

соседей эти соединения имеют смешанную ковалентно-ионную связь. Экспериментальные результаты показывают, что межзонное расстояние E_c при таком типе связи больше, чем у изоэлектронных *) элементов. Согласно (1.39) можно рассматривать квадрат

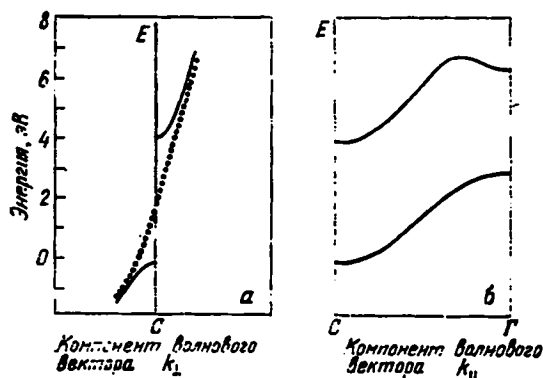


Рис. 9. Энергетические зоны кремния в окрестности точки C на поверхности зоны Джонса (см. рис. 8): a — перпендикулярно поверхности, b — вдоль поверхности. (По Хейне и Уэйру [101.24].)

среднего расстояния между энергетическими зонами как сумму квадратов межзонного расстояния E_c ковалентно связанного изоэлектронного элемента и параметра C . Таким образом, в качестве количественного определения *ионности связи* имеем

$$f_i = \frac{C^2}{E_c^2 + C^2}, \quad 0 \leq f_i \leq 1. \quad (1.40)$$

E_c известно по соответствующему простому полупроводнику, E_c следует из (1.35). Следовательно, C и f_i могут быть определены для каждого из полупроводников с тетраэдрическим расположением связей.

Определяемая формулой (1.40) ионность позволяет провести значительно более точное различие между отдельными полупроводниками с тетраэдрическим расположением связей, чем, например, ионности, получаемые по Поллигу через электроотрицательности, которые часто лишь грубо приписывают группе полупроводников одинаковую ионность.

Представленная в этом параграфе теория позволяет сделать как количественные, так и полумпирические утверждения о полных энергиях связи, кристаллических структурах, энергиях ионизации и параметрах зонной модели именно для полупроводников с тетраэдрическим расположением связей. Теорию можно распространить и на другие классы полупроводников и диэлектриков, но мы не будем здесь этого делать и отсылаем читателя к [94]. В качестве примера полученных там результатов на рис. 10 изображена ди-

*) С одинаковым числом электронов. (Примеч. пер.)