

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 diera, 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

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

Nepárnosť funkcie $v_v(k)$ má za následok, že platia nasledovné vzťahy

$$\sum_i v_v(k_i) = 0 \quad (1)$$

$$\sum_i E_v(k_i) v_v(k_i) = 0 \quad (2)$$

kde sčítanie robíme cez všetky stavy vo valenčnom páse. Pre jednoduchosť budeme predpokladať, že v objemovej jednotke kryštálu môže byť maximálne jeden elektrón v určitom stave vo valenčnom páse. Potom príspevok k prúdovej hustote od valenčných elektrónov je daný vzťahom

$$-e \sum_i v_v(k_i) p(k_i) \quad (3)$$

kde $p(k_i)$ sa rovná 1, ak stav je obsadený a rovná sa 0, ak stav nie je obsadený, $-e$ je náboj elektrónu. Výraz (3) formálne môžeme zapísať ako

$$\begin{aligned} -e \sum_i v_v(k_i) &= e \sum_i [1 - p(k_i)] v_v(k_i) - e \sum_i v_v(k_i) = \\ &= e \sum_i [1 - p(k_i)] v_v(k_i) \end{aligned} \quad (4)$$

Pri úprave sme použili vzťah (1). Zo vzťahu (4) vidieť, že rovnaký príspevok dostaneme, ak budeme sčítavať cez neobsadené stavy, lebo $[1 - p(k_i)]$ sa podľa definície pre neobsadený stav rovná 1. Avšak fiktívnym nosičom (*dieram*), ktoré reprezentujú neobsadené stavy, musíme prisúdiť opačný náboj, aký majú skutočné nosiče (*elektróny*). Príspevok k hustote toku energie od valenčných elektrónov je daný vzťahom

$$\sum_i E_v(k_i) v_v(k_i) p(k_i)$$

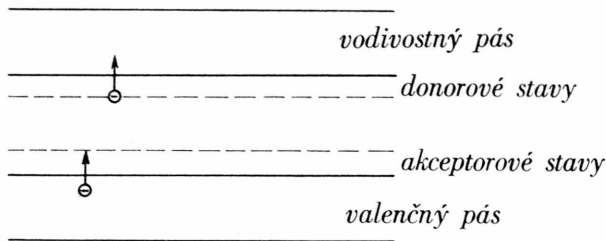
Opäť tento výraz môžeme upraviť nasledovným spôsobom

$$\begin{aligned} \sum_i E_v(k_i) v_v(k_i) p(k_i) &= \sum_i [-E_v(k_i) v_v(k_i)] [1 - p(k_i)] + \\ &+ \sum_i E_v(k_i) v_v(k_i) = \sum_i [-E_v(k_i) v_v(k_i)] [1 - p(k_i)] \end{aligned} \quad (5)$$

Zo vzťahu (5) vidieť, že rovnaký príspevok dostaneme, ak sčítujeme cez neobsadené stavy, musíme však fiktívnym nosičom prisúdiť energiu s opačným znamienkom, akú majú skutočné nosiče náboja. Pretože efektívna hmotnosť je vyjadrená pomocou energie, bude mať efektívna hmotnosť diery v určitom stave vo valenčnom páse opačné znamienko, ako je efektívna hmotnosť elektrónu v tom istom stave. Teraz je zrejmé, prečo sme v predchádzajúcom článku písali:

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

m_p v tomto prípade je efektívna hmotnosť diery v hornom okraji valenčného pásu. Význam zavedenia fiktívnych častíc, ako sú diery (niekedy sa používa termín defektné elektróny) sa nám ozrejní, ak si uvedomíme, že pri konečnej teplote sa budú uprázdňovať stavy nachádzajúce sa v úzkom pásiku v hornom okraji valenčného pásu, ktorých energia je vyjadrená jednoduchým približným vzťahom.



Obr. 18.6.

Na základe pásovej štruktúry môžeme vykonať aj určitú klasifikáciu tuhých látok. Kovy sú charakterizované tým, že ich pásy sa dotýkajú alebo prekrývajú, preto koncentrácia elektrónov nezávisí od teploty. Pohyblivosť elektrónov v dôsledku tepelných zrážok s iónmi klesá pri zvyšovaní teploty, a preto elektrický odpor stúpa. Polovodiče sa vyznačujú tým, že pri teplote 0 K majú plne obsadený valenčný pás, a preto sa v dôsledku vzťahu (1) správajú ako nevodiče. Pri zvyšovaní teploty elektróny preskakujú z valenčného do vodivostného pásu a tým vznikajú diery a vodivostné elektróny, ktoré sú schopné prenášať náboj. Pretože koncentrácia dier a vodivostných elektrónov s teplotou stúpa rýchlejšie ako klesá ich pohyblivosť, bude elektrický odpor klesať. Pri reálnych polovodičoch, ktoré obsahujú prímiesy (pozri čl. 2.5), môžu tieto prímiesy vytvoriť v zakázanom páse buď akceptorové, alebo donorové stavy tak, ako je to znázornené na obr. 18.6. V prípade akceptorových stavov, ktoré majú snahu zachycovať elektróny, a ktoré sa nachádzajú v blízkosti valenčného pásu, budú elektróny z valenčného pásu preskakovať na akceptorové stavy, čím vzniknú iba diery (p -typ). V prípade donorových stavov, ktoré majú snahu zbaviť sa elektrónov, budú sa pri zvyšovaní teploty vytvárať iba vodivostné elektróny (n -typ). Nevodiče sa vyznačujú tým, že pri teplote 0 K majú plne obsadený valenčný pás a šírka zakázaného pásu je taká veľká, že nemôžu nastať preskoky elektrónov z valenčného do vodivostného pásu.

18.10. Tepelné kmity iónov, pojem fonónu. Doteraz sme sa zaoberali pohybom elektrónov pri určitej konfigurácii iónov. Teraz budeme skúmať pohyb