

УДК 539.2

ФЛУКТУАЦИИ ЛОКАЛЬНЫХ АТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ В АМОΡФНЫХ ВЕЩЕСТВАХ

Г. А. Дядина, В. Г. Карпов, В. Н. Соловьев, В. А. Хрисанов

Произведено исследование флуктуаций локальных атомных потенциалов в некристаллическом веществе. Основу исследования составляет моделирование случайной структуры α -SiO₂ и α -Si на ЭВМ. Моделирование осуществлялось методом молекулярной динамики. В ансамбле $5 \cdot 10^3$ построенных локальных конфигураций рассчитаны параметры атомных потенциалов. Показано, что значительные флуктуации этих параметров обеспечиваются типичными флуктуациями микроскопической структуры. В частности, имеет место широкое распределение констант упругости и кубического ангармонизма для отдельных атомов. Продемонстрировано существование мягких локальных атомных потенциалов, которые являются эффективно одномерными и могут быть как одноячменными, так и двухъячменными. Даны эмпирические формулы, описывающие вероятностные распределения случайных параметров мягких потенциалов. На основе полученных результатов оценена плотность состояний двухуровневых систем, возникающих в двухъячменных потенциалах.

Специфика многих свойств аморфных систем определяется структурой их локальных атомных потенциалов. Известный пример такого рода представляют свойства, обусловленные существованием двухъячменных атомных потенциалов и возникающих в таких потенциалах двухуровневых систем [1-4]. Высказывались соображения о том, что необычная структура атомных потенциалов обуславливает также термодинамические свойства аморфных систем при не слишком низких температурах $T \leq 100$ К, особенности комбинационного рассеяния света и неупругого рассеяния нейтронов [5, 6]. Сильный поляронный эффект, предполагаемый для стеклообразных полупроводников [7], может также быть обусловлен спецификой атомных потенциалов, приводящей к локальному смягчению решетки [8].

Хотя приведенные примеры достаточно известны, вопрос о специфике атомных потенциалов до настоящего времени практически не исследовался. Требуемое исследование не удается осуществить аналитически, так что моделирование на ЭВМ представляется здесь единственно приемлемым методом [9]. К настоящему времени проведено уже немало расчетов неупорядоченных атомных структур на ЭВМ, однако нам неизвестны попытки получения в этих расчетах информации о свойствах локальных атомных потенциалов. Отчасти это может объясняться недостаточно конкретной постановкой вопроса, оставляющей неясным, какие именно особенности локальных атомных потенциалов в аморфных системах подлежат выяснению.

В недавних работах [4-6, 8, 10, 11] была сформулирована точка зрения, согласно которой в аморфных системах исключительно важную роль играют флуктуации параметров локальных атомных потенциалов. Некоторым из этих флуктуаций отвечают аномально малые локальные квазиупругие константы $k \ll k_0$, где k_0 — характерное среднее значение, близкое к обычным значениям в кристаллах. Мягкие ($k \ll k_0$) атомные потенциалы являются существенно ангармоническими и при соответствующих соотношениях между параметрами могут быть одноячменными или

двухъямными. Важная роль мягких потенциалов обусловлена, во-первых, спецификой спектра их низкоэнергетических возбуждений и, во-вторых, аномально высокой обобщенной восприимчивостью, которая проявляется в сильном взаимодействии с фононами и электронами. Концепция мягких атомных потенциалов продемонстрировала ряд важных следствий [4-6, 8, 10, 11], к которым могут приводить флуктуации локальных атомных потенциалов.

