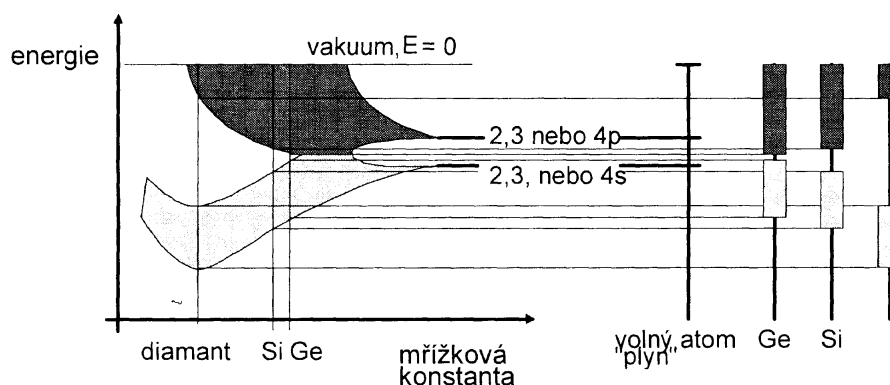


2.4. Pásové diagramy

2.4.1. Elektron v krystalu - základy pásové teorie

Pro izolovaný atom můžeme uvažovat čárový energetický diagram sestávající z diskrétních energetických hladin. Při přibližování dvou atomů dochází k projevům přitažlivých (vazebních, atraktivních) a odpudivých (repulsivních) sil.

Odpudivé síly převládají při malých vzdálenostech mezi atomy a přitažlivé ve větších vzdálenostech. V určité vzdálenosti a_0 , kterou nazýváme **rovnovážná mřížková konstanta**, jsou tyto síly v rovnováze, soustava atomů má minimum potenciální energie a je proto ve stabilním stavu. Při vzájemném působení dvou atomů dochází také ke štěpení energetických hladin, které byly původně v obou atomech na stejné úrovni (na tento jev se můžeme dívat jako na rozšíření Pauliho vylučovacího principu na více atomů nebo na celý krystal).

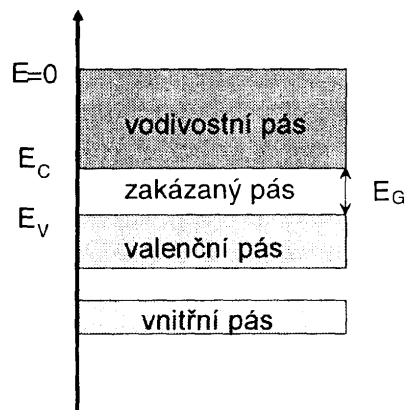


Obr. 2-7 Teoretický energetický diagram prvků IV. skupiny v závislosti na mřížkové konstantě. Pásový model napravo vznikne řezem v místě příslušné mřížkové konstanty.

Na Obr. 2-7 je znázorněna část energetického diagramu prvků IV. skupiny periodické tabulky (které mají podobnou elektronovou strukturu se čtyřmi valenčními elektrony) v závislosti na jejich mřížkové konstantě. V případě velké vzdálenosti mezi jednotlivými atomy je energetické spektrum čárové, protože jednotlivé atomy spolu neinteragují. Při vzájemném přibližování atomů v krystalu, obsahujícím N atomů, se hladina **s** rozštěpí na $2N$ dovolených stavů a hladina **p** na $6N$ dovolených stavů.

Představíme-li si, že 1 cm^{-3} křemíku obsahuje asi $5 \cdot 10^{22}$ atomů, můžeme hovořit o spojitéch pásech dovolených energií.

Pásové diagramy dovolených energií elektronů jsou důležitým modelem pro studium elektrických vlastností pevných látek. Hovoříme o tzv. **pásové teorii** nebo **pásovém modelu pevných látek**. Pásy dovolených hodnot energie elektronu označíme jako **dovolené pásy**, oblasti mezi těmito pásy jsou pásy zakázaných hodnot energie elektronu - **zakázané pásy**. Jednoduchý pásový model pevné látky je na obr. 2-8.



