

УДК 539.2

©1994

## К ВОПРОСУ О СХОДИМОСТИ И ПАРНЫХ ПОПРАВКАХ К КОГЕРЕНТНОМУ ПОТЕНЦИАЛУ

*М.А.Иванов, Ю.В.Скрипник*

Предложен один из возможных вариантов нахождения парных поправок к когерентному потенциалу, учитывающий вклад от пар примесных центров, расположенных на произвольных расстояниях. На основании исследования сходимости ряда кластерного разложения получен и проанализирован критерий применимости приближения когерентного потенциала. Исследованы различные типы перестройки электронного спектра кристалла с примесями, описываемыми в рамках одноузельного приближения.

При исследовании свойств неупорядоченных систем наиболее широко используется метод когерентного потенциала [1-3]. В качестве приближения к собственной энергии в данном методе выбирается эффективный комплексный потенциал, вычисляемый самосогласованным образом, что соответствует суммированию всех одноузельных диаграмм, входящих в разложение собственной энергии [4,5].

Несмотря на множество очевидных достоинств, приближение когерентного потенциала, как показывает анализ, не описывает целый ряд областей спектра, в частности окрестности краев зон, всю область вне непрерывного спектра и примесную зону при малой концентрации примесей [6,7].

В связи с этим предпринимались различные попытки выхода за рамки приближения когерентного потенциала, в которых учитывалось рассеяние на парах примесных центров. К сожалению, оказалось, что функция Грина в приближении, построенном по принципу когерентного потенциала и включающем в себя все одноузельные и двухузельные диаграммы [8], теряет свои аналитические свойства [9]. А приближения молекулярного когерентного потенциала [10] и блуждающего кластера [11], сохраняющие аналитические свойства функции Грина, не содержат в себе всех возможных пар примесных центров и учитывают только пары ближайших соседей.

Изучение неупорядоченных систем при малых концентрациях примесных центров показало [12,13], что на различных участках спектра необходимо применять различные представления одночастичной функции Грина (перенормированные и неперенормированные) в зависимости от характера собственных состояний неупорядоченной системы. Исследование рядов, получающихся в результате разложений по группам взаимодействующих примесных центров, дает возможность судить о степени адекватности используемых представлений. Блохов-

ские функции не являются собственными для рассматриваемых систем, но тем не менее состояния можно приближенно описывать волновым вектором, если затухание мало на расстояниях порядка длины волны. При этом было показано, что в тех интервалах энергий, где состояния неупорядоченной системы можно приближенно характеризовать волновым вектором, наиболее подходящим оказывается перенормированное представление, в котором первое слагаемое для собственной энергии совпадает с величиной, полученной в приближении когерентного потенциала. Из анализа перенормированного представления следует, что как для определения областей его расходимости, так и для нахождения ближайших к краю спектра «хвостов» в плотности состояний необходимо в парном слагаемом учитывать вклад от всевозможных пар примесных центров, расположенных на произвольных расстояниях. Подобное справедливо и для примесных кластеров более высокого порядка.

Вопрос же об областях применимости как самого приближения когерентного потенциала, так и его парных модификаций остается в достаточной степени открытым. Представляет поэтому интерес объединить преимущества приближения когерентного потенциала и метода групповых разложений, в рамках которого можно последовательно учитывать рассеяние на парах примесей (а также кластерах из большего числа примесей). В данной работе, с одной стороны, предложен один из вариантов учета парных поправок к когерентному потенциалу. С другой стороны, предлагается метод оценки области применимости приближения когерентного потенциала как внутри области непрерывного спектра, так и вне нее. Полученный критерий сходимости групповых рядов согласуется с критерием применимости приближения когерентного потенциала, предложенным Дюкастелли [14,15], однако при этом вводится явно расходящаяся на краю зоны функция, что позволяет понять физическую природу неприменимости когерентного потенциала вблизи края зоны, а также записать критерий в несколько более удобной для расчетов форме.

