

бы равно нулю. С повышением температуры возрастает рассеяние электронных волн на тепловых колебаниях решетки, и поэтому уменьшается их средняя длина свободного пробега, что означает уменьшение среднего свободного пробега электронов. Средняя длина свободного пробега $\langle \lambda \rangle$ электронов резко возрастает при понижении температуры металла. На рис. 13.4 показано изменение $\langle \lambda \rangle$ с температурой в серебре. Можно доказать, что при обычных комнатных температурах $\langle \lambda \rangle$ оказывается обратно пропорциональной первой степени температуры. Это и приводит по формуле (13.2) к хорошо подтверждающейся на опыте зависимости удельной электрической проводимости от температуры ($\gamma \sim 1/T$). Таким образом, удалось устранить и эту трудность классической теории электропроводности.

§ 13.2. Понятие о зонной теории твердых тел

1. В квантовой теории металлов, изложенной в предыдущем параграфе, предполагалось, что потенциальная энергия электронов в металле везде одинакова. Поэтому движение электронов в металле рассматривалось как свободное движение внутри «потенциального ящика» с вертикальными стенками и плоским дном. В действительности дело обстоит значительно сложнее. Положительно заряженные ионы — узлы кристаллической решетки — создают внутри металла электрическое поле, влияющее на движение электронов проводимости. Узлы решетки расположены в пространстве в строгом порядке. Поэтому создаваемое ими электрическое поле является периодической функцией координат. Следовательно, потенциальная энергия электронов в металле не постоянна, а периодически зависит от их координат. На рис. 13.5 показано изменение потенциальной энергии электрона вдоль оси X , проведенной через узлы кристаллической решетки. Минимумы энергии соответствуют местам, где расположены положительные ионы.

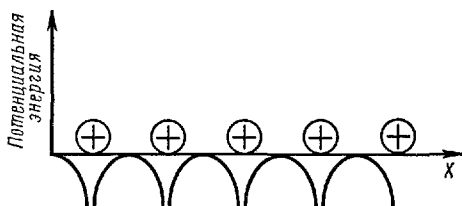


Рис. 13.5

2. Периодическое электрическое поле в кристалле приводит к существенному изменению энергетических состояний электронов в твердом теле по сравнению с их состоянием в изолированных атомах. Электроны изолированных атомов могут находиться только в таких состояниях, которые соответствуют вполне определенным дискретным значениям их энергии. На рис. 13.6 схематично представлены дискретные уровни энергии W электронов в атоме. В твердом теле энергетическое состояние электронов определяется не только их взаимодействием с ядром своего атома, но и электрическим полем кристаллической решетки, т.е. взаимодействием с другими атомами В

результате этого взаимодействия энергетические уровни электронов *расщепляются*. Вместо каждого энергетического уровня изолированного атома в твердом теле, содержащем *N* взаимодействующих атомов, возникает *N* близко расположенных друг от друга энергетических уровней, которые образуют **энергетическую полосу**.

3. На рис. 13.7 показано расщепление уровней энергии изолированных атомов при их сближении и образование энергетических полос твердого тела; r_0 — расстояние между атомами в кристалле. Из рисунка видно, что не все уровни расщепляются одинаково. Взаимодействие между

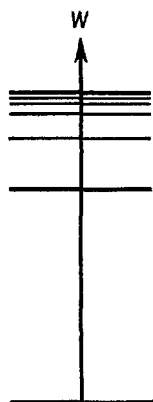


Рис 13.6

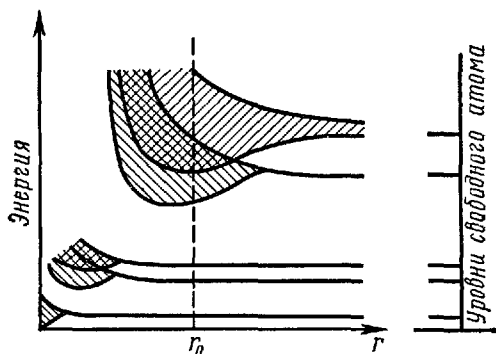


Рис 13.7

атомами твердого тела сильнее всего сказывается на энергетических уровнях внешних электронов атомов, обладающих наибольшей энергией. Наоборот, энергетические уровни внутренних электронов либо совсем не расщепляются при $r = r_0$, либо расщепляются очень слабо. Поэтому можно считать, что твердое тело подобно огромной молекуле, состоящей из множества атомов. Внутренние электроны этих атомов ведут себя практически так же, как и в изолированных атомах, внешние же электроны коллективизированы: они принадлежат всей молекуле (твердому телу), а не каким-нибудь определенным атомам. Энергия этих электронов может находиться в пределах заштрихованных на рис. 13.7 областей, называемых **разрешенными энергетическими зонами** или **полосами**.

4. В соответствии со сказанным выше каждая разрешенная энергетическая зона состоит из *N* близких уровней, где *N* — общее число атомов твердого тела. В 1 см^3 твердого тела находится 10^{22} — 10^{23} атомов. Такой же порядок имеет и число уровней в зоне. Расстояние между соседними уровнями зоны составляет приблизительно 10^{-22} эВ. Поэтому общая ширина зоны имеет порядок нескольких электронвольт. Подобно тому, как в изолированном атоме дискретные уровни энергии разделены областями недозволенных значений энергии, в твердом теле разрешенные энергетические зоны разделены участками (зонами) запрещенных значений энергии. Ширина запрещенных зон соизмерима по величине с шириной разрешенных зон. С увеличением энергии

ширина разрешенных энергетических зон увеличивается, а ширина запрещенных зон уменьшается. Схема энергетических зон твердого тела изображена на рис. 13.8.

