

шетки смещены тригональным образом. Новое положение равновесия обладает более низкой полной энергией (эффект Яна — Теллера, ср. следующий параграф).

Результаты модельных расчетов показаны на рис. 21 и 22. Энергетические уровни «молекулы» из 35 С-атомов были найдены численно. На рис. 21 показано относительное расположение атомов

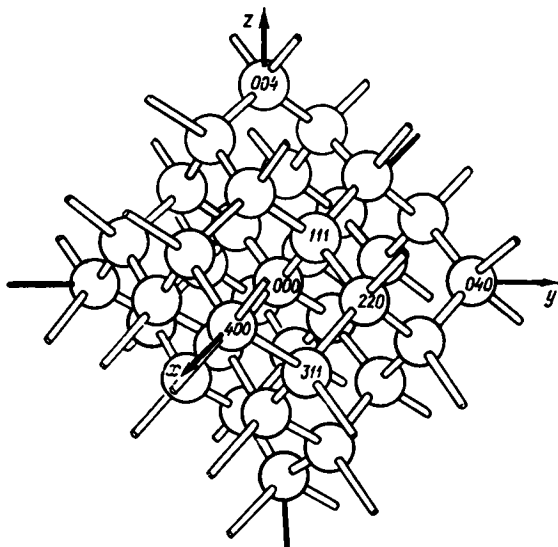


Рис. 21. «Молекула», составленная из 35 атомов углерода, как модельная решетка для приближенного вычисления энергетических уровней глубоких примесей

в молекулярном кластере. Соответствующая «зонная структура» представлена на рис. 22, а. Она вполне хорошо согласуется с известными данными по ширине валентной зоны, зоны проводимости и запрещенной зоны для алмаза. Этот кластер можно рассматривать как приближение для кристалла алмаза. На рис. 22, б показана схема энергетических уровней для того же кластера, но в котором центральный атом замещен атомом азота. От зоны проводимости отщепляется энергетический уровень (с локализованной волновой функцией). Рис. 22, в иллюстрирует, каким образом энергия этого уровня зависит от тригонального искажения окрестности примесного атома. Полная энергия имеет максимум при искажении около 26%. При этом энергетический уровень дефекта лежит при $E = 2,2$ эВ над валентной зоной. Экспериментальное значение составляет 1,5 эВ. Отсюда видна необходимость учета искажения решетки в окрестности глубокого дефекта для того, чтобы получить разумное значение энергии связи. Появление дополнительных мелких уровней непосред-