

STRUCTURE DES CENTRES COLORÉS

J. Friedel

► **To cite this version:**

J. Friedel. STRUCTURE DES CENTRES COLORÉS. Journal de Physique Colloques, 1967, 28 (C4), pp.C4-3-C4-9. <10.1051/jphyscol:1967401>. <jpa-00213288>

HAL Id: jpa-00213288

<https://hal.archives-ouvertes.fr/jpa-00213288>

Submitted on 1 Jan 1967

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

STRUCTURE DES CENTRES COLORÉS

par J. FRIEDEL

Laboratoire de Physique des Solides (*), Faculté des Sciences, 91 — Orsay

Résumé. — On rappelle la structure de quelques centres simples, et on analyse certains des problèmes qu'ils posent.

Abstract. — The structure of a few simple centers is described and some of the problems that arise are analysed.

Introduction. — Cet exposé a pour but de résumer quelques propriétés générales des centres colorés dans les solides ioniques. Ce sera une toile de fond fort peu originale, sur laquelle, j'espère, le colloque brodera des choses intéressantes.

L'existence de centres colorés est due à la possibilité pour les défauts ponctuels (lacunes, interstitiels) et leurs agrégats dans les solides ioniques de capter ou de céder des électrons plus facilement que le cristal parfait. Les électrons captés ou les trous positifs créés par l'arrachement d'électrons sont localisés autour des défauts, dans des niveaux d'énergies intermédiaires entre l'état fondamental du cristal parfait et les états conductifs (Fig. 1). L'exemple classique est le *centre F*,

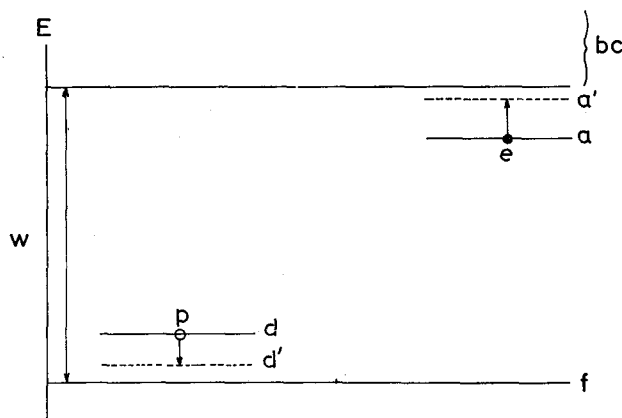


FIG. 1. — Etats accepteur *a* et donneur *d* localisés sur un centre à électron et un centre à trou.

où l'excès de charge positive créé localement par l'arrachement d'un ion négatif permet la capture d'un

électron (Fig. 2a). L'antimorphe est approximativement le centre *V_F*, où un trou positif est capté au voisinage d'une lacune d'ion positif (Fig. 2b). L'excitation

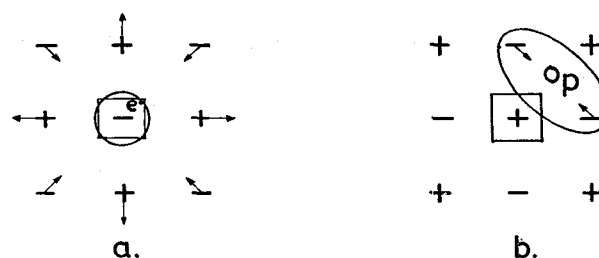


FIG. 2. — Centres associés à des lacunes :

- a) centre *F*
- b) centre *V_F*.

par la lumière des électrons des centres accepteurs ou des trous positifs des centres donneurs ($a \rightarrow a'$, $d \rightarrow d'$, Fig. 1) demande des énergies nécessairement inférieures à la largeur w de la bande interdite. Ces énergies $h\nu$ tombent ainsi souvent dans les fréquences ν du visible ; l'absorption de la lumière ainsi produite colore fortement les cristaux.

