

меси минус потенциал замещенного атома решетки. В $U(r)$, быть может, следует также учесть локальное искажение решетки, обусловленное примесным атомом.

$U(r)$ может быть отрицательным или положительным. Электроны могут, следовательно, быть связаны на дефекте или отталкиваться им. Соответственно мы ожидаем, что (2.2) имеет решения, которые локализованы около дефекта и энергетические уровни которых лежат ниже или над состояниями рассматриваемой энергетической зоны.

Анализ (2.2) для простых моделей показывает такое поведение. Один из результатов воспроизведен на рис. 17. Общий результат заключается в том, что наличие дефекта в периодическом в остальных

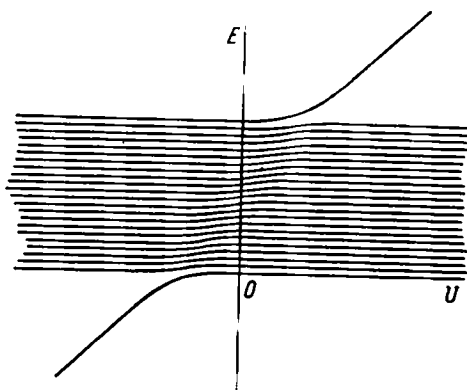


Рис. 17. Энергетическая зона для простой трехмерной модели потенциала (периодический потенциал с изолированным дефектом) как функция отклонения U потенциала дефекта от потенциала в неискаженном узле решетки [ср. (2.2)]. [По Костеру и Слэтеру (Слэтер [106.XIX])]. В зависимости от знака U от квази непрерывной зоны отщепляется состояние наивысшей или наипысшей энергии. Отщепившееся состояние пространственно локализовано в окрестности дефекта. Остаточные делокализованные зонные состояния лишь слегка смещены по энергии. Этот результат оправдывает сохранение зонной модели и ее обобщения с энергетическими уровнями дефекта для описания кристаллов, искаженных дефектами малой концентрации.

отношениях потенциале приводит к отщеплению одного состояния от рассматриваемой зоны. Если $U(r)$ положителен, то отщепляется верхнее состояние; если $U(r)$ отрицателен — отщепляется нижний уровень. В пределах зоны возникают лишь незначительные сдвиги состояний. В то время как волновая функция в зоне остается приблизительно делокализованной блоховской функцией, волновая функция, соответствующая отщепившемуся состоянию, является локализованной. Мы не будем выполнять вычисления, приводящие к результатам, изображенным на рис. 17. Модели, обсуждаемые ниже, показывают те же свойства и более обоснованы для проблемы дефекта в кристалле. Мы рассматриваем простой пример подобного случая в § 16 (влияние дефекта на спектр колебаний).