Исследование флуктуаций параметров локальных атомных потенциалов в аморфных материалах является основной целью настоящей работы. В основном будет рассмотрено диэлектрическое стекло α -SiO₂. Однако мы приведем также результаты, касающиеся аморфного кремния α -Si. Выбор объектов определялся следующими соображениями. α -SiO₂ является веществом, для которого выполнено, по-видимому, наибольшее число экспериментальных исследований аномалий атомной динамики, присущей стеклам. Эти исследования привели, в частности, к заключению о существовании в α -SiO₂ низкоэнергетических (с энергиями $E \leq 1$ К) двухуровневых систем (ДУС), отвечающих туннелированию атомов в двухъямных потенциалах. Физическая природа двухъямных потенциалов оставалась до настоящего времени невыясненной, хотя на этот счет высказывались различные предположения [1-6]. Наличие большого числа экспериментальных данных об атомной динамике α -SiO₂ и микроскопической структуре этого материала [12-16] позволяет проверить результаты моделирования. Другой объект нашего исследования (α -Si) также хорошо исследован экспериментально [7, 17, 18]. В отличие от α -SiO₂ и целого ряда других стекол аномалии атомной динамики, связанные с существованием ДУС в α -Si, практически отсутствуют. Таким образом, свойства атомных потенциалов в α -SiO₂ и α -Si считаются на эмпирических основаниях существенно различными. Нам представляется интересным сравнение результатов моделирования атомных потенциалов для этих двух структур.

1. Моделирование локальных атомных потенциалов в α -SiO₂

Фрагмент структуры α -SiO₂ на рис. 1 представляет квазимолекулу из 9 атомов, в дальнейшем называемую К9. В аморфном материале имеет место статистический разброс структурных параметров К9: межатомных длин и углов θ , φ . Этот разброс порождает флуктуации параметров локальных атомных потенциалов.

Мы исследовали флуктуации потенциалов атомов кислорода. В качестве флуктуирующих параметров рассматривались коэффициенты в разложении атомного потенциала

$$V(X) = \varepsilon \left[\eta \left(\frac{X}{r_0} \right)^2 + t \left(\frac{X}{r_0} \right)^3 + \left(\frac{X}{r_c} \right)^4 \right], \quad (1)$$

где X обозначает одну из мод x, y, z на рис. 1. Характерная атомная длина r_0 введена для обезразмеривания коэффициентов η, t , которые связаны с производными потенциала в точке экстремума. Потенциал (1) может быть одноямным или двухъямным. Для двухъямных потенциалов мы условимся считать, что начало отсчета для X в (1) выбрано в точке максимума межъямного барьера, т. е. $\eta < 0$. Наша цель состоит в определении статистики случайных коэффициентов η, t в (1).

Был рассмотрен ансамбль $5 \cdot 10^3$ квазимолекул К9 со случайными структурными параметрами (межатомными расстояниями и углами θ, φ). Статистические распределения этих параметров подбирались так, чтобы они как можно ближе соответствовали структуре α -SiO₂. Для этого предварительно было произведено моделирование α -SiO₂ на ЭВМ. В каждой из случайных квазимолекул К9 ансамбля был исследован потенциал атома кислорода (в центре на рис. 1) и найдены коэффициенты η, t для всех

мод его движения. В результате получены гистограммы распределения этих величин (рис. 2, 3) для двух наиболее мягких мод.

Используя полученные гистограммы, мы попытались описать соответствующие сглаженные непрерывные распределения $\Phi(\eta)$ и $F(t)$ посредством простых эмпирических формул. Для этого были использованы выражения

$$\Phi(\eta) = A_1 |\eta| \exp(\eta/\delta_{\eta_1}) \equiv |\eta| \Phi_0(\eta), \quad F(t) = (2\pi\sigma_{t_1}^2)^{-1/2} \exp(-t^2/2\sigma_{t_1}^2) \quad (2)$$

для первой моды (рис. 2), а также

$$\Phi(\eta) = A_2 |\eta| \exp(\eta/\delta_{\eta_2}) \equiv |\eta| \Phi_0(\eta), \quad F(t) = G \exp(-(t^2 - t_0)^2/2\sigma_{t_2}^2) \quad (3)$$

для второй моды (рис. 3). При этом для распределений $\Phi(\eta)$ мы ограничились описанием области малых η (т. е. мягких потенциалов), представ-

