

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 uvažíme 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 pásu. 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 pásu (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 pásu 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 pásu. Je zrejmé, že preskoky budú vykonávať elektróny, ktoré sa nachádzajú v úzkom pásiku v hornom okraji valenčného pásu 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

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

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

$$m_v(k=0) = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 b_v a^2}; \quad m_c(k=0) = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 b_c a^2} \quad (4ab)$$

a pre $k = \pm \frac{\pi}{a}$ sa

$$E_{v,\max} = a_v + b_v$$

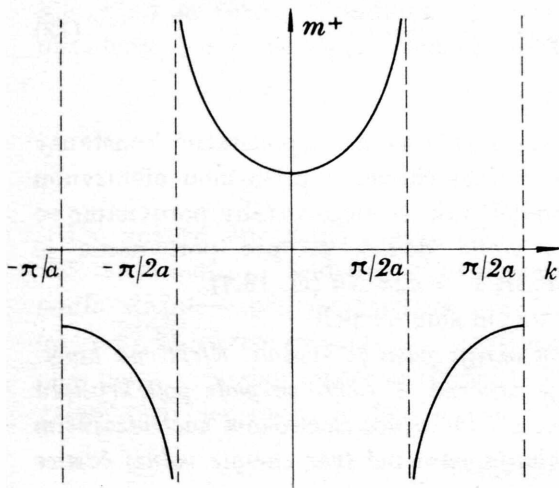
$$E_{c,\max} = a_c + b_c$$

$$m_v\left(k = \pm \frac{\pi}{a}\right) = -\frac{\hbar^2}{4\pi^2 b_v a^2}, \quad m_c\left(k = \pm \frac{\pi}{a}\right) = -\frac{\hbar^2}{4\pi^2 b_c a^2} \quad (5ab)$$

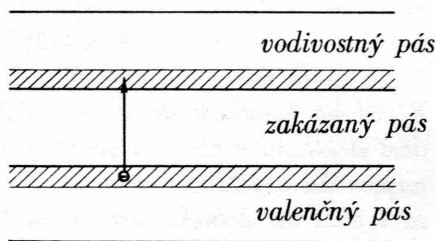
Pri interpretácii mnohých procesov si často pomáhame geometrickou predstavou jednotlivých pásov, tak ako je to znázornené na obr. 18.5. Pre úzky pásik

dolného okraja vodivostného pásu (obr. 18.5) môžeme $\cos ka$ rozložiť do mocninového radu a obmedziť sa iba na kvadratické členy (k je blízke nule). Po úprave dostaneme:

$$E_c(k) = E_{c,\min} + b_c a^2 k^2 / 2 \quad (6)$$



Obr. 18.4.



Obr. 18.5.

Zo vzorca (4b) vypočítame $b_c a^2$ a dosadíme do vzorca (6). Po dosadení dostaneme:

$$E_c(k) = E_{c,\min} + \frac{1}{8\pi^2} \frac{(\hbar k)^2}{m_n} \quad (7)$$

kde $m_n = m_c(k=0)$.

Pre kvantové stavy blízke k hornému okraju valenčného pásu (obr. 18.5) kde k je blízke hodnote buď $+\pi/a$ alebo $-\pi/a$. V prvom prípade namiesto k zavedieme novú premennú k' nasledovným spôsobom

$$k' = \pi/a - k \quad (8)$$

v druhom prípade

$$k' = \pi/a + k \quad (9)$$

V obidvoch prípadoch pre úzky pásik v blízkosti horného okraja valenčného pásu bude k' blízke nulovej hodnote. Ak dosadíme vzťahy (8) a (9) do vzťahu (1), v obidvoch prípadoch dostaneme:

$$E_v(k) = a_v - b_v \cos k'a \quad (10)$$

Opäť rozložíme $\cos k'a$ do mocninového radu a obmedzíme sa na kvadratický člen. Po úprave dostaneme:

$$E_v(k') = E_{v,\max} - \frac{1}{2} b_v (k'a)^2 \quad (11)$$

Zo vzorca (5a) vypočítame $b_v a^2$ a dosadíme do vzťahu (11). Po dosadení dostaneme:

$$E_v(k') = E_{v,\max} - \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi^2} \frac{(\hbar k')^2}{m_p} \quad (12)$$

kde $m_p = -m_v(k = \pm\pi/a)$.

Tvar energie vyjadrený vzťahmi (7) a (12) až na nepodstatné konštanty $E_{c,\min}$ a $E_{v,\max}$ predstavuje energiu voľnej častice s príslušnou efektívnou hmotnosťou. O tom sa môžeme presvedčiť tak, že tieto vzťahy porovnáme so vzťahom (17.10.7). Na vysvetlenie treba dodať, že pre porovnanie je potrebné vo vzťahoch (8) a (12) nahradiť $k = n2\pi/Na$ (čl. 18.7).

Na záver zhrnieme výsledky, ku ktorým sme dospeli:

Efektívna hmotnosť elektrónu v dolnom okraji pásu je kladná. Efektívna hmotnosť elektrónu v hornom okraji pásu je záporná. V tomto prípade pole kryštálu napomáha urýchľovať elektrón. Energia prislúchajúca elektrónom nachádzajúcim sa v blízkosti dolného alebo horného okraja pásu má tvar energie voľnej častice s príslušnou efektívnou hmotnosťou.

18.9. Mechanizmus vedenia prúdu a tepla v kryštáli, pojem diery. Pri vyšetrovaní javov súvisiacich s prenosom náboja alebo energie sa ukázalo výhodným zaviesť vo valenčnom pásu fiktívnu časticu diery. Pre ďalšie úvahy, ktoré nám pomôžu pochopiť obsah pojmu diery, bude potrebné znovu uviesť vzťahy (18.5.20) a (18.6.12)

$$E_v(k) = E_v(-k)$$

$$v_v(k) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{dE_v(k)}{dk}$$

Z párnosti funkcie $E_v(k)$ a zo vzorca pre grupovú rýchlosť vyplýva, že

$$v_v(k) = -v_v(-k)$$