

волн. Эти стоячие волны являются результатом сложения двух бегущих волн, распространяющихся в противоположных направлениях.

В заключение отметим некоторые особенности энергетического спектра электронов в трехмерном случае. Зонная структура здесь может быть значительно сложнее, чем в рассмотренной выше одномерной модели. Зависимость $E(\vec{k})$ в трехмерном кристалле может быть различна для различных направлений в зоне Бриллюэна. Это связано с тем, что трехмерный потенциал $V(\vec{r})$, зависящий от структуры кристалла, в различных направлениях не одинаков. Следствием этого может быть перекрытие разрешенных зон. Так, например, запрещенная зона в одном направлении может совпадать с разрешенной зоной в другом направлении. Перекрытие разрешенных зон нельзя получить в одномерном случае.

7.8. ЗАПОЛНЕНИЕ ЗОН ЭЛЕКТРОНАМИ. МЕТАЛЛЫ, ДИЭЛЕКТРИКИ, ПОЛУПРОВОДНИКИ

Выше было показано, что каждая разрешенная зона содержит конечное число (N)-энергетических уровней. В соответствии с принципом Паули, на каждом уровне может находиться лишь два электрона с противоположно направленными спинами. При ограниченном числе электронов, содержащихся в кристалле, заполненными окажутся лишь несколько наиболее низких энергетических зон. Все остальные зоны будут пусты.

Рассмотрим различные варианты заполнения зон электронами.

1. Предположим, что последняя зона, в которой есть электроны, заполнена частично. Поскольку эта зона заполняется валентными электронами атомов, она называется *валентной зоной*. Под действием внешнего электрического поля электроны, занимающие уровни вблизи границы заполнения, будут ускользать и переходить на более высокие свободные уровни той же зоны. В кристалле потечет ток. Таким образом, кристаллы с частично заполненной валентной зоной хорошо проводят электрический ток, т. е. являются металлами.

Рассмотрим в качестве примера натрий. Каждый атом натрия содержит 11 электронов, распределенных по состояниям следующим образом: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$. При объединении атомов в кристалл энергетические уровни атомов превращаются в зоны. Электроны внутренних оболочек атома полностью заполняют зоны, образованные из уровней $1s$, $2s$ и $2p$, т. к. в них на $2N$, $2N$ и $6N$ состояний приходится соответственно $2N$, $2N$ и $6N$ электронов. Валентная зона образована из $3s$ состояний. В ней имеется всего $2N$ состояний, на которые приходится N элект-

ронов (по одному валентному электрону на атом). Таким образом, в кристаллическом натрии валентная зона заполнена только наполовину. Естественно, что все сказанное относится к температуре 0 К. Аналогичным образом заполняются зоны и у других щелочных элементов.

2. Допустим, что валентная зона заполнена электронами полностью, но она перекрывается со следующей разрешенной зоной, не занятой электронами. Если к такому кристаллу приложить внешнее электрическое поле, то электроны будут переходить на уровни свободной зоны и возникнет ток. Данный кристалл также является металлом. Типичный пример металла с указанной зонной структурой — магний. У каждого атома Mg ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$) в валентной оболочке имеется два электрона. В кристаллическом магнии валентные электроны полностью заполняют 3s-зону. Однако эта зона перекрывается со следующей разрешенной зоной, образованной из 3p-уровней.

3. Рассмотрим теперь случай, когда валентная зона заполнена электронами полностью и отделена от следующей за ней свободной зоны широкой ($>2\div 3$ эВ) запрещенной зоной (энергетической щелью). В кристалле с такой зонной структурой внешнее поле не может создать электрического тока, т. к. электроны в заполненной зоне не могут изменить своей энергии. Следовательно, вещество представляет собой диэлектрик. Типичным диэлектриком является ионный кристалл NaCl. Положительно заряженные ионы натрия имеют электронную конфигурацию: $\text{Na}^+ (1s^2 2s^2 2p^6)$, а отрицательные ионы хлора — $\text{Cl}^- (1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6)$. Зоны, образующиеся из полностью заполненных атомных уровней, тоже оказываются полностью заполненными. Последней заполненной зоной является зона 3p Cl⁻, а следующей за ней свободной зоной — зона 3s Na⁺. Энергетическая щель между этими зонами составляет около 9 эВ.

Если ширина запрещенной зоны $<2\div 3$ эВ, то кристалл называется полупроводником. В полупроводниках за счет тепло-

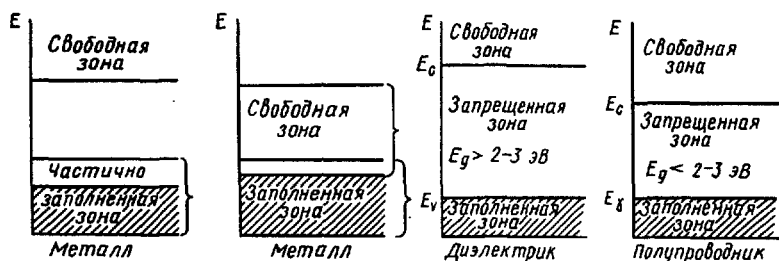


Рис. 7.14. Заполнение зон электронами: E_v — граница валентной зоны, E_c — граница зоны проводимости, E_g — ширина запрещенной зоны

Таблица 7.1. Ширина запрещенной зоны

Кристалл	E_g , эВ
C (алмаз)	5,2
BN	4,6
Al ₂ O ₃	7,0
Si	1,08
Ge	0,66
GaAs	1,43
InSb	0,17

вой энергии $k_B T$ заметное число электронов оказывается переброшенным в свободную зону, называемую *зоной проводимости*. При очень низких температурах любой полупроводник становится хорошим диэлектриком.

Таким образом, между металлами и диэлектриками существует принципиальное различие, а между диэлектриками и полупроводниками — только количественное.

Заполнение зон электронами в металлах, диэлектриках и полупроводниках схематически показано на рис. 7.14.

В таблице 7.1 приведены значения ширины запрещенной зоны для некоторых диэлектриков и полупроводников.

Электронная структура атомов, образующих твердое тело, не единственный фактор, обуславливающий различие в заполнении зон. На примере NaCl мы видели, что важную роль играет природа химической связи. Характер заполнения энергетических зон зависит также и от структуры кристалла. Так, например, углерод в структуре алмаза — диэлектрик, а углерод в структуре графита обладает металлическими свойствами.

7.9. ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА ЭЛЕКТРОНА

Рассмотрим движение электрона под действием внешнего электрического поля. Предположим сначала, что мы имеем дело со свободным электроном, помещенным в однородное электрическое поле \vec{E} . Со стороны поля на электрон будет действовать сила $\vec{F} = -e\vec{E}$. Под действием этой силы он приобретает ускорение:

$$\vec{a} = \frac{\vec{F}}{m} = -\frac{e\vec{E}}{m}. \quad (7.87)$$

Здесь m — масса электрона. Вектор ускорения направлен так же, как вектор внешней силы, т. е. против поля \vec{E} .