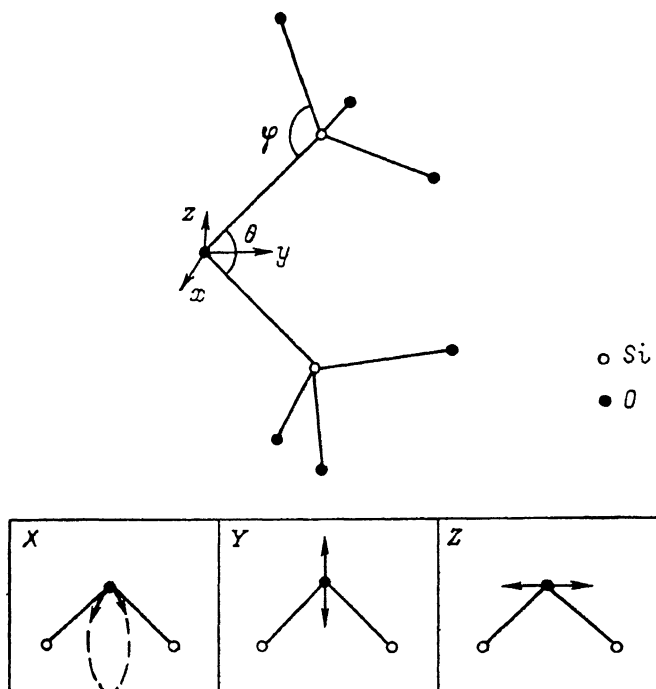


Рис. 1. Фрагмент кластера $d\text{-SiO}_2$.

Указаны нормальные моды x, y, z смещения атома кислорода и возможные его смещения, приводящие к двухъямности локального потенциала.

ляющей наибольший интерес. Обработка результатов проведена методом наименьших квадратов с точностью не менее 5%. Подобранные таким образом значения параметров в формулах (2), (3) составляют

$$A_1 = 9.64, \quad \delta_{\eta_1} = 0.27, \quad \sigma_{t_1} = 0.72; \quad A_2 = 5.50, \quad \delta_{\eta_2} = 0.23, \quad G = 0.25, \\ \sigma_{t_2} = 0.90, \quad t_0 = 1.30. \quad (4)$$

Заметим, что наличие множителя $|\eta|$ в зависимости $\Phi(\eta)$ соответствует теоретическим аргументам, изложенным в работах [11, 19]. На вставках к рис. 2, 3 специально показана в увеличенном масштабе область очень малых $|\eta|$, в которой видна пропорциональность $\Phi(\eta) \propto |\eta|$. Гистограммы рис. 2, 3 и их описание формулами (2)–(4) представляют основной результат этого раздела. В оставшейся части раздела мы более подробно опишем процедуру моделирования $\alpha\text{-SiO}_2$ и определения величин η, t .

Моделирование α -SiO₂, необходимое для набора статистики структурных параметров К9, производилось следующим образом. Сначала был сформирован содержащий 223 атома кристаллический кластер (в даль-

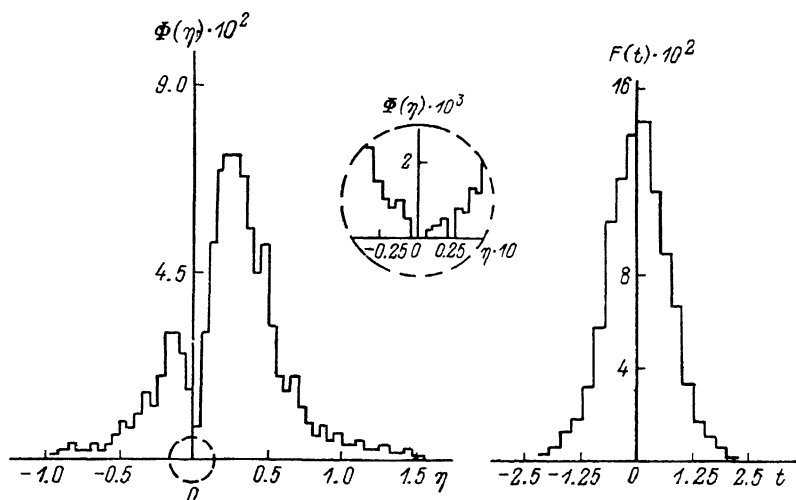


Рис. 2. Гистограмма функций распределения величин η и t потенциала (2) по самой мягкой моде (мода X на рис. 1).

