

Определение эффективного заряда  $e^*$  различными методами также проблематично. Эффективные заряды можно определить по распределению плотности электронов. Из данных рефлексометрии в далекой инфракрасной области спектра можно определить разность между статической и высокочастотной диэлектрическими проницаемостями, а из нее получить эффективный ионный заряд (см. ч. II, § 77). Здесь, однако, сразу же возникает трудность, заключающаяся в том, что эти измерения означают вмешательство в распределение заряда и что поэтому следует делать различие между *статическим* эффективным ионным зарядом (единственно здесь нас интересующим) и *динамическим* эффективным ионным зарядом. Они могут существенно различаться.

Взаимосвязь между типом связи и кристаллической структурой является важной проблемой. Такая взаимосвязь определенно должна иметь место. Голдшмидт ранее уже привлек *ионные радиусы* к предсказанию существования решеток цинковой обманки, вюрцита, NaCl и CsCl в твердых телах с преимущественно ионной связью. Согласно этим предсказаниям решетки с отношением радиусов катиона и аниона  $r_c/r_a < 0,22$  нестабильны, при  $0,22 < r_c/r_a < 0,41$  должны быть предпочтительнее решетки цинковой обманки и вюрцита, при  $0,41 < r_c/r_a < 0,72$  должна доминировать решетка NaCl, а при превышении значения 0,72 — решетка CsCl. Эти правила часто хорошо выполняются для ионных решеток, но плохо воспроизводят также соотношения во многих типичных полупроводниках. К этому вопросу мы еще вернемся в следующем параграфе.

Ионность имеет важное значение также и в других вопросах кристаллообразования. Так, возможность образования *смешанного кристалла*\*) двух фаз зависит не только от примерного равенства постоянных решеток обеих фаз. Должно также быть их соответствие в ионной составляющей связи, для того чтобы избежать сильных искажений решетки. Так, например, нет непрерывного ряда смешанных кристаллов между ковалентно связанным Ge и GaAs, тогда как он существует между GaAs и GaP.

Мы закончим это рассмотрение исследованием соотношения между химической связью и полупроводниковыми свойствами, которые до сих пор описывались посредством зонной модели. Важнейшим параметром является при этом ширина запрещенной зоны  $E_g$ , т. е. энергия, необходимая для перевода электрона из валентной зоны в зону проводимости. В картине химической связи — это энергия, необходимая для вырывания электрона из локализованной связи. Это дает возможность качественно объяснить тенденции в величине значений  $E_g$  различных полупроводников. Так, уменьшение прочности связи в гомологической последовательности алмаз — Si — Ge — серый цинк происходит параллельно уменьшению величин запрещенной зоны. Из рис. 39 (ч. I, § 24) видим, однако, что

\*) Твердого раствора. (Примеч. пер.)