Рассмотрим частично упорядоченный сплав, подрешетки которого будем нумеровать индексом  $\alpha$ , а компоненты — индексом  $\kappa$ . В модели диагонального беспорядка гамильтониан электронной подсистемы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \hat{V} = \sum_{l\alpha\kappa} c_{l\alpha\kappa} v_{\kappa}^{\alpha} a_{\alpha\kappa}^{+} a_{l\alpha\kappa}, \quad (1)$$

где  $\hat{H}_0$  — исходный трансляционно-инвариантный гамильтониан;  $l$  — индекс, нумерующий ячейки;  $c_{l\alpha\kappa}$  — числа заполнения ( $c_{l\alpha\kappa} = 1$ , если узел  $\alpha$  в ячейке  $l$  занят атомом сорта  $\kappa$ );  $v_{\kappa}^{\alpha}$  — изменение потенциала электрона, связанное с заполнением;  $a_{l\alpha\kappa}^{+}$ ,  $a_{l\alpha\kappa}$  — фермиевские операторы. В (1) предполагается, что интегралы перекрытия электронных волновых функций при различных заполнениях узлов не изменяются.

Одночастичную функцию Грина неидеального кристалла можно, как обычно, записать в виде

$$\hat{G} = \hat{g} + \hat{g} \sum \hat{G}, \quad \hat{G} = (\varepsilon - \hat{H})^{-1}, \quad \hat{g} = (\varepsilon - \hat{H}_0)^{-1}, \quad (2)$$

где  $\hat{g}$  — функция Грина идеального кристалла,  $\hat{\Sigma}$  — поляризационный оператор. В (2) операторы  $\hat{G}$ ,  $\hat{g}$ ,  $\hat{\Sigma}$  определены в узельном пространстве  $l\alpha$ .

Перейдем от узельного представления к представлению волновых векторов  $\mathbf{k}$  виртуальной решетки частично упорядоченного сплава.<sup>1</sup> Известно, что диагональные по волновым векторам одночастичные функции Грина  $G(\mathbf{k})$  при этом оказываются самоусредняющимися [12]. После усреднения по случайным распределениям атомов для таких функций получим

$$\begin{aligned}\hat{G}(\mathbf{k}) &= \hat{g}(\mathbf{k}) + \hat{g}(\mathbf{k})\hat{\Sigma}(\mathbf{k})\hat{G}(\mathbf{k}), \\ \hat{G}^{-1}(\mathbf{k}) &= \hat{g}^{-1}(\mathbf{k}) - \hat{\Sigma}(\mathbf{k}), \\ D_{ll_1}^{\alpha\alpha_1} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G^{\alpha\alpha_1}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_{l_1})}.\end{aligned}\quad (3)$$

Здесь  $\hat{G}(\mathbf{k})$ ,  $\hat{g}(\mathbf{k})$ ,  $\hat{\Sigma}(\mathbf{k})$  — операторы, действующие в пространстве подрешеток  $\alpha$ ;  $N$  — число ячеек;  $\mathbf{r}$  — радиус-векторы ячеек решетки.

В качестве первого шага при нахождении собственной энергии  $\hat{\Sigma}(\mathbf{k})$  выберем эффективную среду, описываемую методом когерентного потенциала с диагональной матрицей  $\hat{\sigma}$ , определяемой уравнением

$$\langle t^\alpha \rangle = \sum_{\kappa} c_{\kappa}^{\alpha} \tau_{\kappa}^{\alpha} = 0, \quad (4)$$

$$\tau_{\kappa}^{\alpha} = \frac{v_{\kappa}^{\alpha} - \sigma^{\alpha\alpha}}{1 - (v_{\kappa}^{\alpha} - \sigma^{\alpha\alpha})G_{00}^{\alpha\alpha}},$$

$$\sigma^{\alpha\alpha_1} = 0 \quad \text{при} \quad \alpha \neq \alpha_1,$$

где  $c_{\kappa}^{\alpha}$  — концентрация атомов сорта  $\kappa$  на узле  $\alpha$  ( $\sum_{\kappa} c_{\kappa}^{\alpha} = 1$ ).

Вклад в поляризационный оператор за счет рассеяния на парах примесей запишем, учитывая затравочные двухузельные диаграммы. Тогда

$$\hat{\Sigma}(\mathbf{k}) = \hat{\sigma} + \hat{\sigma}_2(\mathbf{k}), \quad (5)$$

где

$$\sigma_2^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) = \delta^{\alpha\alpha'} \sum_{\substack{l, \alpha'', \kappa, \kappa' \\ l\alpha'' \neq 0\alpha}} c_{\kappa}^{\alpha} c_{\kappa'}^{\alpha''} \frac{(\tau_{\kappa}^{\alpha})^3 (\tau_{\kappa'}^{\alpha''})^2 (G_{0l}^{\alpha\alpha''})^2 (G_{l0}^{\alpha''\alpha})^2}{1 - \tau_{\kappa}^{\alpha} \tau_{\kappa'}^{\alpha''} G_{0l}^{\alpha\alpha''} G_{l0}^{\alpha''\alpha}} +$$

