

В рамках описания зонной модели коллективные свойства решетки включены в характеристики электрона в кристалле. Дополнительные взаимодействия в решетке описываются через переходы электрона из одного делокализованного состояния в другое с изменением энергии и волнового вектора электрона. В противоположность этому в локализованном описании электрон переходит из одного локализованного состояния на одном атоме в другое локализованное состояние, причем переход включает в себя взаимодействие со всеми заряженными частицами в окрестности электрона.

Хотя описание явлений в твердом теле через делокализованные возбуждения и их взаимодействие часто обладает значительными преимуществами, тем не менее есть случаи, когда целесообразно или даже необходимо введение *локализованных состояний*. Именно этими случаями мы будем интересоваться в последующих главах.

Еще в гл. VII первой части книги мы видели, что концепция экситона может быть введена как через делокализованные функции Блоха, так и посредством локализованных функций Ванье. Два предельных случая экситона Ванье и Френкеля описывают состояния, которые выражают в одном случае свободную подвижность электрона, а в другом — его локализацию наione решетки. Какое описание более пригодно — определяется природой исследуемого твердого тела.

Нелокальная и локальная формы описания эквивалентны в случае полностью заполненной энергетической зоны (например, валентной зоны изолятора). В нелокальном описании эта зона не дает вклада в проводимость, поскольку в полностью заполненной зоне вклады от каждых двух электронов одинаковой энергии, но с противоположно направленными волновыми векторами, полностью взаимно уничтожаются. В локальном описании переходы от одного атома к следующему невозможны, так как соответствующие состояния соседних атомов также заняты. Можно выбрать описание в рамках зонной модели, например, при исследовании оптического возбуждения электрона из полностью заполненной зоны за счет поглощения фотона с данной энергией и волновым вектором. Локальное описание часто предпочтительнее, когда вопросы касаются химической связи. Мы исследуем эту область вопросов в разделе Б этой главы. Там мы установим, когда концепция локального описания может содействовать качественному (а частично и количественному) пониманию разных типов химической связи в твердых телах.

В идеальной бесконечной решетке локальное описание становится важным тогда, когда приближения зонной модели (пренебрежение точными электрон-электронным и электрон-фононным взаимодействиями при определении одноэлектронных состояний) нарушаются. Мы исследуем такую постановку вопроса в разделе В гл. 1.

В последующих главах мы обратимся к *искаженным решеткам*. Гл. 2 начинается с рассмотрения *локальных дефектов структуры кристалла*, к которым относятся примесные атомы, внедренные в