Obr. 2-8 Jednoduchý pásový model pevné látky.

Energetické pásy dělíme na tyto skupiny:

1. Vnitřní pásy:

Tyto pásy patří elektronům pevně vázaným k jádrům. Jsou poměrně úzké a pro přenos elektrického náboje nemají význam.

2. Valenční pás:

V tomto pásu jsou hladiny elektronů vytvářejících chemickou vazbu.

3. Vodivostní pás:

V tomto pásu jsou hladiny elektronů uvolněných z chemických vazeb. Tyto elektrony se mohou pohybovat v meziatomovém prostoru a způsobovat vodivost látky. Je to nejvyšší dovolený energetický pás.

4. Zakázané pásy:

Oddělují od sebe pásy dovolených energií.

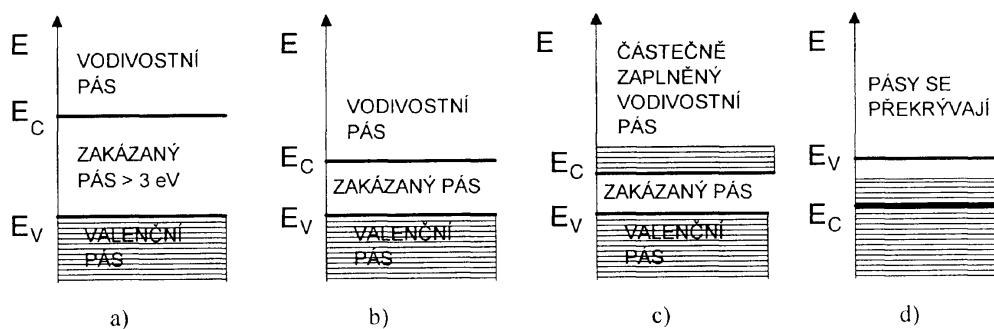
Poslední tři pásy - vodivostní, zakázaný a valenční - **svou polohou** a energetickou šířkou určují **základní vlastnost pevných látek** z hlediska vedení elektrického proudu (přenosu náboje). Běžně se dolní okraj vodivostního pásu označuje E_C (C = conductivity), E_V je horní kraj valenčního pásu (V = valence). Zakázaný pás má šířku E_G (nebo ΔE ; G = gap).

Elektrické vlastnosti látky charakterizuje zejména šířka zakázaného pásu E_G , která mimo jiné závisí na meziatomové vzdálenosti a_0 atomů v krystalu.

Na (Obr. 2-7) vidíme, že Ge s mřížkovou konstantou 0,565 nm má menší E_G ($E_G = 0,66$ eV) než Si ($a_0 = 0,543$ nm, $E_G = 1,12$ eV) a mnohem menší než diamant C ($a_0 = 0,357$ nm, $E_G = 5,47$ eV). Hodnoty jsou uvedeny pro teplotu 300 K.

2.4.2. Rozdělení látek podle jejich elektrických vlastností

Objev dovolených a zakázaných pásů energie v krystalických látkách vedl k jednoduchému a názornému výkladu elektrické vodivosti. Rozdělení látek na **vodiče, polovodiče a izolanty** se provádí podle hodnot **měrné vodivosti** a její **teplotní závislosti** a jako výrazné kritérium se uvádí **šířka zakázaného pásu**.



Obr. 2-9 Pásový model: a) izolantu b) polovodiče c) monovalentního kovu d) bivalentního kovu.

Na Obr. 2-9. jsou vedle sebe znázorněny pásové modely pro izolant, polovodič a vodič (kov). Předpokládáme, že látky zde uvažované jsou na teplotě absolutní nuly (**0 K**), kdy elektrony zaujímají nejnižší možné energetické úrovně. Výpočty při teplotě absolutní nuly jsou jenom teoretickou abstrakcí, která nám umožňuje jednodušší postupy a snazší pochopení problému, než při uvažování reálných teplot.