Une des fascinations de ces centres a effectivement été qu'ils ont constitué un des premiers exemples réellement compris de propriétés cristallines sensibles à la structure : par suite de leurs fortes forces d'oscillateurs, de très faibles quantités de centres produisent une coloration intense de cristaux autrement transparents. Un autre intérêt historique de ces centres est qu'ils mettaient en jeu, de façon claire, des défauts ponctuels (lacunes). Enfin c'est à leur occasion que se sont développées les notions d'états électroniques accepteurs et donneurs qui ont depuis fait leurs beaux jours dans le domaine des semiconducteurs covalents.

(*) Laboratoire associé au C. N. R. S.

Le renouveau actuel d'intérêt pour ces centres vient en partie d'un perfectionnement des techniques expérimentales — développement de la résonance électronique, perfectionnement de l'optique à haute résolution — mais aussi de préoccupations industrielles : emploi de composants ioniques dans l'énergie nucléaire, développement des lasers à impuretés dans les solides ioniques. Je pense que cette pression industrielle — qui affecte aussi les composés luminescents, les composés semiconducteurs, les réactions photographiques — amènera à élargir le champ des recherches fondamentales, qui s'est restreint surtout pour l'instant aux halogénures alcalins. C'est à ces corps que nous limitons essentiellement notre description.

1. TYPES DE DÉFAUTS. FORMATION. REVENU.

a) *Formation des centres élémentaires.* — La formation de centres colorés nécessite une double opération : création de défauts atomiques ; leur décoration par des électrons ou des trous positifs captés.

La décoration peut avoir lieu au moment de la formation des défauts, ou bien ultérieurement, par exemple par photoexcitation d'électrons.

La formation des défauts ponctuels met en jeu, dans les solides ioniques, les mêmes grands processus que dans les autres solides : irradiation, température, écrouissage.

L'irradiation par des particules rapides (électrons, neutrons, ions) déplace des ions par choc direct (effet Wigner). Certaines particules incidentes peuvent donner lieu à des réactions nucléaires, et les produits de la réaction peuvent avoir une énergie cinétique suffisante pour produire de nombreux défauts ; c'est le cas de la fission de l'isotope 6 du lithium par les neutrons. On crée, dans ces deux cas, des lacunes d'ions des deux signes, qui en se décorant, donnent lieu aux centres F et V_F . Les ions négatifs éjectés de leurs sites cristallins donnent lieu à des interstitiels dissociés qui, quand ils ont capté un trou positif, forment un *centre H* (Fig. 3a) : dans un tel centre, une molécule X_2^- remplace un

ion X^- le long d'un axe $[110]$; les mesures de R. P. E. montrent que le trou positif déborde un peu sur les deux ions X^- voisins sur le même axe. On peut s'attendre par analogie à un centre antimorphe correspondant à un interstitiel d'ion positif neutralisé, ou plutôt à une molécule Y_2^+ substituée à un ion Y^+ du réseau (Fig. 3b) ; un tel centre sera discuté lors de ce colloque.

Les solides ioniques se particularisent en outre, dans les solides ioniques *monovalents*, par la formation de nombreux centres associés à des déplacements d'ions négatifs (centres F et H) par l'action de photons assez énergiques (U, V, X, γ) ou d'électrons. Le mécanisme de production de ces défauts, quoiqu'encore discuté dans ses détails, semble être dû à l'effet Varley : éjection d'un électron interne, qui transforme un ion négatif X^- en un atome neutre excité X_{exc} ; désexcitation de cet atome par effet Auger, qui produit un ion X^+ ; lors de ses vibrations, celui-ci se précipite vers un des ions X^- voisins. Cette collision localisée dans une direction dense des ions X^- du réseau, produit finalement une lacune d'ion négatif, et un ion X^+ interstitiel à quelque distance de la lacune. Ces deux défauts sont susceptibles de recapturer ultérieurement des électrons pour produire des centres F et H .

L'entropie de position des défauts atomiques permet d'autre part d'en obtenir des concentrations appréciables à hautes *températures*, au moins pour ceux dont les énergies de formation ne sont pas trop fortes. Des trempes permettent ensuite d'en conserver un nombre appréciable à basses températures.

