Если кристалл строится из экранированных таким образом ионов, то следует ввести дополнительные отрицательные заряды для экранирования остающегося остаточного заряда и, тем самым, для поддержания нейтральности кристалла в целом. Диэлектрическая теория ковалентной связи постулирует, что эти экранирующие заряды содержатся *в локализованных* связях. Наряду с экранированными ионами вводятся поэтому *заряды связей*, которые обычно принимают сконцентрированными в точке посередине линии, соединяющей два ближайших соседа. Если z — число ближайших соседей, то каждая электронная связь содержит заряд связи $2Ze/z\varepsilon(0)$.

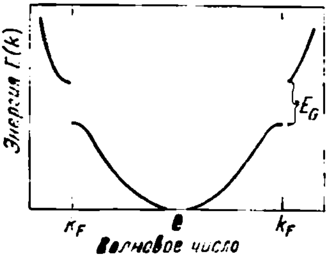

Рис. 7. Зонная структура в изотропной модели Пенна согласно (1.33)

Эта модель имеет многочисленные приложения. Мы ограничимся здесь важнейшим по отношению к проблеме связи: возможностью нового определения ионности локализованной связи. Относительно других приложений см. ссылки, приведенные в заключительной части этого параграфа.

Для того чтобы вообще иметь возможность обсуждать ионность связи, прежде всего мы должны распространить модель Пенна на твердые тела с двумя различными ионами в ячейке Вигнера — Зейтца. Модель Пенна представляет собой распространение на трехмерный случай одномерного результата. Начнем, поэтому, с одномерного выражения для потенциала. Пусть «ячейка Вигнера — Зейтца» длины l содержит два иона на расстоянии 2τ:

$$V(x) = V_1(|x-\tau|) + V_2(|x+\tau|). \qquad (1.37)$$

Фурье-образ потенциала имеет тогда вид

$$V(q) = \frac{1}{2}[V_1(q) + V(q)]\cos q\tau + \frac{i}{2}[V_1(q) - V_2(q)]\sin q\tau, \qquad (1.38)$$

где $V_{1,2} = \frac{2}{l}\int V_{1,2}(x)\exp(-iqx)\,dx$. $V(q)$ — комплексная величина. Действительная ее часть есть среднее значение потенциала, а мнимая является мерой различия между двумя потенциалами.

Перенесем это на трехмерную модель Пенна. Тогда, согласно (1.32), абсолютная величина $V(\mathbf{K}_m)$ идентифицируется с половиной межзонного расстояния E_G. Поскольку V теперь комплексная величина, положим соответственно

$$2|V(\mathbf{K}_m)| = E_G = |E_c + iC| = \sqrt{E_c^2 + C^2}. \qquad (1.39)$$

Таким образом, расстояние между зонами складывается из «ковалентной» составляющей E_c и составляющей, обусловленной разли-