

Четвертая группа, наряду со связями Ga — Se, содержит p_z -орбитали ионов Se, которые дают вклад в связь между слоями решетки. Пятая группа содержит преимущественно связи, образованные из p_x - и p_y -орбиталей Se. Если сложить все эти распределения плотности вместе, чтобы получить суммарное распределение электронов по всем валентным подзонам [рис. 6, e], ясно видно образование электронных

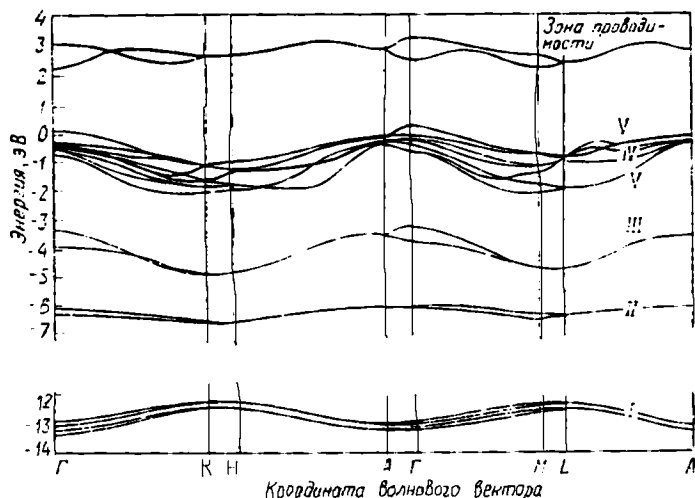


Рис. 5. Зонная структура GaSe вдоль важнейших осей симметрии зоны Бриллюэна гексагональной решетки (см. ч. I, рис. 28, e). Показаны пять групп подзон в валентной зоне и самая нижняя группа зон проводимости. [По Шлютеру (Nuovo Cim., 1973, v. 13B, p. 313).]

связей между атомами решетки — характерную особенность ковалентной связи. Видна, однако, и концентрация распределения электронов вокруг ионов решетки, которая обнаруживает примешивание ионных состояний. В такой общей связи могут быть определены ковалентная и ионная составляющие, рассчитан эффективный ионный заряд e^* . В этом примере соответствие между типом связи и зонной моделью, а также основные моменты отличия очевидны.

§ 5. Диэлектрическая теория ковалентной связи

Рассмотрим еще раз проблему химической связи, но с другой точки зрения. Считаем при этом решетку каркасом положительно заряженных ионов и ставим вопрос о том, как совокупность валентных электронов экранирует заряды ионов.

В случае металла можно рассматривать валентные электроны как газ свободных электронов. Мы уже рассматривали экранирование возмущающего потенциала $V_a(r, t)$ в ч. I, § 13. Там было