En présence d'une atmosphère neutre, les charges associées aux défauts ponctuels, non « décorés » d'électrons ou de trous captés, nécessitent que des défauts de charges opposées soient produits en nombres comparables en moyenne dans des régions macroscopiques du cristal, et au moins loin de défauts (surfaces libres, joints intergranulaires, dislocations) qui peuvent eux-mêmes se charger. C'est ainsi que, comme on le sait, des lacunes des ions des deux signes apparaissent en concentrations égales dans les halogénures alcalins (paires de Schottky), tandis que, dans les halogénures d'argent où les ions positifs sont fortement polarisables donc plus faciles à mettre en position interstitielle, on observe des concentrations comparables de lacunes et d'interstitiels d'ions positifs (paires de Frenkel). En atmosphère oxydante ou réductrice, un excès de lacunes d'ions respectivement positifs ou négatifs se développe dans les halogénures alcalins. Enfin on sait qu'il en est de même si l'on incorpore dans le cristal des impuretés substitutionnelles de mauvaise valence. Un cas classique est celui des impuretés métalliques divalentes qui

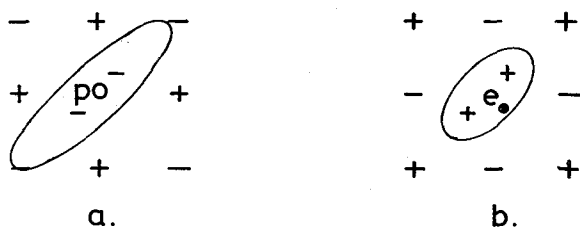


FIG. 3. — Centres associés à des interstitiels :

a) centre H

b) centre I de Farge.

produisent, pour compenser leur charge, un nombre égal de lacunes d'ions positifs. Après une trempe assez rapide, on peut espérer que toutes ces lacunes ne se sont pas associées à leurs impuretés. On peut alors penser pouvoir décorer ces impuretés divalentes par des électrons captés qui les transformeraient en impuretés monovalentes (Fig. 4). A ma connaissance, de tels

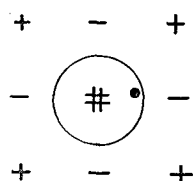


FIG. 4. — Electron capté sur une impureté métallique de substitution de trop forte valence.

centres colorés n'ont pas été identifiés jusqu'ici, mais un centre discuté à ce colloque a peut-être une telle origine.

Je ne parlerai pas des méthodes de production des défauts ponctuels par l'*écrouissage*, si ce n'est pour souligner d'abord que ce n'est pas une technique propre : on introduit en même temps de nombreuses dislocations et les défauts ponctuels ne sont vraisemblablement pas créés de façon uniforme. Mais, maintenant que les centres élémentaires des cristaux parfaits sont assez bien connus, il serait peut-être temps de reprendre et d'interpréter les phénomènes de coloration produits par *écrouissage*.

b) *Revenu. Agrégats.* — Si maintenant on chauffe un cristal à une température suffisante, les centres colorés évoluent en se transformant les uns dans les autres ou en disparaissant.

Cette disparition peut mettre simplement en jeu la perte de l'électron ou du trou capté. Le centre coloré est alors facilement reformé par photoexcitation des électrons. A des températures suffisantes, ce sont les défauts atomiques qui commencent à diffuser et à évoluer. Ce *revenu* des défauts ponctuels peut conduire à leur annihilation mutuelle (paires de Frenkel, où l'interstitiel retombe dans la lacune) ou à leur annihilation simultanée sur un défaut : surfaces libres, joints de grain, dislocations préexistantes ou boucles de dislocation formées par amas de lacunes (paires de Schottky). Il faut cependant remarquer que ce deuxième cas n'est possible qu'à très hautes températures, quand les lacunes des deux signes sont mobiles.

