

ственно под зоной проводимости и над валентной зоной связано с ян-тэллеровским сдвигом глубоких уровней.

Этот пример обнажает трудности, с которыми сталкивается теория глубоких дефектов. Потенциал в одноэлектронном уравнении

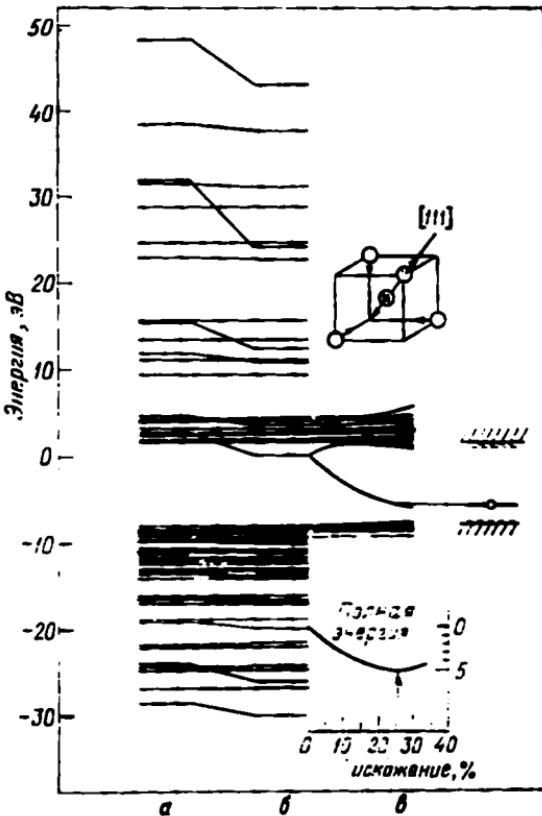


Рис. 22. Энергетические уровни «С-молекулы», изображенной на рис. 21 (а); тот же спектр после замещения центрального атома С на атом N (б); учет смещения Яна—Тэллера (с). Диаграмма внизу справа: полная энергия как функция ян-тэллеровского искаложения. [По Уоткинсу и Мессмеру (Proc. X. Int. Conf. Semiconductor Physics, Cambridge, Mass., 1970).]

(2.2) не может более рассматриваться как возмущение. Соотношения упрощаются только в другом предельном случае, в котором потенциал  $U(r)$  не является малым возмущением периодического потенциала, но вместо него малым возмущением потенциала дефекта является  $V(r)$ . Этот случай мы теперь и рассмотрим.

### § 15. Теория внутрикристаллического поля

В последнем параграфе был поставлен вопрос о влиянии, которое будет оказывать потенциал изолированного дефекта на одноэлектронные состояния зонной модели. При этом  $U(r)$  был лишь малым возмущением в гамильтониане в (2.2). Теперь мы хотим задаться обратным вопросом: в какой степени влияет на схему энергетиче-