<sup>1</sup> Отметим, что для неидеального кристалла модулированные плоские волны не являются собственными функциями, но представляют лишь полный набор функций (один из возможных), по которым проводится разложение.

$$+ \sum_{\substack{l, \alpha, \alpha' \\ l\alpha' \neq 0\alpha}} c_{\alpha}^{\alpha} c_{\alpha'}^{\alpha'} \frac{(\tau_{\alpha}^{\alpha})^2 (\tau_{\alpha'}^{\alpha'})^2 (G_{0l}^{\alpha\alpha'})^2 (G_{l0}^{\alpha'\alpha})^2 \epsilon^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{0l}}}{1 - \tau_{\alpha}^{\alpha} \tau_{\alpha'}^{\alpha'} G_{0l}^{\alpha\alpha'} G_{l0}^{\alpha'\alpha}}. \quad (6)$$

При записи (6) предполагалось, что нет корреляции в распределении атомов, т.е.

$$\langle c_{l\alpha\alpha} c_{l_1\alpha_1\alpha_1} \rangle = c_{\alpha}^{\alpha} c_{\alpha_1}^{\alpha_1} \quad \text{при } l\alpha \neq l_1\alpha_1.$$

Как видно из (6), здесь учтены пары, расположенные на произвольных расстояниях. Аналогично можно выписать вклады от троек и больших групп примесных центров.

Структура выражения (6) для двухатомного сплава и решетки с одним узлом в ячейке в основном совпадает с полученной в работе [8]. Оно становится строгим, когда на каждой из подрешеток имеется основная компонента, а концентрация других компонент мала. При этом для простейшего указанного выше случая (6) переходит в групповое разложение, полученное в [12,16,17], которое позволило описать размытие края зоны и плотность состояний, связанную с парными уровнями в «запрещенной» зоне. Можно полагать, что, несмотря на относительную простоту, выражение (6) достаточно хорошо описывает основные особенности, связанные с учетом парных слагаемых, и при произвольных концентрациях компонент является в общем случае интерполяционной формулой.

Решение самосогласованной системы уравнений (3)–(6) — достаточно сложная задача, однако представляется достаточным подставлять в (6) функции  $g_{0l}^{\alpha\alpha'}$ , полученные в приближении когерентного потенциала. Отметим, что выражение (6) не содержит никаких нефизических особенностей. В частности, полюсы выражения  $\sigma_2^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k})$  вне разрешенной в когерентном потенциале области описывают вклады от парных уровней. Для описания соответствующей плотности состояний вместо сгущающегося к каждому уровню частоты из уровней, отвечающих тройкам и т.д. (см. [18]), удобно вводить, как в [16,17], сглаженную плотность состояний.

Перейдем теперь к исследованию сходимости рассматриваемых разложений. При этом для простоты будем считать, что заполнение всех узлов одинаково (один узел в ячейке).

Сравнивая между собой члены ряда для  $\hat{\Sigma}(\mathbf{k})$  в (5), нетрудно показать, что по порядку величины отношение каждого последующего члена ряда к предыдущему, начиная со второго, определяется одним и тем же параметром

$$D = \langle t^2 \rangle \sum_{l \neq 0} G_{0l}^2, \\ \langle t^2 \rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \tau_{\alpha}^2, \quad (7)$$

где  $\langle t^2 \rangle$  — средний квадрат одноузельной  $t$  матрицы. Таким образом, в области, где  $|D| \ll 1$ , полученный ряд для собственной энергии  $\hat{\Sigma}(\mathbf{k})$  можно по крайней мере рассматривать в качестве асимптотического по

малому параметру  $|D|$ . В этой области, как это обычно имеет место для асимптотических рядов, для описания физических величин достаточно учесть несколько первых членов ряда.<sup>2</sup>

Из приведенного выше следует, что условие

$$|D| \ll 1 \quad (7')$$

можно рассматривать в качестве критерия применимости метода когерентного потенциала. При этом, как будет показано ниже, в тех случаях, когда это возможно, т.е. на границах зон, критерий (7') совпадает с критерием Иоффе-Регеля-Мотта, что придает ему наглядный физический смысл.