нейшем назван К223) с периодическими граничными условиями. Он отвечает фазе β -кristобаллита с углом $\theta = 180^\circ$ на рис. 1. Затем кристаллический кластер перестраивался в аморфный. Это достигалось надлежащим выбором межатомного взаимодействия, при включении которого кристал-

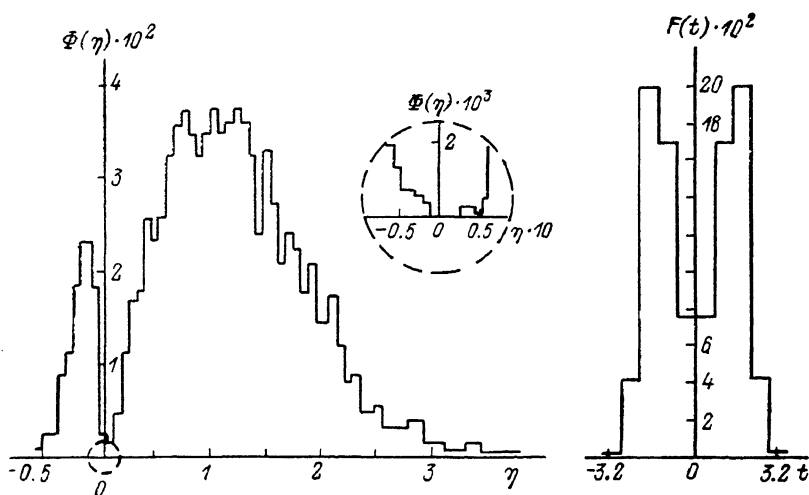


Рис. 3. Гистограмма функций $\Phi(\eta)$ и $F(t)$ для моды y (рис. 1).

лическая структура становилась неустойчивой. Методом молекулярной динамики производилась релаксация неустойчивой структуры в устойчивое состояние. Устойчивая структура оказывалась аморфной и отождествлялась с кластером α -SiO₂ на основании сопоставления с независимыми данными (см. таблицу).

В описанной процедуре межатомное взаимодействие задавалось в форме Киттинга [23]

$$E = \frac{3\alpha}{16} \sum_{i,j} (r_{ij}^2 - r_0^2)^2 + \frac{3\beta}{8} \sum_{i,j,j'} (r_{ij} r_{jj'} - r_0^2 \cos \varphi_0)^2 + \frac{3\beta}{8} \sum_{i,j,l} (r_{ij} r_{jl} - r_0^2 \cos \theta_0)^2 + \frac{\gamma}{2} \sum_{i,l} (r_{il} - r_{0-O})^2 \quad (5)$$

с параметрами: $\alpha = 9.1 \cdot 10^{19}$ эрг·см⁻⁴, $\beta = 0.17 \alpha$, $\gamma = \beta/10$, $r_0 = 1.62 \cdot 10^{-8}$ см; r_{0-O} — расстояние между ближайшими атомами О. В потенциале (5) мы задавали значения равновесных углов $\theta_0 = 150^\circ$, $\varphi_0 = 109.5^\circ$, по многим данным, средние для α -SiO₂ (см. таблицу). После этого кристаллический кластер K223 становился неустойчивым и производилась его релаксация методом молекулярной динамики.

