

волновые функции связывающего и антисвязывающего состояний:

$$\psi = [\psi_A^{\text{at}}(1) + \psi_B^{\text{at}}(1)][\psi_A^{\text{at}}(2) + \psi_B^{\text{at}}(2)] + \\ + \alpha [\psi_A^{\text{at}}(1) - \psi_B^{\text{at}}(1)][\psi_A^{\text{at}}(2) - \psi_B^{\text{at}}(2)]. \quad (1.21)$$

При  $\bar{\lambda}_1 = \bar{\lambda}_2 = (\alpha + 1)/(\alpha - 1)$  выражения (1.21) и (1.9) идентичны.

### § 3. Локализованные и делокализованные связи

В предыдущем параграфе локализованная ординарная связь между двумя ближайшими соседями в кристаллической решетке рассматривалась по аналогии с двухатомной молекулой. Переход к кристаллической решетке можно осуществить путем перехода к многоатомным молекулам и присоединением все большего числа атомов вплоть до образования кристаллической решетки.

И в этом случае можно исходить из любого приближенного метода: МО или VB. Однако прежде чем рассматривать этот вопрос, расширим множество пробных функций, добавив к атомным орбиталям так называемые гибридные функции. В основе того, что до сих пор в качестве пробных функций использовались атомные орбитали, лежали физические соображения. В принципе нет фундаментальных доводов против использования любой другой функции координат электрона. Одной из возможностей было бы, например, использование в (1.6)–(1.8) вместо отдельных атомных орбиталей линейной комбинации атомных орбиталей одного атома с выбираемыми позже коэффициентами. В случае двухатомной молекулы для этого не было никаких побуждающих причин. Если же рассматривать одновременно связи атома со всеми его ближайшими соседями, то в качестве следующего аспекта, который необходимо учесть, выступает пространственная симметрия упорядочения. В этом случае удобно использовать в пробной функции комбинации атомных орбиталей, которые согласуются с симметрией упорядочения ближайших соседей относительно определенного атома. Наиболее известным примером являются  $sp^3$ -гибридные функции атома углерода в решетке алмаза. Из  $2s$ -орбитали и трех  $2p$ -орбиталей строятся следующие четыре линейные комбинации:

$$\sigma_1 = \frac{1}{2}(s + p_x + p_y + p_z), \quad \sigma_2 = \frac{1}{2}(s + p_x - p_y - p_z), \\ \sigma_3 = \frac{1}{2}(s - p_x + p_y - p_z), \quad \sigma_4 = \frac{1}{2}(s - p_x - p_y + p_z). \quad (1.22)$$

Каждая из этих четырех функций ориентирована преимущественно по направлению к одному из четырех углов тетраэдра соответственно (рис. 3).

Вместе они обладают, следовательно, свойствами симметрии, которые требуются упорядочением ближайших соседей в решетке алмаза. Следует добавить, что  $sp^3$ -функции пары ближайших соседей