В областях асимптотической сходимости ряда (5) при вычислении величины  $D$  достаточно ограничиться выражениями для  $\langle t^2 \rangle$  и  $G_{0l}$ , полученными в методе когерентного потенциала. В этом случае

$$D = D_0 = \langle t^2 \rangle \left( -\frac{dG_0}{d(\varepsilon - \sigma)} - G_0^2 \right), \quad G_0 = G_{00}. \quad (8)$$

Условие  $|D_0| \ll 1$  совпадает с критерием применимости приближения когерентного потенциала, предложенным Люкастелли [15], и отличается от критерия, полученного в [7]. Выражение для  $D_0$  содержит производную  $dG_0/d(\varepsilon - \sigma)$ , которую не всегда удобно находить при численных расчетах. Более естественным было бы выразить  $D_0$  через производную  $dG_0/d\varepsilon$ .

Дифференцируя уравнение когерентного потенциала (4) по энергии, получим

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = \frac{\langle t^2 \rangle}{1 - \langle t^2 \rangle G_0^2} \frac{dG_0}{d\varepsilon}. \quad (9)$$

Используя (9) и очевидное тождество

$$\frac{dG_0}{d(\varepsilon - \sigma)} = \frac{dG_0}{d\varepsilon} \left( 1 - \frac{d\sigma}{d\varepsilon} \right), \quad (10)$$

нетрудно преобразовать выражение (8) для  $D_0$  к следующему виду:

$$D_0 = \frac{B}{1 + B}, \quad (11)$$

где

$$B = -\frac{\langle t^2 \rangle}{1 + \langle t^2 \rangle G_0^2} \left( \frac{dG_0/d\varepsilon}{1 + \langle t^2 \rangle G_0^2} + G_0^2 \right). \quad (12)$$

В приближении когерентного потенциала производная  $dG_0/d\varepsilon$  расходится на границах  $\varepsilon_{\text{гп}}$  разрешенной зоны (для трехмерной системы

<sup>2</sup> В настоящее время строгое доказательство абсолютной сходимости ряда для  $\sum \langle k \rangle$  по параметру  $|D|$  отсутствует, хотя определенные соображения указывают на возможность такой сходимости. Однако для использования этого ряда в асимптотическом смысле даже отсутствие абсолютной сходимости является допустимым.

в окрестности границ  $dG_0/d\varepsilon \sim (\varepsilon_{\text{гр}})^{-1/2}$ , являясь действительной величиной вне зоны и мнимой внутри зоны). Таким образом, поскольку величина  $B$  неограниченно возрастает при  $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_{\text{гр}}$ , из (11), (12) сразу видно, что  $D_0 = 1$  на границе зоны (результат, впервые полученный из других соображений в [14]).

Неограниченный рост величины  $B$  в окрестности  $\varepsilon_{\text{гр}}$  указывает на расходимость разложения (5) в этой области. Физическим критерием асимптотической сходимости этого ряда должно быть по меньшей мере выполнение условия

$$|B| < 1. \quad (13)$$

Если же использовать для определения сходимости ряда (5) величину  $D_0$ , то из (13) следует, что вне зоны, где  $B$  — величина действительная и положительная, должно выполняться условие

$$|D_0| < \frac{1}{2}, \quad (14)$$

а внутри зоны, где  $B$  — комплексная величина,

$$|D_0| < \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (14')$$

В общем случае, когда характер состояний неизвестен, естественно использовать для определения ширины области расходимости ряда (5) несколько более «жесткий» критерий (14).

Рассмотрим более подробно поведение критериев сходимости (13) и (14) ряда (5) на простейшем примере бинарного сплава замещения, когда

$$c_1 = c, \quad v_1 = v, \quad c_2 = (1 - c), \quad v_2 = 0,$$

а затравочная функция Грина соответствует полукруговой плотности состояний (ширина зоны исходного кристалла выбрана равной 2)

$$g(\varepsilon) = 2 \left( \varepsilon - \sqrt{\varepsilon^2 - 1} \right). \quad (15)$$

На рис. 1, а показана полученная численно с помощью условия (14) зависимость от концентрации ширины  $\Delta$  области расходимости ряда

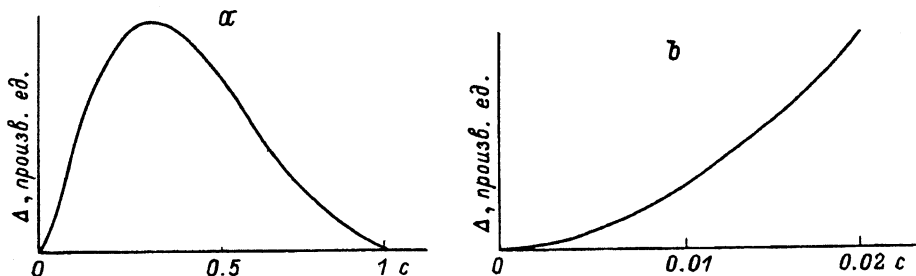


Рис. 1. Зависимость величины концентрационного размытия  $\Delta$  верхнего края зоны бинарного сплава от концентрации  $c$  примесных центров ( $v = 0.2$ ).