Характеристики некоторых моделей α -SiO₂ [20]

	Модель						экспер. [16, 20]
	1 [20]	2 [20]	3 [20]	4 [21]	5 [22]	расчет	
Число атомов	162	183	186	614	648	223	
Граничные условия	Пер.	Пер.	Пер.	Класт.	Пер.	Пер.	
Плотность, г/см ³	2.20	2.20	2.20	1.93	2.20	2.20	2.20
\bar{R}_{O-Si} , Å	1.62	1.62	1.64	1.62	1.62	1.62	1.62
$\Delta R/\bar{R}$	0.007	0.010	0.017	0.035	—	0.032	0.031
φ (O-Si-O), град	109.3	109.3	109.3	109.3	109.5	109.5	109.5
$\Delta \varphi$, град	4.8	6.8	8.2	6.2	7.4	4.8	2.8
θ (Si-O-Si), град	147.2	152.3	151.5	153.3	148.0	150.0	144—152
$\Delta \theta$, град	13.8	14.2	13.1	9.6	12.3	9.0	8.9
Положение пиков на КРРА, Å							
P_1	1.62	1.62	1.64	1.6		1.62	1.61
P_2	2.66	2.68	2.70	2.6		2.65	2.64
P_3	3.14	3.17	3.23	3.1		3.08	3.06
P_4	4.14	4.16	4.28	4.1		4.13	
P_5	5.18	5.63	5.45	5.1		5.20	

Примечание. \bar{R}_{O-Si} — среднее равновесное расстояние O-Si; $\Delta R/\bar{R}$ — относительное изменение длины связи O-Si; θ , φ — средние значения углов Si-O-Si и O-Si-O соответственно; $\Delta \theta$, $\Delta \varphi$ — дисперсии угловых искажений; P_1 — P_5 — положения первых пяти пиков на КРРА. Приведены также количество атомов в модели и тип граничных условий (периодические или моделирование конечных кластеров).

Использование молекулярной динамики следовало традиционной схеме [24]. Численно решались уравнения движения атомов, взаимодействующих по закону (5) в кластере K223 с периодическими граничными условиями. Через равные интервалы времени $\tau = 4 \cdot 10^{-15}$ с [24], в течение которых происходила свободная эволюция системы, скорости всех атомов полагались равными нулю. В этом состояла процедура искусственной диссипации энергии. Вычисления заканчивались при отыскании равновесной конфигурации, полная энергия которой не менялась при дальнейших итерациях в пределах 0.005 эВ.

Результаты моделирования приведены в таблице в сравнении с некоторыми экспериментальными данными. Там же для сравнения приведены результаты моделирования α -SiO₂ другими авторами с использованием алгоритмов, отличных от нашего. Из этой таблицы видно, что наши результаты в главных чертах согласуются с имеющимися данными. Это позволяет надеяться, что полученная при моделировании аморфная структура более или менее адекватно воспроизводит структуру α -SiO₂. Один из результатов моделирования, используемый в дальнейшем, состоит в том, что случайные величины θ , φ распределены приблизительно по нормальным законам с параметрами, указанными в таблице.

Набор представительной статистики параметров атомных потенциалов на кластере K223 оказался для нас невозможным из-за слишком больших

затрат машинного времени. Поэтому результаты моделирования мы использовали косвенным образом — для набора статистики структурных параметров квазимолекул К9. Идея состояла в том, чтобы подобрать для К9 такой тип беспорядка, который бы воспроизводил статистику структурных параметров, найденную для К223. Оказалось, что эта цель достигается, если восьми атомам К9, окружающим кислород, задавать случайные смещения, распределенные по нормальному закону с дисперсией $\Delta r = 0.15 r_0$. При этом удается воспроизвести как параметры, приведенные в таблице, так и распределения нормального вида для углов θ , φ .

Генерация случайных квазимолекул К9 с беспорядком найденного типа позволяла набрать достаточную статистику флуктуаций локальных атомных потенциалов. После того как периферийные атомы К9 случайно смещались из своих кристаллических положений, для центрального атома кислорода определялись коэффициенты разложения потенциала

$$V = \varepsilon \left[h' \left(\frac{X'}{r_0} \right) + \eta' \left(\frac{X'}{r_0} \right)^2 + t \left(\frac{X'}{r_0} \right)^3 + \left(\frac{X'}{r_0} \right)^4 \right], \quad (6)$$