Ici aussi, on peut noter des processus de *revenu par agglomération* de défauts de même signe, particuliers aux solides ioniques, et qui se produisent quand les défauts d'un seul type sont mobiles. On peut distinguer

d'abord les *petits agrégats*, dont les prototypes sont les centres F_2^+ et F_2 (ou M) schématisés figure 5, et dont la

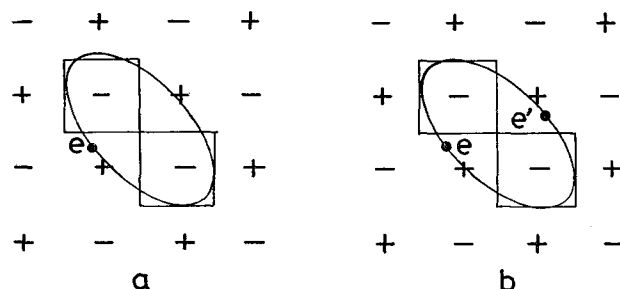


FIG. 5. — Centres associés à une bilacune d'ions négatifs :

- a) centre F_2^+
b) centre F_2 .

cinétique de formation est assez bien connue. Par contre la nucléation et la croissance des plus gros amas formés ultérieurement sont beaucoup moins bien connus. On peut citer par exemple les plaquettes métalliques d'épaisseur atomique et de diamètres de l'ordre de 100 Å formées vraisemblablement par rassemblement d'interstitiels Li dans le LiF irradié. Ces plaquettes ont été mises en évidence par M^{me} Lambert par des techniques de rayons X ; leur très faible taille conduit à une structure métallique très particulière qui a été observée en résonance électronique de M^{me} Taupin et en résonance nucléaire par Winter et par Charvolin. De tels gros amas sortent du domaine propre de ce colloque, mais leur nucléation devrait produire de façon transitoire de petits agrégats intéressants.

Il serait de toute façon intéressant de pouvoir suivre, par microscopie électronique en lame mince, la nucléation ou l'évolution de gros défauts — amas, dislocations — lors de l'irradiation. Dans les solides ioniques monovalents, cette observation est grandement gênée par la production par les électrons de défauts ponctuels qui, à la température d'observation, se rassemblent eux-mêmes en amas. Le mécanisme essentiel de production est un effet Varley, si bien que l'observation des solides ioniques divalents est beaucoup plus facile : les études devraient donc porter d'abord sur ce type de solides. On peut espérer d'autre part que, dans un microscope fonctionnant à très basse température, les défauts créés aient moins tendance à précipiter et gênent moins les observations.

2. STRUCTURE ÉLECTRONIQUE. — Il reste à discuter la structure électronique de ces centres, et son influence sur leur structure atomique. Nous considérerons d'abord les centres à électrons, et en particulier les

centres F . Nous les comparerons ensuite brièvement aux centres à trous.

a) Centres à électrons. Centre F . — Dans le centre F , le problème essentiel est le calcul de la fonction d'onde de l'électron capté. Cet électron est soumis à un potentiel fait de deux parties (Fig. 6) :

— Dans la cellule atomique de la lacune, l'électron est soumis au potentiel coulombien des autres ions du cristal, corrigé éventuellement par l'effet de la polarisation induite dans ces ions par la présence du centre. Ce potentiel de Madelung est extremum au centre de la cellule et peut être considéré comme constant ($r \leq a$, Fig. 6).

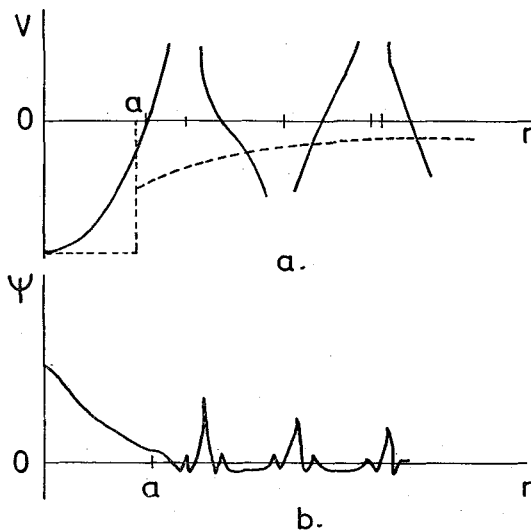


FIG. 6. — Electron capté du centre F :

- a) potentiel
b) fonction d'onde.

