Начинают, в общем, с расчета собственных значений энергии для кластера, который состоит из атомов, упорядоченных определенным образом, а затем производят усреднение по возможным конфигурациям нарушенного ближнего порядка. При этом имеются две главные трудности. Во-первых, для получения приемлемых результатов кластер должен быть достаточно большим, т. е. длина локализации состояний должна быть меньше диаметра кластера для того, чтобы ее можно было вычислить. С другой стороны, кластер должен быть достаточно малым, чтобы допускать численные расчеты. Во-вторых, трудно определить корректные граничные условия на поверхности кластера. Простейшим случаем является перпендикулярное продолжение кластера. Тогда аморфное твердое тело приближенно аппроксимируется периодической решеткой с экстремально большим числом базисных атомов в ячейке Вигнера — Зейтца. При другом подходе потенциал во внешнем пространстве полагается равным нулю или равным среднему потенциалу кластера. Наконец, кластер может быть продолжен во внешнюю область упрощенной решеткой (решетка Бете).

Для сплавов оказались успешными совсем другие методы. Упомянем здесь только два простых приближения, касающихся композиционной неупорядоченности. Первое — это модель жесткой зоны, уже обсуждавшаяся в ч. I, § 41 (ч. I, рис. 54). В ней предполагается заданной не только зонная структура и, следовательно, плотность состояний для различных переходных металлов, но также и для получаемых из них сплавов. Вторая возможность состоит в использовании среднего потенциала $V = xV^A + (1-x)V^B$ для бинарного сплава A_xB_{1-x} . Оба метода ведут к определенной зонной структуре и, таким образом, не принимают в расчет статистическую неупорядоченность. Несмотря на это, они часто успешно применяются. Более подробные теории сплавов, как и других неупорядоченных фаз, в каждом случае используют теорию многократного рас-