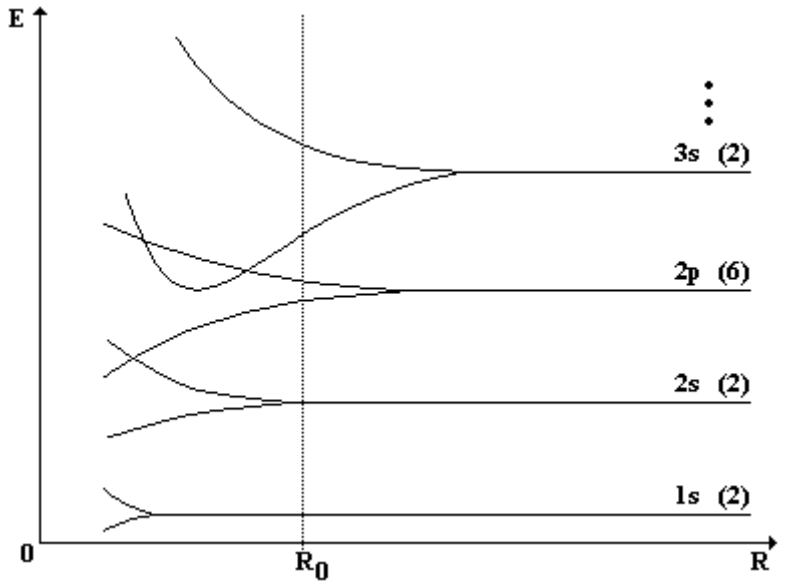
Energetické pásy elektronů v krystalech

Pro vysvětlení energetických pásů elektronů v krystalech začneme jednoduchým myšlenkovým experimentem. Představme si např. krystal sodíku, který vzniká v laboratoři z taveniny. Uvažujme nyní situaci, kdy tento krystal bude vznikat postupným „zhušťováním“ taveniny, tj. zmenšováním vzájemné vzdálenosti jednotlivých atomů. Atomy, kterých je řádově 3.10^{22} se pak přiblíží až na vzdálenost $R_0 = 0{,}366\ \mathrm{nm}$ a vytvoří tak monokrystal sodíku o objemu $1\ \mathrm{cm}^3$.



Obr. 93

Při postupném vzájemném přibližování atomů k sobě se začínají stále více vzájemně ovlivňovat i elektrony jednotlivých atomů. Výpočty ukazují, že původní energetické hladiny elektronů se tak rozštěpí v celé pásy, které budou tím širší, čím vyšší energie jim odpovídá. Situace je znázorněná na obr. 93; čísla v závorkách u jednotlivých energetických stavů udávají počet elektronů v tomto stavu. Šířka výše položených pásů dovolených energií bývá řádově jednotky až desítky elektronvoltů, zatímco nejhlubší pásy (např. 1*s*, ...) jsou velmi úzké (např. u sodíku řádově $10^{-19}\ \mathrm{eV}$).

V krystalu se tedy nacházejí obecně dovolené pásy a zakázané pásy energie. Jsou složeny z jednotlivých hladin ležících velmi hustě nad sebou.

Dovolený pás může být obsazen celkem 2*N* elektrony.

Činitel „2“ je dán dvojí orientací spinu elektronů. Počet elektronů v dovoleném pásu tedy může být obsazen sudým počtem elektronů.

U prvků, které mají lichý počet elektronů (např. již zmíněný sodík, ...), se zaplní jeden pás (nejvyšší) pouze do poloviny. U prvků se sudým počtem elektronů v atomu se v základním stavu vyskytují jen pásy zcela zaplněné nebo prázdné. Na základě zaplněnosti posledního pásu lze určit např. elektrické vlastnosti látky.

V izolovaných atomech jsou elektrony vázány vždy k příslušnému jádru (jedná se o lokalizované elektrony). Čím více se atomy přibližují, tím větší je pravděpodobnost, že elektron samovolně přejde od jednoho jádra do blízkosti druhého. Elektrony pocházející z vnitřních slupek (1*s*, ...) zůstávají ještě i v krystalu velmi silně lokalizovány. Výpočty ukazují, že elektrony, jejichž energie tvoří široké pásy, se stále pohybují v celém krystalu. Střední rychlost tohoto chaotického posuvného pohybu elektronů při šířce pásu zhruba $10\ \mathrm{eV}$ je řádově $10^6\ \mathrm{m.s^{-1}}$.

Tuto obrovskou velikost rychlosti elektronu, potvrzenou četnými experimenty, není možné vysvětlit klasicky. Souvisí totiž velmi podstatně s Pauliho vylučovacím principem. Kdyby elektrony totiž neměly poločíselný spin, obsadily by v základním stavu krystalu pouze jedinou hladinu - nejnižší

hladinu pásu 1*s*.

© Encyklopedie Fyziky (http://fyzika.jreichl.com); Jaroslav Reichl, Martin Všetička
Licence http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/3.0/ zakazuje úpravy a komerční distribuci.