5. В изолированном атоме дозволенные квантованные энергетические уровни могут быть заняты электронами или свободны. Соответственно в твердом теле энергетические зоны могут иметь различное «заполнение» электронами. В предельных случаях они могут быть целиком заполнены или совершенно свободны

6. Подобно тому, как в отдельном атоме электроны могут переходить с одного энергетического уровня на другой, электроны в кристаллах могут переходить из одной разрешенной зоны в другую, а также совершать переходы внутри одной и той же зоны. Для перехода электрона из нижней энергетической зоны в соседнюю верхнюю необходимо затратить энергию, равную ширине запрещенной зоны, лежащей между ними (энергию порядка нескольких электронвольт). Для перехода электрона внутри разрешенной зоны требуется весьма малая энергия.

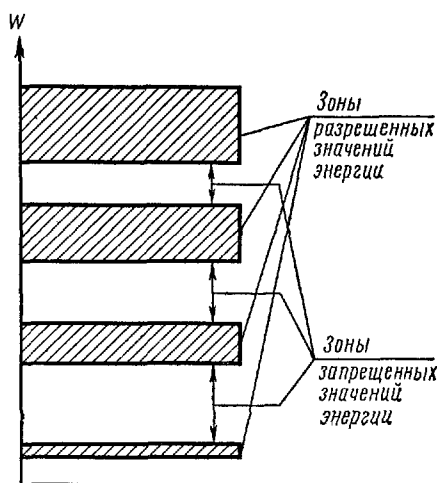


Рис. 13.8

Энергия, приобретаемая электроном в металле под действием электрического поля, на длине свободного пробега составляет 10^{-4} — 10^{-8} эВ, и ее вполне достаточно для внутризонных переходов. Средняя энергия тепловых колебаний атомов твердого тела при комнатной температуре приблизительно равна 0,05 эВ. Эту энергию можно передать электронам, ее также достаточно для переходов электронов внутри разрешенной зоны.

Рассмотрим теперь влияние внешнего электрического поля и теплового возбуждения на переходы электронов между соседними разрешенными зонами. При обычных разностях потенциалов, приложенных к кристаллу, энергия, получаемая электроном на длине свободного пробега, недостаточна для переброса электрона в следующую разрешенную зону. Повышение температуры может привести к передаче электрону значительно большей энергии. Поэтому тепловой механизм возбуждения обуславливает как внутризонные, так и межзонные переходы электронов.

7. Все изложенное выше относится не только к металлам, но и ко всем другим типам кристаллических твердых тел. В самом деле, расщепление энергетических уровней электронов в твердых телах и образование зон разрешенных и запрещенных значений энергии являются результатом существования внутри тела периодического элек-

трического поля. Это поле создается у п о р я д о ч е н н о расположенными в пространстве узлами кристаллической решетки. В металлах и кристаллических телах с ионной решеткой наличие такого поля очевидно. Однако оно имеется и в том случае, когда решетка построена из н е й т р а л ь н ы х частиц — атомов и молекул, состоящих из положительно заряженных ядер и отрицательно заряженных электронов. Поэтому они нейтральны лишь в том смысле, что с у м м а р н ы й заряд ядер каждой молекулы численно равен суммарному заряду ее электронов. В то же время напряженность электрического поля, создаваемого ядрами и электронами, в общем случае отлична от нуля. Это поле особенно велико внутри атомов и молекул и в непосредственной близости от них.

Таким образом, в случае л ю б о г о твердого тела, состоящего из упорядоченно расположенных частиц (ионов, атомов или молекул), имеет место образование зонного энергетического спектра.

§ 13.3. Металлы и диэлектрики в зонной теории

1. С точки зрения зонной теории различия в электрических свойствах разных типов твердых тел могут объясняться следующими причинами:

- а) шириной запрещенных энергетических зон;
- б) различным заполнением электронами разрешенных энергетических зон.

Основной вопрос, который возникает при изучении электрических свойств твердого тела, а именно: проводит оно электрический ток или нет, решается в зависимости от двух указанных факторов. Необходимым условием проводимости твердого тела является н а л и ч и е свободных энергетических уровней, на которые поле сторонних сил могло бы перевести электроны¹.

2. В обычных, не слишком сильных полях могут осуществляться только внутризонные переходы. Поэтому легко указать, в каких случаях твердое тело будет проводником электрического тока.

Предположим, что энергетические зоны твердого тела разделены запрещенными областями, как указано на рис. 13.8. В качестве примера рассмотрим металлический натрий. В изолированном атоме натрия имеются две заполненные электронные оболочки, на которых находятся соответственно 2 и 8 электронов. Валентный одиннадцатый электрон атома натрия согласно принципу Паули заполняет лишь наполовину верхний энергетический уровень атома. В кристаллическом натрии первой и второй заполненным оболочкам изолированных атомов соответствуют целиком з а п о л н е н н ы е электронами з о н ы. Следующая зона разрешенных значений энергии электронов заполнена валентными электронами лишь наполовину (рис. 13.9). Эту зону называют **зоной проводимости**, так как находящиеся в ней электроны могут участвовать в образовании тока проводимости. Под действием поля, создаваемого в кристалле источником электрической

¹ Строго говоря, эти уровни не должны быть п о л н о с т ь ю заняты электронами.