

Глава 2

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ

А. ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

§ 13. Введение

Периодичность решетки может нарушаться в обширных областях, у внешних поверхностей или у внутренних поверхностей раздела, вдоль линий дислокаций или около отдельных узлов решетки. Соответственно различают трехмерные, двумерные, одномерные и нульмерные дефекты кристаллической решетки. В этой главе мы будем интересоваться нульмерными *точечными дефектами (структуры) кристалла (или дефектами кристаллической решетки)* и их влиянием на свойства твердого тела.

Наиболее важные точечные дефекты структуры кристалла — это химические *примеси, вакантные узлы решетки (вакансии), внедренные (в междоузлия) атомы*. Общей характерной чертой для них является способность связывать и высвобождать электроны. Таким образом, они создают в решетке *локализованные состояния*.

В этой главе мы рассмотрим такие локализованные состояния со следующих точек зрения.

1) Можно ли продолжать пользоваться концепцией элементарных возбуждений в нарушенных решетках? Мы увидим, что при достаточно низкой концентрации дефектов свойства элементарных возбуждений лишь незначительно модифицируются. Элементарные возбуждения и дефекты структуры кристалла могут тогда рассматриваться совместно.

2) Какие взаимодействия возникают между элементарными возбуждениями и дефектами?

3) Как влияют дефекты кристаллической решетки на физические свойства твердого тела (оптические свойства или явления переноса, например)?

Параграф 14 мы начинаем с исследования влияния точечных дефектов структуры кристалла на зонную модель. Оказывается, что делокализованные состояния зоны и локализованные состояния, связанные с дефектами, можно рассматривать совместно в одной схеме энергетических зон.

В таком обсуждении дефект будет интерпретироваться как нарушение первичной решетки. Можно поставить обратный вопрос: в какой мере первичная решетка модифицирует свойства свободного