— Hors de la lacune, l'électron est soumis à la somme du potentiel périodique du réseau parfait et d'un potentiel perturbateur qui se réduit, à grande distance r , au potentiel coulombien dû à l'excès de charge positive de la lacune. Ce potentiel doit aussi être corrigé par l'effet de la polarisation induite dans le réseau par la présence du centre. Cet effet de *polarisation* peut être décrit, au premier ordre de perturbation, à l'aide d'une constante diélectrique qui dépend de la fréquence et de la longueur d'onde. La dépendance en fréquence dans la gamme $h\nu < w$ d'intérêt ici est connue au moins aux grandes longueurs d'onde, d'intérêt pour décrire la forme asymptotique du potentiel perturbateur (Fig. 7) : la portion ε_∞ indépendante de la fréquence est due à la polarisation électronique, qui suit instantanément les déplacements de l'électron ; la

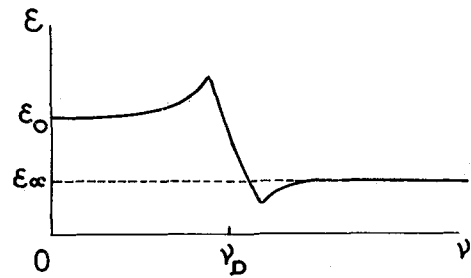


FIG. 7. — Dépendance en fréquence de la constante diélectrique à longueur d'onde infinie, pour un solide ionique.

portion $\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty$ due au déplacement des ions disparaît aux fréquences supérieures à la fréquence de Debye ν_D . Cette dépendance en fréquence a deux effets opposés sur l'orbite de l'électron :

— Le potentiel perturbateur statique moyen vu par l'électron est réduit, tout en gardant son caractère coulombien à grandes distances. Cet effet est lié à un déplacement statique des ions (Fig. 1) ; il tend à augmenter le rayon d'orbite.

— L'électron traîne à sa suite un nuage de phonons optiques qui représente la réaction retardée des ions à la présence de l'électron. Cette réaction retardée augmente la « masse effective » de l'électron. Cet effet tend à réduire le rayon d'orbite.

Tous calculs faits, on trouve que, dans l'état stable du centre F , l'électron a la majeure partie de sa fonction d'onde comprise dans la lacune, mais qu'une fraction appréciable déborde sur les ions avoisinants. Cette fonction a toute la symétrie (cubique) du site cristallin de la lacune. C'est l'équivalent de l'état $1s$ de l'atome d'hydrogène, auquel la fonction d'onde électronique ressemble dans la lacune ; dans le reste du cristal, la queue exponentielle de la fonction est modulée par une fonction ayant la périodicité du réseau et un caractère s essentiellement près de chaque noyau (Fig. 6b).

Dans son état stable, l'électron du centre F n'est donc pas bien représenté par un modèle continu où l'on décrit le cristal comme un milieu classique polarisable : il faut tenir un compte explicite et détaillé de la présence de la lacune. La situation est équivalente à celle des niveaux profonds dans les semiconducteurs.

On ne peut pas non plus admettre que l'électron est totalement localisé dans le puits de potentiel carré qui représente la lacune, même pour l'état stable du centre. Ce fait est confirmé directement par les couplages de contact de l'électron capté avec les noyaux de nombreux ions voisins, observés par méthode de double résonance Endor. Ces couplages sont rendus possibles

par la pénétration de l'électron dans le cristal avoisinant la lacune ; ils sont importants par suite des pics présentés sur chaque noyau par sa fonction d'onde (Fig. 6b).

