

строгую периодическую в остальных отношениях решетку, и локальная неупорядоченность типа вакансий и атомов в междоузлиях. Такие дефекты кристаллической решетки обладают истинно локализованными состояниями, на которых могут быть захвачены электроны. Введение таких состояний здесь больше не является вопросом целесообразности той или иной формы описания. Они существуют наряду с элементарными возбуждениями и могут с ними взаимодействовать. Это взаимодействие ведет к конечному времени жизни электрона в локализованном состоянии и, одновременно, к конечному времени жизни элементарных возбуждений.

Наряду с состояниями, локализованными на точечных дефектах кристаллической решетки, локализованные состояния присутствуют на (одномерных) *дислокациях* и (двумерных) *поверхностях*. Поверхностным состояниям посвящен раздел Б гл. 2.

Наконец, в гл. 3 рассматриваются *неупорядоченные решетки*. Вследствие отсутствия дальнего порядка, т. е. строгой периодичности, необходимо будет пересмотреть концепции, развитые для зонной модели. В энергетическом спектре электронов появляются обе области: как с локализованными, так и с делокализованными состояниями.

Б. ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ

§ 1. Введение

Химическая связь в твердом теле обусловлена взаимодействием валентных электронов всех атомов решетки. Факторами, определяющими тип связи, являются электронная конфигурация свободных атомов (число электронов вне замкнутых оболочек, симметрия волновых функций заполненных состояний) и атомное окружение атома в кристаллической решетке (тип, число и расположение соседних атомов). Существует два главных типа связи. Если число ближайших соседей атома в решетке равно числу его валентных электронов, то электроны могут попарно упорядочиваться в отдельные связи между ближайшими соседями. В этом случае связь можно описывать посредством пар *локализованных электронов*. Если число валентных электронов у атома недостаточно, то валентный электрон взаимодействует с электронами нескольких соседних атомов. Связь является *делокализованной*.

Параграф 2 мы начинаем с рассмотрения локализованной ординарной связи. Этот случай можно трактовать подобно случаю химической связи двухатомной молекулы. Распространение рассмотрения в § 3 на многоатомные молекулы приводит к ближайшему порядку в окрестности атома и, следовательно, к твердому телу. В этой связи мы найдем критерии того, когда следует выбрать ло-