

## Discussion on electronic structure and electrical conductivity of materials

Qi Xing

Guangxi Normal University, Nanning

**Abstract:** The basic mode of metal bonding is that the exchange valence electrons are alternately applied between adjacent atoms. Based on this, the electron structures of the acceptor in metals, semiconductors and insulators are studied, and the relationship between the structures and the conductivity of the above materials is discussed.

**Key words:** Valence electron; conductance; metal; semiconductor; insulator

Received: 2019-07-01; Accepted: 2019-07-29; Published: 2019-08-09

---

## 浅析材料的电子结构及其导电特性探讨

祁星

广西师范大学, 南宁

邮箱: xq\_0117@hotmail.com

**摘要:** 金属中相邻原子间交替施受互换价电子是金属键合的基本模式。据此研究金属、半导体、绝缘体中的施受交换电子结构,并进而探讨这种结构与上述材料导电特性的关系。

**关键词:** 价电子; 电导; 金属; 半导体; 绝缘体

收稿日期: 2019-07-01; 录用日期: 2019-07-29; 发表日期: 2019-08-09

Copyright © 2019 by author(s) and SciScan Publishing Limited

This article is licensed under a [Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/).

<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>



## 1 金属的导电机制

传统的金属理论认为,金属中的电流是由价电子在晶格空间的流动引起的,电子与晶格碰撞产生了电阻。这一说法没有事实依据,也与量子力学原理不相符。Ag、Au、Cu、Al为fcc结构,具有最高密度系数0.74,晶格空间最小,价电子与晶格碰撞的概率最大,但事实上最高导电率偏偏都存在于fcc金属中。晶格密度系数只有0.34,有很大晶格空间的Si、Ge、C(金刚石)却是半导体、绝缘体。Si、Ge在高压下能进入金属状态,即它们的电导率随着晶格空间减少而增加。Na金属电阻随着其晶格空间的增大反而升高,当晶格常数增大到某一临界值时,原本是良导体的金属Na就转变成绝缘体。这按照能带论是说不通的,因为Na的3s总是半充满。由量子力学可知,一旦原子的某壳层被电子充满,则此壳层内电子的能量就会降至一个很低的数值。为填满壳层降低能量,金属中相邻原子(离子)相互交替施受互换价电子是金属键合的普遍形式。例如在Na金属中某一瞬间A原子将一个3s电子施与其相邻的B原子,则A、B原子



K、Na金属原子的最外层支壳层4s、3s也都仅有1个电子，次外层3p、2p也都处于封闭状态，即他们的电子结构与Ag、Au等的相似，相邻原子间极易发生施受交换价电子过程，但因K、Na金属的密度系数 $0.680.74$ ，故K、Na的电导率比Ag、Au等的低。V、Ba原子的电子组态与Ni、Sr的电子组态相似，也因其密度系数 $0.680.74$ ，它们的电导率必然低于Ni、Sr等金属的电导率。

Be、Mg、Zn、Cd含有电子的支壳层均为封闭状态，这些金属原子中的电子都处在低能量状态。按照传统理论金属原子中的一部分电子都要从低能量封闭状态进入晶格中的高能量状态，即金属中原子的稳定性反而比孤立原子为差。这与量子力学原理和实验事实不符。

现根据施受交换论来研讨这一类金属中的电子组态。当某金属的原子形成hcp晶体时，每6个相邻的原子中将有3个各施弃n个价电子，n为该金属的原子价，使这3个原子核周围形成3个相同的A类电子壳层结构，所施弃的3n个电子供另3个原子作公有键合，使另3个原子每个原子核周围均形成相同的B类电子壳层结构，使得晶胞中的6个离子有3个较大3个较小，导致 $c/a \neq 1$ 。633，对整个晶体来说即形成ABAB……层序的排列。由于相邻原子间电子的施受交换过程不断地交替发生，则A、B类电子壳层结构的排列层序也不断发生交替变化，即ABAB BABA……，具有稳定hcp结构的任何金属均遵守 $-n+3n$ 规则。例如，当Cd的孤立自由原子聚合成晶体时，各施弃2个5s电子的原子所形成的A类电子壳层结构为…… $4p^6 4d^{10} 4f^0 5s^0 5p^0$ ，与Pd自由原子的电子组态相同，均获得6个公有化键合电子的另3个原子所形成的B类电子壳层结构为…… $4p^6 4d^{10} 4f^0 4s^2 5p^6$ ，与Xe自由原子的电子组态相同。Cd金属中的施受交换电子结构式为…… $4p^6 4d^{10} 4f^0 5s^0 5p^0 \cdots \cdots 4p^6 4d^{10} 4f^0 5s^2 5p^6$ ，此式表明原来在一个原子5s中的2个价电子升迁入与其相邻的另一个原子的5p，由于有3个原子各施弃2个价电子供另3个原子作共有化键合，则另3个原子每个原子的5p都有可能获得6个价电子。电子在不同壳层间的升迁涉及到激活能，根据激活能的大小，材料可以是金属、半导体或绝缘体。两壳层间的激活能即为两壳层间的能隙。Be、Mg、Zn、Cd原子的电子组态类似，它们的施受交换结构式也类似。一方



