

атома? Некоторые сведения об этом дает теория *внутрикристаллического поля*, о которой пойдет речь в § 15.

Точно так же, как зонная модель описывает свойства квазичастицы «электрон кристалла», фононный спектр описывает свойства колебаний решетки. В § 16 будет показано, что около дефектов отдельные из делокализованных фононных состояний становятся локализованными и отщепляются от непрерывного спектра в виде ветви (*локализованные колебания решетки*).

Затем мы снова рассматриваем электроны. Исходя из возможности объединения приближенным образом электронных состояний дефектов с блоховскими состояниями зонной модели, в § 17 мы ставим вопрос, как следовало бы обобщить теперь статистики из ч. I, § 6 и ч. I, § 22. Изменение толкования введенных там понятий сделает возможным переход к описанию, в котором условиям равновесия подчиняются не только электроны в состояниях зоны и на локализованных уровнях, но также и сами дефекты. Это приводит к кинетике реакций, которая понадобится в § 18 для описания равновесия неупорядоченности. В § 19 мы обращаемся к важной теме кинетики дефектов.

Последние четыре параграфа этой главы посвящены влиянию дефектов на оптические свойства твердых тел и характеристики переноса в них. Наряду с *центрами рекомбинации* и *ловушками* обсуждаются люминесценция, уширение спектров поглощения и испускания за счет электрон-фононного взаимодействия при оптических переходах, а также влияние связанных экситонов на спектры испускания. В заключение кратко рассматривается роль дефектов в явлениях переноса. Здесь мы будем интересоваться в основном рассеянием электронов на дефектах (примесное рассеяние) как механизмом, существующим одновременно с электрон-фононным взаимодействием и конкурирующим с ним.

## § 14. Описание в рамках зонной модели

Зонная теория заранее предполагает строгую периодичность структуры решетки. Эта периодичность нарушается дефектами. В этом параграфе мы рассматриваем отдельный дефект в периодическом в остальных отношениях потенциале.

Вместо уравнения Шредингера (ч. I.16.1)

$$H_0 \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \equiv \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.1)$$

[ $V(\mathbf{r})$  — периодический потенциал,  $\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  — блоховская функция], имеем теперь уравнение

$$[H_0 + U(\mathbf{r})]\psi = E\psi. \quad (2.2)$$

Здесь  $U(\mathbf{r})$  — дополнительный потенциал, внесенный дефектом. Для примесного атома в узле решетки, например, это — потенциал при-