$0 \leq c \leq 1$  (а),  $c \ll 1$  (б).

(5) вблизи верхнего края зоны при возмущении  $v = 0.2$  (концентрационное размытие края зоны). Выбранная величина возмущения меньше критической величины  $v_c = 0.5$ , т.е. примесный локальный уровень при  $c \ll 1$  не возникает. Зависимость  $\Delta$  от  $c$  в случае малых концентраций более подробно показана на рис. 1, б. Как следовало ожидать [16,17], ширина области расходимости при малых  $c$  оказывается пропорциональной  $c^2$ .

Полученные численные результаты хорошо согласуются с аналитическими. Действительно, когда один из параметров задачи ( $|v|$  или  $c$ ) мал, величина  $B$  вблизи края зоны принимает вид

$$B = \frac{\delta^{1/2}}{(\varepsilon - \varepsilon_{\text{гп}})^{1/2}},$$

$$\delta = \begin{cases} 2c^2 v^4, & \tilde{v} = \frac{v}{1-2v} \quad \text{при } c \ll 1, \\ 2c^2(1-c)^2 v^4 & \text{при } |v| \ll 1. \end{cases} \quad (16)$$

В результате из условия (13) следует, что ширина области расходимости оказывается равной

$$\Delta' = 2\delta. \quad (17)$$

Если же использовать критерий (14), то получим большее значение

$$\Delta = 4\delta. \quad (18)$$

Условие  $|D_0| \ll 1$  согласуется с критерием Иоффе-Регеля-Мотта [19] малости затухания на длине волны

$$kl \gg 1. \quad (19)$$

В приближении когерентного потенциала

$$l^{-1} = \text{Im } \delta / \left[ \left| \frac{\partial \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k})}{\mathbf{k}} \right| \left( 1 - \frac{d \text{Re } \sigma}{d\sigma} \right) \right], \quad (20)$$

где  $\partial \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) / \partial \mathbf{k}$  — групповая скорость состояний с данным  $\mathbf{k}$ , а  $\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k})$  является решением дисперсионного уравнения

$$\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}) - \text{Re } \sigma(\varepsilon(\mathbf{k})) = 0 \quad (21)$$

( $\varepsilon(\mathbf{k})$  — исходный закон дисперсии).

Отсюда

$$l^{-1} = \text{Im } \sigma / |\partial \varepsilon(\mathbf{k}) / \partial(\mathbf{k})|. \quad (22)$$

При квадратичном законе дисперсии величина  $kl$  принимает вид

$$(kl)^{-1} = \frac{\text{Im } \sigma}{2(\varepsilon - \text{Re } \sigma)}. \quad (23)$$

При этом вдали от края зоны, где  $|\varepsilon - \varepsilon_{\text{гп}}| \gg \delta$  и  $|B| \ll 1$ , выражение (23) преобразуется к виду  $(kl)^{-1} \approx B$ , так что условие  $|B| \ll 1$  или  $|D_{\text{гп}}| \ll 1$  совпадает с критерием (19).

Отношение мнимой части волнового вектора  $k''$  к действительной части  $k'$  для состояний с заданным значением энергии в области применимости приближения когерентного потенциала при малости одного из параметров, характеризующих неупорядоченную систему, можно представить в виде

$$\frac{k''}{k'} = \sqrt{Q^2 + 1} - Q, \quad Q = \frac{\varepsilon - \text{Re } \sigma}{\text{Im } \sigma}. \quad (24)$$

Условие  $|B| = 1$  отвечает  $Q = 0$ . Таким образом, при выполнении условия  $|B| = 1$  мнимая и действительная части волнового вектора совпадают. В этом смысле критерий (13) можно рассматривать как определенную численную оценку области, где происходит переход от токовых состояний к локализованным.