L'absorption optique excite l'électron du centre vers un état qui possède les symétries du cube avec un plan d'inversion — l'équivalent des états np de l'atome d'hydrogène. Ces états, où l'électron est moins fortement lié, ont de plus grandes orbites. L'état $2p$ est encore assez localisé pour qu'on puisse expliquer au moins qualitativement les variations de la fréquence d'absorption optique $1s \rightarrow 2p$ avec le volume de la lacune en supposant l'électron totalement localisé dans un puits de potentiel carré schématisant la lacune (loi de Mollwo-Ivey pour la comparaison des différents halogénures alcalins et l'action de la pression). Il est clair cependant que la fonction d'onde de l'électron recouvre encore davantage les ions du cristal dans son état excité. Le défaut d'écran qui en résulte pour la lacune produit un déplacement des ions par polarisation plus fort que dans l'état stable. Le minimum d'énergie du système se placera donc à un déplacement ionique plus fort dans l'état excité (Fig. 8). Le centre ne pourra d'ailleurs pas occuper ces minima d'énergie : la quantification des vibrations de la polarisation ionique autour de sa valeur d'équilibre oblige le centre à avoir au moins une énergie de point zéro autour de cette position. Si nous admettons que, par suite de leur masse, les atomes ne bougent pas durant l'excitation électronique (principe de Frank Condon), nous voyons que la transition « sans phonon » entre les deux états de base E_{1s} et E_{2p} n'est possible que si les deux fonctions d'onde atomiques correspondantes, d'amplitudes de l'ordre de $A_1 A_2$ et $B_1 B_2$, se recouvrent. Dans les centres élémentaires comme le centre F , cette transition sans phonon est impossible : ceci montre que l'augmentation de polarisation ionique ab due à l'excitation électronique est nettement supérieure à son incertitude $A_1 A_2$ ou $B_1 B_2$ dans les deux états. Des raies sans phonon s'observent seulement dans des centres plus complexes, où l'écran est moins complet dans l'état de base, donc les variations de polarisation plus faibles (centre F_2^+ par exemple). On observera au contraire nettement une ou plusieurs raies larges d'absorption correspondant aux transitions du type α (Fig. 8). Une fois excité, ce centre perd en général son énergie de vibration pour retomber en E_{2p} par émission de phonons. Une transition optique β est alors possible, avec émission d'une ou plusieurs raies larges de fluorescence dont la fréquence $h\nu_\beta$ est nettement inférieure à la fréquence $h\nu_\alpha$ d'absorption (déplacement de Stokes). Les centres élémentaires ont également des déplacements de Stokes plus forts que certains centres complexes.

L'analyse des effets vibroniques dans l'absorption et la fluorescence soulève en fait des problèmes complexes qui ne sont pas mis en lumière par le diagramme classique de la figure 8 :

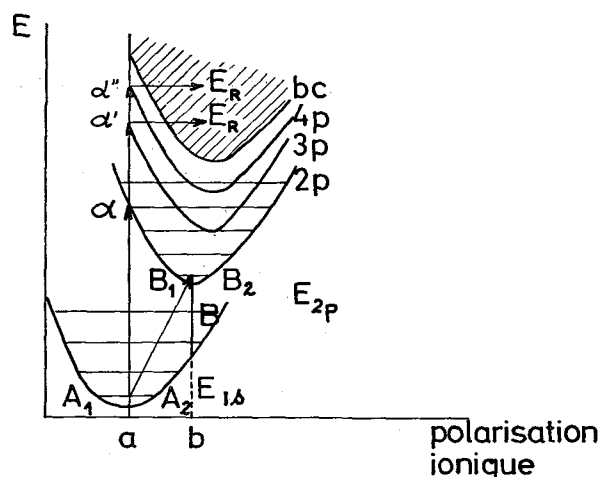


FIG. 8. — Diagramme de configuration pour le centre F .

