

стояния лежат в пределах валентной зоны или зоны проводимости, они вырождены с делокализованными блоховскими состояниями. Поэтому электрон остается связанным только короткое время. Или иначе: время жизни в таких резонансных состояниях конечно. С этим связано уширение энергетических уровней таких состояний. Рис. 20 демонстрирует примеры. На нем также показан дискретный

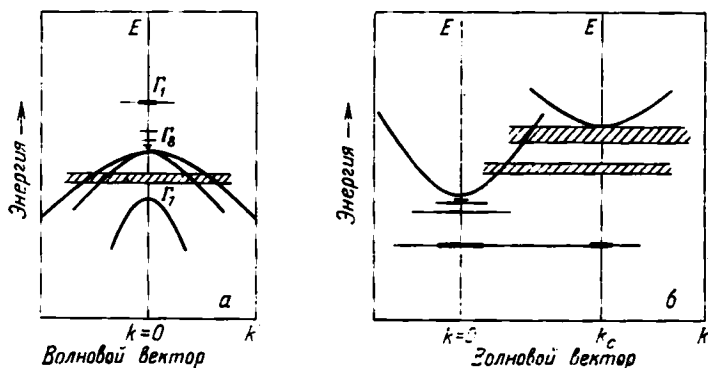


Рис. 20. Примесные уровни в запрещенной зоне и резонансы в зонах: а — для вырожденной валентной зоны и б — для двух энергетически близких зон проводимости с минимумами в разных точках зоны Бриллюэна. Резонансы в зонах нестабильны. Это показано посредством «уширения времени жизни» уровней. (По Бассани [113в].)

уровень, в который коллективно вносят вклад состояния различных экстремумов. Относительно дополнительных подробностей см. работу Бассани и др. [111 с. 37, 113б, с]. Отсылаем также читателя к этой работе и к статье Кона [101.5] по поводу дополнительной информации по теории мелких примесных уровней.

Дефекты с большими энергиями связи электронов приводят к уровням, которые лежат глубже в запрещенной энергетической зоне. Электроны в таких центрах сильно локализованы. Приближение эффективной массы является невозможным. Для построения волнового пакета необходимы состояния полностью из всей зоны Бриллюэна и из нескольких зон. Подобные дефекты называются глубокими дефектами (см. Квейссер [103.XI] и Пантелидес [103.XV]).

Существует дополнительная трудность создания теории глубоких примесей. Примесные атомы — в узлах кристаллической решетки или в междоузлиях — не встраиваются хорошо в первичную решетку. При их внедрении возникает смещение положений равновесия соседних атомов. Следовательно, $U(\mathbf{r})$ состоит из вкладов не только самого примесного атома, но также окружающих его атомов решетки.

Ограничимся примером внедрения атомов азота в решетку алмаза. Атомы азота внедрены путем замещения. Образующаяся при этом конфигурация решетки нестабильна. Четыре соседних иона ре-