Представляет интерес сравнить величину  $\Delta$  с шириной спектральной функции  $S$ , отвечающей волновому вектору  $k = 0$ . При  $c \ll 1$  или  $|v| \ll 1$  величина  $S$  в рамках приближения когерентного потенциала описывается вблизи края зоны универсальной однопараметрической функцией

$$S = \frac{1}{\pi} \text{Im}(\varepsilon - \sigma)^{-1} = \frac{1}{\delta} f(z),$$

$$f(z) = \frac{2}{\pi} \frac{\sqrt{z}}{(z+1)^2}, \quad z = \frac{\varepsilon_{\text{гп}} - \varepsilon}{\delta},$$

$$\varepsilon < \varepsilon_{\text{гп}}, \quad \frac{\varepsilon_{\text{гп}} - 1}{\varepsilon_{\text{гп}}} \ll 1, \quad \int_0^{\infty} f(z) dz = 1, \quad (25)$$

где  $\varepsilon_{\text{гп}} - 1$  — сдвиг края зоны

$$\varepsilon_{\text{гп}} - 1 = cv - \delta. \quad (26)$$

Функция  $f(z)$  показана на рис. 2. Она медленно спадает внутрь зоны и круто обрывается вблизи границы (в ней не учитываются хвосты, связанные с вкладом от флуктуационных скопления атомов).

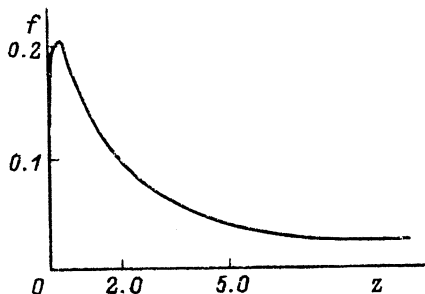


Рис. 2. Универсальная функция  $f(z)$ .



Ширина распределения  $S$  на половине высоты  $\Gamma_0 \approx 1.8\delta$  и имеет тот же порядок (но численно несколько меньше, чем ширины расходимости ряда (5)  $\Delta$  либо  $\Delta'$ ).

Нетрудно заметить, что зависимость от концентрации величины  $\Gamma_0$  и нелинейной по концентрации части сдвига края зоны  $\delta$  имеет тот же характер, что и для величины  $\Delta$  на рис. 1. Концентрационная зависимость  $\delta$  качественно совпадает с экспериментальными результатами, приведенными в [20] для твердых растворов  $\text{CdS}_{1-x}\text{Se}_x$  и  $\text{ZnSe}_{1-x}\text{Te}_x$ . Следует также отметить, что ширина линии экситонного поглощения в твердых растворах  $\Gamma_0$ , полученная в [21] путем интерполяционной сшивки длинноволнового и коротковолнового хвостов, в обозначениях настоящей работы может быть представлена в виде

$$\Gamma_0 = 8\pi^2 \frac{14}{178} \delta \approx 6.2\delta,$$

что превосходит не только  $\Gamma_0$ , но и величину концентрационного замытия края зоны  $\Delta$ .

Рассмотрим теперь возмущение больше критического значения  $v_c = 0.5$ . В этом случае, как известно, при малых концентрациях возникает примесный локальный уровень [18]. Метод когерентного потенциала всегда приводит к возникновению конечной, достаточно широкой зоны вблизи примесного уровня, которая при определенных условиях может сливаться с основной зоной. В рамках [16,17] было показано, что при увеличении концентрации примесей (для случая, когда примесный уровень расположен достаточно близко к краю зоны), вообще говоря, возможны два основных типа перестройки спектра — когерентный и некогерентный. При когерентной перестройке, начиная с некоторых концентраций, возникает новая, отщепленная от основной, примесная зона, где состояния приблизительно описываются волновым вектором. При некогерентной перестройке примесный уровень с увеличением концентрации сливается с основной зоной. В рассматриваемой здесь модели должен иметь место один тип перестройки — некогерентный.

На рис. 3 показаны плотность состояний и параметр  $|D_0|$  для случая  $v = 0.7$ , когда имеет место некогерентная перестройка спектра. При малых концентрациях ( $c = 0.005$ ), как видно из рис. 3,а, в приближении когерентного потенциала вблизи примесного уровня возникает примесная зона, отщепленная от основной, однако параметр  $|D_0|$  в этой зоне настолько велик ( $|D_0| > 0.5$ ), что рассматриваемое приближение в данной области не применимо. (Однако область может быть описана при помощи неперенормированного представления [16] с учетом того, что состояния в ней локализованы на группах из двух и большего числа атомов).