— L'énergie du centre peut être sensible à d'autres modes de distorsion que la polarisation ionique de symétrie cubique envisagée. Il est clair en particulier que si l'état électronique est dégénéré, il peut gagner de l'énergie par une distorsion qui lève cette dégénérescence. L'étude d'un tel effet Jahn Teller statique doit utiliser une nouvelle coordonnée de configuration, qui ferait sortir le point représentatif du plan de la figure 8 ; l'étude d'un effet Jahn Teller dynamique, où la distorsion accompagne l'électron dans son mouvement orbital, serait encore plus délicate. Des effets Jahn Teller statique ou dynamique sont à attendre en principe dans des états relaxés comme l'état E_{2p} du centre F . Il ne semble pas qu'il y ait aucune évidence d'un effet statique dans ce cas.

— Le mode de vibration de polarisation ionique n'est pas unique : il y en a en fait une infinité, dont les fréquences caractéristiques (ou les courbures) couvrent le spectre des fréquences atomiques du cristal parfait et, parfois, certaines fréquences supplémentaires correspondant à des états de vibration liés. De plus ces modes de vibration ne sont pas ceux du cristal parfait, mais doivent tenir compte de la perturbation due au centre. Les états vibroniques observés correspondent en général à des pics de la distribution des phonons du cristal parfait, mais pas toujours et pas à tous les pics ; de plus les raies dues à la quantification des phonons sont toujours larges sauf celle sans phonons.

— Les calculs d'absorption supposent que les états vibroniques excités ont un temps de vie infini. Ils se désexcitent en fait assez rapidement par émission de phonons. Cette désexcitation n'a pas donné lieu à des études poussées jusqu'ici. Une telle étude est liée, dans une certaine mesure, à celle de la validité de l'approximation adiabatique de Frank Condon.

— Il doit exister un état cubique excité, analogue à l'état $2s$ de l'atome d'hydrogène et d'énergie voisine de l'état $2p$. Si l'état $2s$ est plus stable que l'état $2p$, l'électron excité dans l'état $2p$ aurait une certaine probabilité de passer dans l'état $2s$. La transition directe $2s \rightarrow 1s$ étant interdite, l'état excité $2s$ serait métastable, avec un temps de vie long à basse température, où les désexcitations à l'aide des phonons ou par excitation thermique vers l'état $2p$ seraient gelées. Une telle situation a parfois été suggérée pour le centre F . Il ne semble pas actuellement qu'elle ait lieu.

Des transitions optiques vers des états plus excités $3p, 4p \dots$ sont à attendre. Comme le potentiel est coulombien à grandes distances, on s'attend à une infinité d'états liés np , produisant une infinité de raies d'absorption dont l'espacement et l'amplitude décroissent quand on se rapproche de la limite de la bande de conduction E_c , de telle façon que l'intensité d'absorption tende vers une valeur finie à E_c , puis décroisse avec l'énergie (Fig. 9). Deux effets concomitants rendent ces transitions peu marquées :

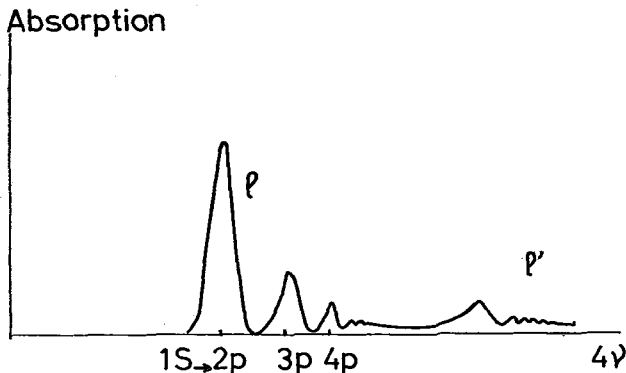


FIG. 9. — Absorption optique attendue pour un centre F (schématique).

— Du fait de leurs plus grandes orbites, ces états polarisent fortement le réseau. On est dans une situation analogue à celle des états d'impuretés hydrogénoïdes de grandes orbites dans les semiconducteurs. Il en résulte, pour l'électron, une faible probabilité de présence dans le volume de la lacune où se trouve l'essentiel de l'état fondamental $1s$, et une force d'oscil-

lateur faible, en fait négligeable pour $n > 4$ dans le centre F .

