

перекрываются гораздо сильнее, чем любая другая комбинация атомных орбиталей. Этими свойствами обусловлена возможность использования гибридных функций (называемых также валентными состояниями) в пробных функциях наряду с атомными орбиталями. Приведем некоторые важные гибридные функции и их симметрию: sp^2 (тригональная плоская), sp^3 (тетраэдрическая), d^2sp^3 (октаэдрическая), d^4sp^3 (додекаэдрическая).

Рассмотрим теперь *МО-метод*. Переход от описания атома к описанию двухатомной молекулы состоит в добавлении второго (экра-

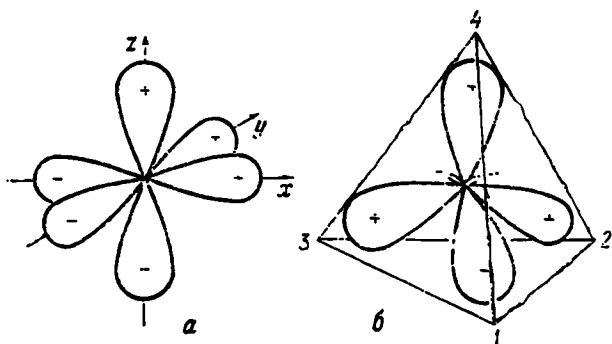


Рис. 3. Если, согласно (1.22), s -функция комбинируется с тремя p -функциями, (а), то получаются четыре sp^3 -гибридные функции (б), которые простираются преимущественно в направлении четырех осей тетраэдра 1—4.

ированного) ядра в описывающий взаимодействие член одноэлектронного уравнения Шредингера. Было бы логичным приближением рассмотреть соответствующие одноэлектронные уравнения для движения электрона в поле N ядер, причем в предельном случае твердого тела, с которым мы имеем дело, N охватывает совокупность всех ядер кристалла. Это в точности постановка одноэлектронной задачи *зонной модели*: рассматриваемый электрон движется в поле, обусловленном всеми ионами (которое дополнено включением частей электрон-электронного взаимодействия). Функция Блоха представляет тогда собой не что иное, как молекулярную орбиталь «молекулы — кристалла». В такой формулировке МО-метода связь является *делокализованной*. Каждая молекулярная орбиталь простирается через весь кристалл. Расщепление атомной орбитали на связывающую и антисвязывающую молекулярные орбитали в случае двухатомной молекулы соответствует тогда расщеплению в зону с N состояниями. Каждую зону (пока нет гибридизации) можно сопоставить атомным орбиталям атомов решетки (см. ч. I, рис. 29).

Это описание, очень важное в случаях одноэлектронного приближения и рассмотрения свойств твердых тел в предыдущих главах