

deriváciou vzorca (12) podľa času. Po vykonaní tejto operácie dostaneme:

$$a_n = \frac{dv_n}{dt} = \frac{2\pi}{h} \frac{d}{dk} \frac{dE_n(k)}{dt}$$

$\frac{dE_n(k)}{dt}$  znamená výkon dodaný elektrónu silovým poľom. Namiesto  $\frac{dE_n(k)}{dt}$  môžeme písať  $v_n F$ , kde  $F$  je vonkajšia sila účinkujúca na elektrón. Opätovným použitím vzorca (12) dostaneme:

$$a_n = \frac{2\pi}{h} \frac{d}{dk} v_n F = \frac{4\pi^2}{h^2} \frac{d^2 E_n(k)}{dk^2} F$$

odkiaľ vyplýva:

$$F = \frac{1}{\frac{4\pi^2}{h^2} \frac{d^2 E_n(k)}{dk^2}} a_n \quad (13)$$

Vzorec (13) môžeme interpretovať ako *Newtonov zákon sily*, ak  $\frac{4\pi^2}{h^2} \frac{d^2 E_n(k)}{dk^2}$  budeme uvažovať ako recipročnú efektívnu hmotnosť elektrónu v kryštáli. Získali sme dôležitý poznatok, ktorý znie:

*Elektrón v kryštáli sa správa voči pôsobeniu vonkajších síl ako častica s efektívnou hmotnosťou*

$$m^* = \frac{1}{\frac{4\pi^2}{h^2} \frac{d^2 E_n(k)}{dk^2}} \quad (14)$$

V trojrozmernom kryštáli efektívna hmotnosť elektrónu je tenzorovou veličinou, lebo musí v sebe charakterizovať anizotropné vlastnosti poľa kryštálu.

**18.7. Periodické hraničné podmienky.** Doteraz sme uvažovali nekonečne dlhý kryštál. V skutočnosti máme do činenia s konečným kryštálom. Uvažujeme kryštál, ktorý má  $N + 1$  atómov a dĺžku  $L = Na$ . Ak takéto kryštály pospájame za sebou, dostaneme nekonečne dlhý kryštál, ktorého vlastnosti sa budú po dĺžkach  $L$  opakovať. Všetky výsledky, ku ktorým sme doteraz dospeli, zostanú platné, ak vlnová funkcia  $\psi(x)$  bude periodická funkcia s periódou  $L$ . Toto tvrdenie vedie k nasledujúcej hraničnej podmienke

$$\psi_{nk}(x) = \psi_{nk}(x + L)$$

alebo

$$e^{ikx} u_{nk}(x) = e^{ikx} \cdot e^{ikNa} u_{nk}(x + L)$$

odkiaľ

$$1 = e^{ikNa}$$

To bude splnené, ak

$$k = \frac{2\pi n}{Na}$$

kde  $n$  je celé číslo. Pretože  $k$  sa mení v intervale  $(-\pi/a, +\pi/a)$ ,  $n$  sa bude meniť v intervale  $(-N/2, +N/2)$  vrátane nuly. Ak uvážime i vlastný spin elektrónu (pozri čl. 17.5), tak získaný poznatok znie:

*V každom páse existuje počet kvantových stavov, ktorý sa rovná dvojnásobnému počtu atómov v kryštáli (v trojrozmernom kryštáli treba nahradiť atómy elementárnymi bunkami).*

**18.8. Charakteristické vlastnosti elektrónov v blízkosti horného a dolného okraja pása.** Uvažujeme kryštál, ktorý sa skladá z jednomocných atómov. Pri teplote 0 K valenčné elektróny zaplňajú jednotlivé stavy v najnižšom páse od najnižšej energie po energiu, ktorá leží v polovici pása (rešpektuje sa Pauliho vylučovací princíp). Keď je kryštál zložený z dvojmocných atómov, potom sa počet elektrónov rovná dvojnásobnému počtu atómov, takže pri teplote 0 K elektróny zaplnia celý pás. Tento pás sa nazýva valenčný pás. Ďalší vyšší pás sa nazýva vodivostný pás. Dôvod k takémuto názvu bude jasný neskôr. Ak šírka zakázaného pása medzi valenčným a vodivostným pásom nie je príliš veľká, tak pri nenulovej teplote môžu elektróny tepelnými zrážkami získať dostatočnú energiu na preskok z valenčného do vodivostného pása. Je zrejmé, že preskoky budú vykonávať elektróny, ktoré sa nachádzajú v úzkom pásiku v hornom okraji valenčného pása a po preskoku budú obsadzovať úzky pásik v dolnom okraji vodivostného pásu. Preto nás budú zaujímať vlastnosti elektrónov nachádzajúcich sa v uvedených pásikoch. Energia elektrónov vo valenčnom a vodivostnom páse je podľa vzťahu (18.5.24) daná vzorcami

$$E_v(k) = a_v - b_v \cos ka \quad (1)$$

$$E_c(k) = a_c - b_c \cos ka \quad (2)$$

kde  $v$  označuje valenčný pás a  $c$  vodivostný pás. Efektívne hmotnosti elektrónov počítané podľa vzorca (18.6.14) sú nasledovné

$$m_v = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 b_v \cos ka}, \quad m_c = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 b_c \cos ka} \quad (3ab)$$

Ich priebehy sú znázornené na obr. 18.4. Podľa vzorcov (1), (2) a (3ab) vyplýva, že pre ( $k = 0$ ) sa

$$E_{v,\min} = a_v - b_v$$

$$E_{c,\min} = a_c - b_c$$