— L'excitation optique α' ou α'' produit des états excités non relaxés, dont l'énergie peut être supérieure aux énergies relaxées des états excités supérieurs et du continuum. On sait que de tels états ne peuvent coexister sans se mélanger. Par ce mélange, l'électron excité dans un état non relaxé $3p$ a une probabilité finie de passer dans un état relaxé E_R de même énergie dans le continuum : les excitations vers ces états excités peuvent donc être photoconductives. De plus, en limitant le temps de vie de ces états, le mélange élargit les raies d'absorption correspondantes. Il est probable que les raies d'absorption K et L associées au centre F sont dues, au moins en partie, à des transitions vers des états excités de ce genre.

Nous pouvons noter que des séries d'absorption infinies analogues sont à attendre à plus fortes fréquences, en dessous d'extrema de bandes supérieures. Ces séries doivent cependant être très faibles en intensité, et fortement élargies par le mélange direct en l'absence même de relaxation, des états liés au centre avec des états conductifs de même énergie qui correspondent à d'autres parties du système de bandes (Fig. 9, 10).

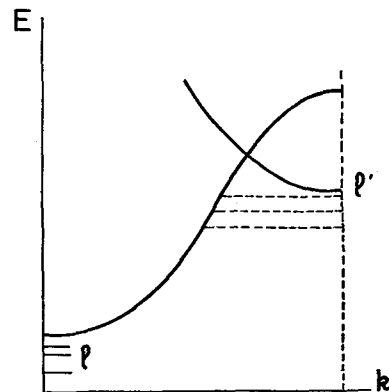


FIG. 10. — Exemples d'états l et d'états liés virtuels l' associés à des extrema de la structure de bande (schématique).

Enfin toute l'analyse faite ici a trait aux centres F dans leur état stable. Le déplacement par diffusion de ces centres met en jeu le passage par une position de col (Fig. 11), où l'électron capté doit visiblement avoir une configuration et une énergie différentes. On peut certainement supposer que, lors de cette diffusion, l'électron suit adiabatiquement le déplacement des ions et reste

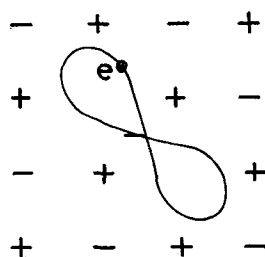


FIG. 11. — Structure du centre F dans sa position de col (état $2p$).

dans un état fondamental, qui est vraisemblablement un état $2p$. Mais son changement d'énergie fournit une contribution mal connue à l'énergie de déplacement du centre. La structure électronique des centres dans leur position de col n'a, semble-t-il, pas été considérée jusqu'ici.

b) *Centres à trous.* — En ce qui concerne les centres à trous, et en particulier le centre V_F , on peut noter les deux différences suivantes avec les centres à électrons :

— Le trou positif ne peut exister que dans une région de l'espace où se trouve un ion. Ainsi, dans le centre V_F , la région centrale de la lacune est pratiquement interdite au trou (cf. Fig. 6a).

— L'effet du potentiel périodique du réseau peut se représenter par une « masse effective » plus forte pour le trou que pour l'électron, du fait que le trou est essentiellement déduit d'une bande de valence étroite tandis que l'électron est déduit de la large bande de conduction (Fig. 1). Le trou positif a de ce fait une vitesse plus faible qui facilite son couplage avec la polarisation ionique. Ces deux effets contribuent à réduire le rayon d'orbite de sa fonction d'onde.

On s'attend ainsi finalement à ce que, dans l'état stable du centre, le trou positif soit fortement localisé sur les ions négatifs premiers voisins de la lacune. On explique aussi que le trou se localise nettement sur deux des ions préférentiellement (Fig. 2b) : on peut considérer que le trou s'est autocapté dans le nuage de phonons optiques qu'il a créé. Une autocapture analogue existe pour le trou isolé dans le cristal parfait (centre V_K).