где X' обозначает одну из мод x , y , z на рис. 1. Наличие линейного члена в (6) означает, что начальное положение центрального атома кислорода в К9 неустойчиво. Между параметрами разложений (6) и (1) существует связь

$$\eta - \frac{3}{8} t^2 = \eta' - \frac{3}{8} t'^2, \quad \frac{t}{2} \left(\eta - \frac{t^2}{4} \right) = \frac{t'}{2} \left(\eta' - \frac{t'^2}{4} \right) - h'. \quad (7)$$

Используя эту связь, мы для каждой квазимолекулы К9 ансамбля определили значения η , t и построили гистограммы (рис. 2, 3). Заметим, что, как оказалось, величины ε для мягких потенциалов почти не флуктуируют и близки к своим средним значениям: $\varepsilon \approx 12.05$ эВ для мягких потенциалов первого типа (рис. 2), $\varepsilon = 11.19$ эВ для мягких потенциалов второго типа (рис. 3).

2. Моделирование

локальных атомных потенциалов в α -Si

При моделировании атомных потенциалов в α -Si мы, следуя [9], рассмотрели ансамбль случайных квазимолекул, состоящих из центрального атома и четырех ближайших соседей. Они получались в результате перестройки кластеров кристаллического кремния по следующему алгоритму [9]. Четырем атомам первой координационной сферы кристаллического кремния задавались случайные смещения с дисперсией $\Delta r = 0.15 r_0$, где r_0 — равновесное межатомное расстояние, и координаты их фиксировались. Затем проводилась релаксация системы при смещениях внутреннего атома, взаимодействие которого с соседями описывалось потенциалом Морзе—Киттинга

$$E = \sum_{ij} D \{ 1 - \exp[-\alpha(r_{ij} - r_0)] \} + \frac{3}{8} \frac{\beta^2}{r_0^2} \sum_{i, j, j'} \left(r_{ij} r_{jj'} + \frac{r_0^2}{3} \right)^2 \quad (8)$$

с параметрами: $D = 1.14 \cdot 10^{-12}$ эрг, $\alpha = 1.56 \cdot 10^8$ см $^{-1}$ [25], $\beta = 0.971 \cdot 10^{19}$ эрг·см $^{-2}$ [26], $r_0 = 2.34 \cdot 10^{-8}$ см.

Величина смещений на границе выбиралась такой, чтобы обеспечить наблюдаемые в α -Si величины среднеквадратичных смещений для ближайших соседей. Известно [27], что в аморфном кремнии средний квадрат отклонения атома первой координационной сферы равен 0.014 \AA^2 , тогда как в кристаллическом кремнии эта величина составляет 0.010 \AA^2 . Первая величина обусловлена как динамическими, так и статическими (за счет разупорядочения) смещениями. В кристаллическом кремнии статические смещения отсутствуют. Оценкой среднего квадрата статических смещений

служит поэтому разность двух приведенных величин, т. е. 0.004 \AA^2 . Последняя величина, как показали результаты моделирования, может быть обеспечена заданием случайных смещений граничных атомов с дисперсией $\approx 0.15r_0$. Задавая такие смещения, мы создали ансамбль из $5 \cdot 10^8$ случайных квазимолекул. В дальнейшем предполагалось, что этот ансамбль моделирует микроскопическую структуру α -Si.

В каждой квазимолекуле ансамбля был исследован потенциал внутреннего атома при фиксированных положениях его соседей. Оказалось, что наиболее мягкая мода движения во всех случаях близка к кристаллографическому направлению $\langle 111 \rangle$. Для этой моды мы набрали статистику коэффициентов η и t в разложении (1). Полученные гистограммы по своему виду подобны гистограммам рис. 2. Для их аналитического описания мы использовали формулы (2), подбор параметров для которых дал

$$A_1 = 2.3 \cdot 10^{-2}, \delta_{\eta_1} = 0.41, \sigma_{t_1} = 0.99. \quad (9)$$

Заметим, что концентрация мягких потенциалов в α -Si оказалась гораздо меньше, чем в α -SiO₂. Это непосредственно видно из сравнения параметров (4) и (9).

