

чием двух атомных потенциалов. Последнюю можно использовать в качестве меры ионной составляющей связи.

Для применения этого попытка необходимо установить связь между идеализированной моделью Пенна и зонной моделью полупроводника, связь в котором рассматривается. Первой трудностью здесь является то, что энергетическая полоса *) в зоне Бриллюэна твердого тела содержит столько состояний (каждое из которых может заполняться двумя электронами с противоположными спинами), сколько ячеек Вигнера — Зейтца имеет кристалл. Мы должны, однако, иметь возможность разместить все валентные электроны в энергетической полосе E_+ модели Пенна. Переходим поэтому к схеме расширенных зон и собираем вместе (с $2n$ валентными электронами на ячейку Вигнера — Зейтца) первые n зон Бриллюэна. Эта комбинированная зона известна под названием зоны Джонса. Для структуры алмаза зона Джонса содержит первые четыре зоны Бриллюэна. Она показана на рис. 8. Полупроводники с тетраэдрическим расположением связей со структурой ципковой обманки или вюрцита имеют такую же зону Бриллюэна и, следовательно, такие же зоны Джонса. Зона Джонса этих полупроводников имеет приблизительно сферическую форму. Вблизи поверхности структура энергетических полос (развернутая на зону Джонса) имеет сходство со структурой в случае свободных электронов. Расстояние между энергетическими полосами в различных точках поверхности также приближенно одинаковое. На рис. 9 приведен один из примеров. Таким образом, можно определить параметр E_g в модели Пенна как среднее расстояние между энергетическими полосами фактической энергетической зонной структуры на поверхности зоны Джонса.

Если поступить так, то прежде всего обнаружим, что (1.35) достаточно хорошо дает значения статической диэлектрической проницаемости для простых полупроводников: алмаза, Si, Ge, α -Sn. Все другие полупроводники с тетраэдрическим расположением связей можно получить из полупроводников IV группы периодической системы замещением половины атомов решетки на $(4 - n)$ -валентные атомы, а второй половины — на $(4 + n)$ -валентные атомы (III—V, II—VI, I—VII-соединения). Ввиду различия ближайших

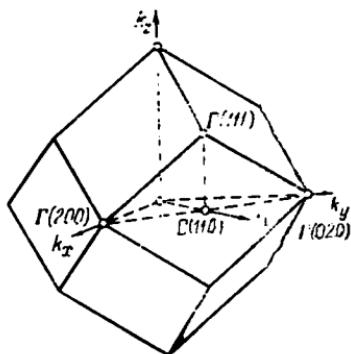


Рис. 8. Зона Джонса для структуры алмаза

*) В отечественной литературе термин «зона» относится как к энергетической зоне (band), так и зоне Бриллюэна (zone). Там, где эти понятия соседствуют, во избежание путаницы воспользуемся для термина «band» его изначальным переводом «энергетическая полоса» (Примеч. пер.).