

Эмпирические оценки Δ показывают, что для большинства связей Δ может быть представлена в виде

$$\Delta \propto (x_A - x_B)^2, \quad (1.29)$$

где x_A и x_B — числа, которые могут быть приписаны каждому элементу (*электроотрицательности*). Различие в электроотрицательностях определяет отклонение связи от ковалентного предельного случая и, следовательно, ионную составляющую связи.

Другой возможный способ определения ионности предоставляет концепция *эффективного ионного заряда* e^* . Рассмотрим в качестве примера связь в полупроводнике GaAs, кристаллизующемся в решетку цинковой обманки. Эта решетка отличается от решетки алмаза только чередованием заполнения узлов решетки атомами двух разных типов. От каждого атома Ga исходит по четыре связи к атомам As и наоборот. Ga и As находятся в решетке в виде ионов Ga^{3+} и As^{3-} . Этот положительный заряд компенсируется восемью валентными электронами каждой пары Ga — As. В чисто ковалентной связи по половине заряда электронной пары каждой связи приписывается каждому из двух соседей. В случае четырех связей это означает, что атомы Ga имеют однократный отрицательный заряд, а атомы As — однократный положительный заряд: Ga^-As^+ . В предельном случае ионной связи три валентных электрона каждого атома Ga переходят к атомам As: $Ga^{3+}As^{3-}$. При переходе от ковалентной связи к ионной эффективный заряд e^* атома Ga возрастает от -1 до $+3$.

Преимущество этого описания в том, что оно выявляет специальный случай — *нейтральную связь*. В нашем примере она определяется равенством $e^* = 0$, т. е. связи поляризованы к атомам As настолько, что ассоциирующиеся с атомами Ga и As области, приблизительно определяемые ковалентными радиусами атомов Ga и As, несут каждая нулевой заряд.

Определение ионности химической связи важно для систематического сравнения свойств изоляторов и полупроводников. Необходимо, однако, кратко остановиться на препятствиях, существующих при количественном определении ионности. Само понятие ионности неоднозначно уже по своему определению. Отношение b/a [см. (1.27)] является привлеченной из теоретической модели величиной, которая едва ли может коррелировать с другими параметрами, хотя и делались попытки получить, исходя из значений b/a , разности электроотрицательностей и эффективные ионные заряды. Проблема заключается в том, что x_A может быть определена только весьма приблизительно, а разность в значениях x_A часто имеет большие пределы погрешности, что, например, делает невозможным установление последовательности возрастания ионности в пределах группы сходных твердых тел. Поэтому в следующем параграфе будет рассмотрено дополнительное определение ионности связи.