При увеличении концентрации примесей (рис. 3,б,с) ширина области неприменимости когерентного потенциала, где  $|D_0| > 0.5$ , сначала растет с увеличением концентрации примесей, а затем начинает уменьшаться, что свидетельствует о слиянии примесной и основной зон.

Случай более высокого значения возмущения  $v = 1.8$  показан на рис. 4. При малой концентрации  $c = 0.1$  (рис. 4,а), как и на рис. 3,а, когерентный потенциал не описывает состояния вблизи примесного уровня, однако при увеличении концентрации примесей (рис. 4,б) возникает

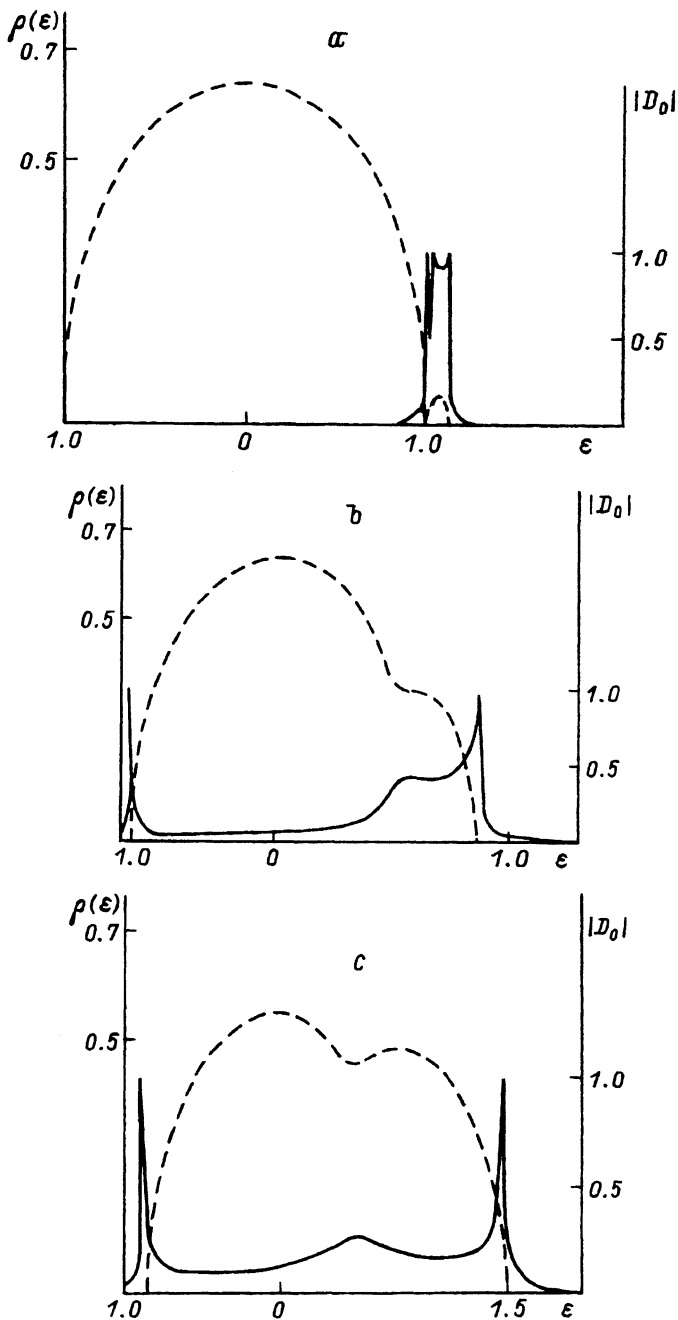


Рис. 3. Плотность состояний  $\rho(\epsilon) = \frac{1}{\pi N} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k})$  для бинарного сплава с затравочной функцией Грина вида [15] (штриховая линия) и параметр  $|D_0|$  (сплошная линия) при некогерентной перестройке спектра ( $\nu = 0.7$ ).

$c = 0.005$ (a),  $0.15$  (b),  $0.4$  (c).