3. Обсуждение результатов

Один из главных результатов произведенного моделирования состоит в том, что в аморфных материалах при сохранении ближнего порядка имеют место значительные флуктуации параметров атомных потенциалов. Они обеспечиваются типичными относительно малыми флуктуациями структурных параметров. Основными флуктуирующими параметрами атомных потенциалов являются коэффициенты η и t при квадратичном и кубическом членах их разложения (1) вблизи экстремумов. Параметр четверного ангармонизма в (1) близок к своему среднему значению. Одновременные значительные флуктуации η и t по одной моде гораздо более вероятны, чем одновременные и столь же значительные флуктуации коэффициентов при квадратичных членах по двум модам движения атомной частицы. Последнее означает, что типичный мягкий потенциал является одномодовым. Все эти заключения согласуются с эвристическими утверждениями, составляющими основу концепции мягких потенциалов [4-6, 8, 10, 11].

Как отмечалось, в двухъямных потенциалах (1) могут реализоваться двухуровневые системы. Плотность их состояний $n(E)$ при заданных распределениях $\Phi(\eta)$ и $F(t)$ дается выражением [19, 28]

$$n(E) \approx 2^{5/2} - I_0^{1/2} F(0) \Phi(0). \quad (10)$$

Подставив сюда найденные выше значения параметров, получаем для ДУС первого и второго типов в α -SiO₂, отвечающих соответственно гистограммам рис. 2 и 3, значения $n_1 \approx 2 \cdot 10^{33}$ и $n_{11} \approx 2 \cdot 10^{32} \text{ эрг}^{-1} \cdot \text{см}^{-3}$. Для аморфного кремния подстановка параметров (9) в (10) дает $n_{Si} \approx 9 \times 10^{31} \text{ эрг}^{-1} \cdot \text{см}^{-3}$. Вывод о том, что плотность состояний ДУС в α -SiO₂ заметно больше, чем в α -Si, согласуется с имеющимися данными [1-3]. Наша оценка плотности состояний n_1 в α -SiO₂ совпадает по порядку величины с результатами измерений [1-3].

Следующее замечание касается возможной роли двух типов ДУС, обнаруженных при моделировании и соответствующих мягким модам x , y на рис. 1. Как показало исследование, параметры двухъямных потенциалов второго типа в несколько раз чувствительнее к изменению объема квазимолекулы K9, чем параметры двухъямных потенциалов первого типа. Это свидетельствует, что ДУС второго типа, обладая меньшей концентрацией, сильнее связаны с фононами. Такое заключение согласуется со сделанным на эмпирических основаниях предположением Блэка и Халперина [29] о существовании ДУС двух типов, из которых первые определяют теплоемкость, а вторые — теплопроводность α -SiO₂.

Подчеркнем, что сделанные выводы основаны на исследовании потен-

циалов только для одиночных атомов. Более реалистический подход, основанный на исследовании потенциалов для различных когерентных движений групп атомов (выделение нормальных мод), остался нереализованным из-за больших затрат машинного времени. Можно, однако, надеяться, что учет взаимодействия найденных «затравочных» мягких мод одиночных атомов с другими колебательными модами качественно не изменит основных результатов. Действительно, высокочастотные колебания ближайших к мягкому потенциалу атомов адиабатически усредняются, не приводя к сильной перенормировке параметров мягкого потенциала [10]. Низкочастотные же колебания, представляющие акустические фононы, имеют большие длины волн и потому слабо взаимодействуют с локальным потенциалом [28].

Таким образом, произведенное моделирование впервые позволило исследовать флуктуации локальных атомных потенциалов в аморфных веществах. Его результаты, касающиеся двухуровневых систем, находятся в разумном согласии с экспериментальными данными. Используемый метод моделирования на ЭВМ может быть в принципе применен и к другим аморфным структурам: металлическим и неметаллическим стеклам, полимерам и т. д. Мы надеемся, что в ходе подобных исследований удастся установить общие свойства флуктуаций локальных атомных потенциалов аморфных систем.