集系数也都只有 0.34，与 Si 一样，以上两点是 Ge、GaAs、InSb 成为半导体材料的重要原因。

大家知道，金属 Na 为良导体，当其晶格常数  $a$  增大到临界值  $a_c$  时就转变为绝缘体。这照传统的金属理论是不通的，因为 Na 的 3s 能带总是半充满的，而按照施受交换论上述结果是很自然的。

### 3 绝缘体

曾有报道，金刚石在 (1.5 MPa) 高压下，晶格常数减小约 17%，实现了金属态转变。这时金刚石中相邻碳原子间的价电子施受交换结构式为  $1s^2 2s^0 2p^0 1s^2 2s^2 2p^6$ ，式子显示，s、p 价电子已杂化。要完成式子中的施受过程与碳原子 2s 电子升迁入相邻的碳原子的 2p 有关，这约需 6 eV 的激活能，另外金刚石的密集系数也是 0.34，再加上碳的原子价常有 -4 价出现，即碳也具有负原子价的性质，对价电子有强的束缚力，所以碳的电导率一定是很低的。当 (1.5 MPa) 高压被解除后，晶格常数立刻增大 17%，更进一步加大了金刚石中施受交换价电子的运动阻力，迫使价电子在相邻原子间停滞，以致不能形成有效量值的电导率，所以将金刚石归入绝缘体类。

### 4 如何设立施受交换结构式

材料中价电子的施受交换结构式要根据材料构成元素的原子价、电子组态、电负性等设立。现以 NbN 为例 [3] 说明。N 的电负性远大于 Nb 的电负性，N 原子夺取 Nb 原子的 3 个价电子后形成了闭合稳定的惰性电子组态 ( $1s^2 2s^2 2p^6$ )，不再参与 NbN 的电子施受交换过程。NbN 价电子的施受交换结构式为.....  $4p^6 4d^0 4f^0 5s^0 \leftrightarrow \dots\dots 4p^6 4d^4 4f^0 5s^0$  或.....  $4p^6 4d^0 4f^0 5s^0 \leftrightarrow \dots\dots 4p^6 4d^0 4f^2 5s^2$ ，价电子的施受交换只在两个相邻的 Nb 离子中进行。

价电子的施受交换结构式决定着材料的许多物理化学性能，本文所讨论的电导仅为其中的一例。又如固态相变、晶体结构、金属的气化行为、熔点和热膨胀 [2] 等都与其有关。金属 Be、Mg、Zn、Cd 等都具有价电子闭合稳定的施受交换结构式，所以不易发生固态相变，这些金属价电子的施受交换过程都

遵守  $-n+3n$  规则,才形成了 hcp 晶体结构。相反如金属 Ca 等虽具有几种不同的施受交换结构式,但没有一种价电子的施受交换结构式是稳定的,所以有同素异晶相变发生。作者希望有兴趣的科研工作者能向这一基础课题投入些力量。

## 参考文献

- [1] 田锡芝. 金属中电子的施受交换键合 [J]. 金属科学与工艺, 1989, 8(3): 153-154.
- [2] 田锡芝. 金属中的施受交换电子结构对热膨胀系数的影响 [J]. 机械工程材料, 1994, 18(6): 37-38.
- [3] Tian X Z. The mechanism of accepting, donating and exchanging electrons in superconductor [J]. Acta Metal Sin, 1999, 12(4): 389-390.