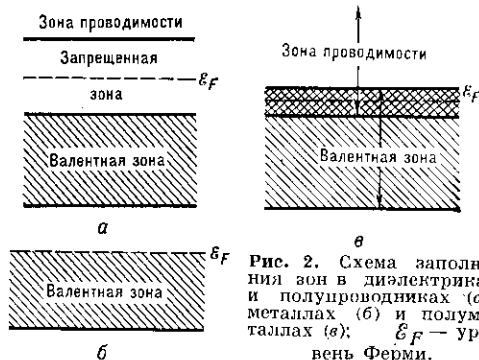


возбуждений, способных перемещаться по кристаллу и соответственно, как и электроны, обладающих квазиимпульсом (см. *Квазичастица*).

Заполнение зон в идеальном кристалле. Число мест в одной зоне ограничено и равно для каждой ветви (невыврожденной по спину) V/Ω . В силу *Паули принципа* каждое из этих состояний может быть заполнено только одним электроном. При темп-ре $T=0\text{K}$ электроны заполняют ниж. состояния. В зависимости от числа валентных электронов верхняя из заполненных зон может быть занята полностью или частично. Электроны полностью заполненной зоны не переносят ток, т. к. в такой зоне электр. поле не может изменить распределение электронов по квазиимпульсам. Поэтому кристаллы, у к-рых ниж. зоны полностью заполнены, а верхние пустые, являются диэлектриками или полупроводниками. Верхняя из заполненных зон таких кристаллов наз.

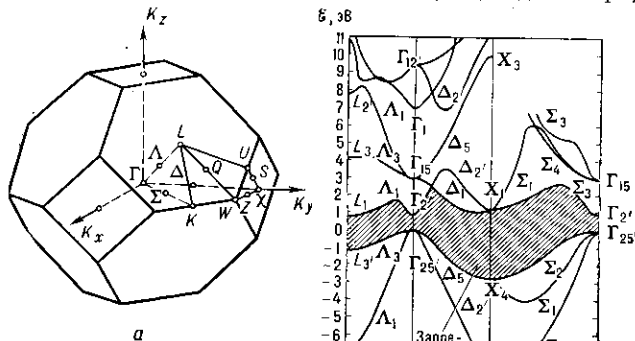


валентной зоной, а нижняя из пустых — зоной проводимости (рис. 2, а). Вещества с широкой запрещенной зоной, разделяющей валентную зону и зону проводимости, являются диэлектриками, а вещества с более узкой запрещенной зоной (обычно меньше 2,5—3 эВ) — полупроводниками. Однако деление между ними в значит. мере условно.

При частичном заполнении зоны внеш. электр. поле может изменять распределение электронов по квазиимпульсам, так что возникает результирующий поток электронов создающий ток. Поэтому кристаллы с частично заполненными зонами являются металлами (рис. 2, б). Как правило, это кристаллы, образованные атомами с не полностью заполненными электронными оболочками. Кристаллы, составленные из атомов или ионов с полностью заполненными оболочками, — обычно диэлектрики или полупроводники. Напр., кристаллы инертных газов и щелочно-галлоидные кристаллы типа NaCl, у к-рых все *S*-электроны катиона переходят на *P*-оболочку аниона, полностью заполняя её, обычно — диэлектрики. Однако многие из таких кристаллов в результате перекрытия зон, соответствующих разным атомным уровням, становятся металлами, пример — щелочно-земельные металлы. И наоборот, в результате расщепления атомных уровней *внутрикристаллически* полем кристаллы, образованные атомами с не полностью заполненными оболочками, могут быть диэлектриками. Так, в одноосных кристаллах *P*-уровень расщепляется на 2 подуровня, образующих 2 зоны, нижняя из к-рых м. б. полностью заполнена. Подобную роль может играть и ферромагнитное или антиферромагнитное упорядочение, снимающее вырождение по спину. Диэлектриками могут быть и кристаллы, содержащие в элементарной ячейке неск. атомов с не полностью заполненными оболочками. Пример — элементарные полупроводники IV группы периодич. системы (алмаз, Ge, Si), у к-рых элементарная ячейка содержит 2 атома, и VI группы (Se, Te) с 3 атомами в ячейке. Так, в алмазе, Ge, Si на 8 атомных *S*- и *P*-уровнях (с учётом спина) приходится 4 электрона, т. е. эти уровни заполнены наполовину. Из этих 8 уровней

образуются 4 зоны, две из к-рых трёхкратно вырождены. Из них 2 нижние полностью заполнены имеющимися 8 электронами в каждой ячейке. Остальные 2 зоны остаются пустыми и образуют зоны проводимости. При этом в верх. валентной зоне Ge (Γ_{25}' , рис. 3, а, б), также как и в более высокой из зон проводимости (Γ_{15}), в точке Γ (центр ЗБ) имеет место трёхкратное вырождение, а на осях Δ и Λ — двукратное вырождение одной из ветвей (Δ_3, Λ_3). Спин-орбитальное взаимодействие частично снимает это вырождение, расщепляет валентную зону в точке Γ и по направлениям Δ и Λ [5, 10].

В ряде кристаллов частично заполненные зоны образуются в результате слабого перекрытия верх. заполненной зоны с нижней пустой. Такие вещества (графит, Bi, Sb) наз. *полуметаллами* (рис. 2, в). В нек-рых полупроводниках (напр., серое олово) одна из ветвей, выходящих из точки вырождения ($k_0=0$), идёт вверх,



т. е. для неё $\epsilon(k) > \epsilon(k_0)$, а вторая вниз: $\epsilon(k) < \epsilon(k_0)$. При этом верх. ветвь пустая, а нижняя полностью заполнена, т. е. зона проводимости и валентная зона касаются в точке k_0 . Такие кристаллы наз. *бесщелевыми полупроводниками*.

При $T=0\text{K}$ уровень Ферми ϵ_F определяет границу между заполненными и незаполненными уровнями (см. *Ферми-энергия*). В чистых полупроводниках и диэлектриках ϵ_F проходит в запрещенной зоне, разделяющей валентную зону и зону проводимости; в металлах или сильно легированных полупроводниках — в разрешенной зоне. В этом случае изоэнергетич. поверхность в k -пространстве, определяемая ур-нием $\epsilon_{\mu}(k) = \epsilon_F$, наз. *поверхностью Ферми*. Для пересекających или вырожденных зон её форма различная для каждой из ветвей спектра. В металле она может либо охватывать замкнутую область k -пространства, либо проходить через всю обратную решётку (см. *Ферми-поверхность*). При $T > 0\text{K}$ степень заполнения электронами состояния с энергией ϵ определяется *ферми-распределением*:

$$f_s(\epsilon) = \left[\exp\left(\frac{\epsilon - \epsilon_F}{kT}\right) + 1 \right]^{-1}. \quad (4)$$

Положение уровня Ферми ϵ_F находится из ур-ния:

$$\sum_{\mu} \int d^3k f_s[\epsilon_{\mu}(k)] \rho(k) = N_s, \quad (5)$$

где N_s — полное число электронов в кристалле, задаваемое условием нейтральности, т. е. равенством полного заряда электронов заряду положит. ионов.