Авторы выражают благодарность Ю. М. Гальперину, В. Л. Гуревичу, Д. А. Паршину, Б. И. Шкловскому за полезные обсуждения результатов работы.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Anderson P. W., Halperin V. I., Varma C. M. // *Phil. Mag.* 1972. V. 25. N 1. P. 1—9.
- [2] Phillips W. A. // *J. Low. Temp. Phys.* 1972. V. 7. N 2. P. 351—357.
- [3] *Amorphous Solids. Low Temper. Properties* / Ed. by W. A. Phillips. Springer—Verlag: Berlin—Heidelberg—N. Y., 1981. 169 p.
- [4] Гальперин Ю. М., Гуревич В. Л., Паршин Д. А. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 40. № 5. С. 283—286.
- [5] Карпов В. Г., Паршин Д. А. // Письма в ЖЭТФ. 1983. Т. 38. № 11. С. 536—539.
- [6] Buchenau U. // *Sol. St. Comm.* 1985. V. 56. N 5. P. 889—893.
- [7] Мотт Н., Дэвис Э. // *Электронные процессы в некристаллических полупроводниках*. М.: Мир, 1982.
- [8] Клиггер М. И., Карпов В. Г. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. № 2. С. 1687—1704.
- [9] Соловьев В. Н., Хрисанов В. А. // ФТП. 1988. Т. 22. № 4. С. 768—771.
- [10] Карпов В. Г., Клиггер М. И., Игнатъев Ф. Н. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. № 2. С. 760—771.
- [11] Кривоглаз М. А. // ЖЭТФ. 1985. Т. 85. № 6. С. 2171—2184.
- [12] Phillips J. C. // *Sol. St. Phys.* 1982. V. 37. P. 93—121.
- [13] Gerber Th., Himmel B. J. // *J. Non-Cryst. Sol.* 1986. V. 83. N 2. P. 324—331.
- [14] Wright A. C. // *J. Non-Cryst. Sol.* 1985. V. 75. N 1. P. 15—23.
- [15] Zarzycki J. // *J. Non-Cryst. Sol.* 1982. V. 52. N 1. P. 31—38.
- [16] Price D. L., Carpenter J. M. // *J. Non-Cryst. Sol.* 1987. V. 92. N 1. P. 153—165.
- [17] *Аморфные полупроводники* / Под ред. М. Бродски. М.: Мир, 1982. 462 с.
- [18] *Физика гидрогенизированного аморфного кремния* / Под ред. Дж. Джоунюлоса и Дж. Люковски. М.: Мир, 1987. 662 с.
- [19] Ильин М. А., Карпов В. Г., Паршин Д. А. // ЖЭТФ. 1987. Т. 92. № 1. С. 291—296.
- [20] Ching W. Y. // *Phys. Rev. B.* 1982. V. 26. N 7. P. 6610—6622.
- [21] Bell R. T., Deen P. // *Phil. Mag.* 1972. V. 25. N 10. P. 1981—1996.
- [22] Leeuw S. W., He H., Thorpe M. F. // *Sol. St. Comm.* 1985. V. 56. N 2. P. 343—346.
- [23] Guttman L., Rahman S. M. // *Phys. Rev. B.* 1986. V. 33. N 6. P. 1506—1510.
- [24] Swaler J. R. // *Adv. Mater. Res.* 1970. V. 4. N 1. P. 295—342.
- [25] Swalin R. A. // *J. Phys. Chem. Sol.* 1961. V. 18. N 1. P. 290—298.
- [26] Weaire D., Wooten F. J. // *J. Non-Cryst. Sol.* 1980. V. 35—36. P. 945—949.
- [27] Moss S. C., Graczyk D. F. // *Phys. Rev. Lett.* 1969. V. 23. N 12. P. 1167—1170.
- [28] Карпов В. Г., Паршин Д. А. // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. № 6. С. 2212—2227.
- [29] Black J. L., Halperin V. I. // *Phys. Rev. B.* 1977. V. 16. N 7. P. 2879—2893.