

К главе 1 данной книги

1. Какие комбинации s , p - и d -орбиталей ведут к гибридным орбиталям, имеющим следующие симметрии:

- а) одинаковая связь двух ближайших соседей в линейной цепочке,
- б) одинаковая связь трех ближайших соседей в плоскости,
- в) одинаковая связь шести ближайших соседей, упорядоченных октаэдрически?

2. Получите общее квантовомеханическое выражение для резонансной энергии в (1.28).

3. Разложение постоянной Маделунга, в котором суммируются вклады от ближайших, следующих за ближайшими и т. д. соседями, сходится очень медленно. Более удобен следующий метод. Комбинируют ячейки, каждая из которых имеет равный нулю суммарный заряд, например, отрицательный центральный ион ($-e_1$) и $+e_1/v$ заряды каждого из v ближайших соседей. К вкладу такой ячейки тогда добавляют вклады от ближайших, следующих за ближайшими и т. д. идентичных соседних ячеек;

а) покажите сходимость этим методом, сравнивая оба ряда для линейной цепочки с чередующимися положительными и отрицательными зарядами. Постоянная Маделунга для этого случая есть $A = 2 \ln 2 = 1,3863$,

б) рассчитайте постоянную Маделунга для решетки NaCl [трехмерное обобщение а)].

4. Сходство многих свойств между соединениями III—V и элементами IV группы может быть усмотрено в том факте, что в обоих случаях в среднем имеются в распоряжении четыре валентных электрона, чтобы формировать ковалентные или смешанные ковалентно-ионные связи с четырьмя ближайшими соседями.

а) Продолжите схему



Какие группы других бинарных и тройных соединений с координационным числом четыре могут быть образованы? Какие качественные критерии стабильности таких соединений могут быть установлены?

б) Соединения III—VI, такие как In_2Te_3 , также могут быть включены в эту последовательность. Пространственная группа «упорядоченного» In_2Te_3 такая же, как пространственная группа соединений III—V. Как выглядит решетка? Какова элементарная ячейка?

в) Другие критерии твердых тел с локализованными связями таковы $n_v/n_a + b_a = 8$ или $n_v/n_a + b_a - b_c = 8$, где n_v — число валентных электронов на структурную единицу, n_a — число анионов, b_a и b_c — числа анион-анионных и катион-катионных связей. Найдите примеры таких твердых тел.

Правила этого рода часто используют, чтобы предсказывать полупроводниковые свойства бинарных и тройных соединений [см., например, *Е. Музер, В. В. Пирсон: Прогресс в полупроводниках*, т. 5 (Хейвуд, Лондон, 1960), с. 105].

К главе 2 данной книги

1. Рассмотрите одномерную цепочку потенциалов с одним дефектом. Примените метод, использованный в связи с рис. 25, чтобы показать отщепление уровня энергии от энергетической зоны, как на рис. 17. Используйте метод ЛСАО (тесной связи).

2. Рассчитайте линейный и квадратичный эффект Зеемана для примесного электрона, предполагая изотропной и параболической зону проводимости. Используйте приближение эффективной массы и пренебрегите спинным (орбитальный эффект Зеемана).