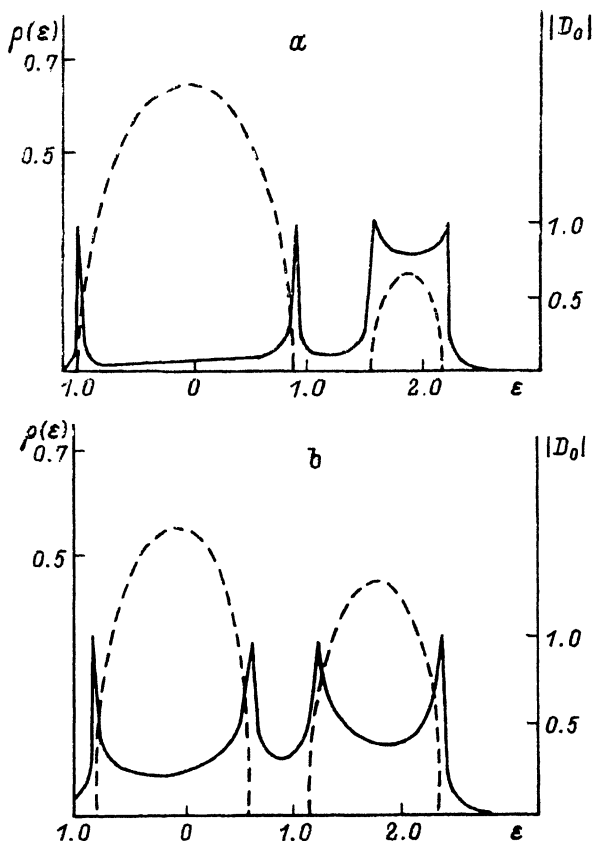


Рис. 4. Плотность состояний бинарного сплава (штриховая линия) и параметр  $|D_0|$  (сплошная линия) при когерентной перестройке спектра ( $v = 1.8$ ).  $c = 0.1$  (a),  $0.4$  (b).

отщепленная примесная зона, внутри которой (но не на краях) параметр  $|D_0|$  принимает значения, меньшие 0.5. Это свидетельствует о когерентной перестройке спектра при больших значениях  $v$ , когда возникает отщепленная зона, где состояния характеризуются при помощи волнового вектора.

#### Список литературы

- [1] Taylor P.V. // Phys. Rev. 1967. V. 156. N 3. P. 1017-1029.
- [2] Soven P. // Phys. Rev. 1967. V. 156. N 3. P. 809-813.
- [3] Yonezawa F. // Prog. Theor. Phys. 1968. V. 40. N 4. P. 734-757.
- [4] Leath P.L. // Phys. Rev. 1968. V. 171. N 3. P. 725-727.
- [5] Elliott R.J., Krumhansl J.A., Leath P.L. // Rev. Mod. Phys. 1974. V. 46. N 3. P. 465-543.
- [6] Alben R., Blume M., Krakauer N., Schwartz L. // Phys. Rev. 1975. V. 12. N 10. P. 4090-4094.
- [7] Ведяев А.В. // ТМФ. 1977. Т. 31. № 3. С. 392-404.
- [8] Nickel B.G., Krumhansl J.A. // Phys. Rev. 1971. V. 4. N 12. P. 4354-4363.
- [9] Nickel B.G., Butler W.H. // Phys. Rev. Lett. 1973. V. 30. N 9. P. 373-377.
- [10] Tsukada M. // J. Phys. Soc. Jpn. 1972. V. 32. N 6. P. 1475-1485.
- [11] Mills R., Ratanavararaks P. // Phys. Rev. 1987. V. 18. N 10. P. 5291-5308.

- [12] Иванов М.А. // ФТТ. 1970. Т. 12. № 7. С. 1895-1905.  
[13] Ivanov M.A., Loktev V.M., Pogorelov Yu.G. // Phys. Rep. 1987. V. 153. N 485. P. 209-330.  
[14] Ducastelle F. // J. Phys. C. 1974. V. 7. N 10. P. 1795-1816.  
[15] Ducastelle F., Gautier F. // J. Phys. F. 1976. V. 6. N 11. P. 2039-2062.  
[16] Иванов М.А., Погорелов Ю.Г. // ЖЭТФ. 1977. Т. 72. № 6. С. 2198-2209.  
[17] Иванов М.А., Погорелов Ю.Г. // ЖЭТФ. 1979. Т. 76. № 3. С. 1010-1022.  
[18] Лифшиц И.М. // УФН. 1964. Т. 83. № 4. С. 617-663.  
[19] Мотт Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах М.: Мир, 1982. 664 с.  
[20] Pernoogorov S., Reznitsky A. // J. Lumin. 1992. V. 52. P 201-223.  
[21] Аблязов Н.Н., Райх М.Э., Эфрос А.Л. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 2. С. 353-358.

Институт металлофизики АН Украины  
Киев

Поступило в Редакцию  
13 февраля 1992 г.  
В окончательной редакции  
28 июня 1993 г.