الفصل السابع

نظرية الانطقة (الحزم) و التوصيل الفائق (المفرط)

تخبرنا ميكانيكا الكم، أنه توجد مدارات (اغلفة) تكون فيها كثافة الاحتمال مسموحة للالكترون. حيث تم تعريف هذه الأغلفة بواسطة مجموعة من الأعداد الكمية تدل على متغيرات الحركة الإلكترونية ومنها:

١- العدد الكمي الأساسي، (principal quantum number, **n**)، والذي يرتبط بطاقة الإلكترون أو حجم الغلاف. ويأخذ القيم n=1,2,3… ويرمز لها بالرموز K, L, M, N

٢- العدد الكمي المدارى (orbital quantum number, $\boldsymbol{\ell}$) ويرتبط بالعزم الزاوي للمدارات الفرعية الموجودة ضمن الغلاف الواحد ويأخذ القيم $\ell = 0,1,2 \dots (n-2), (n-1)$, ويرمز إلى المدارات الفرعية بالرموز s, p, d, f، أي ان عدد قيم l مساوٍ للعدد الكمي n.

٣- العدد الكمي المغناطيسي، (magnetic quantum number, $\boldsymbol{m}$) ويحدد عدد حالات الطاقة (الإلكترونات) في المدار الفرعي و يأخذ القيم $-\boldsymbol{\ell}, \dots -2, -1, 0, 1, 2, \dots \boldsymbol{\ell}$. بحيث يكون عدد القيم الممكنة له (عدد المدارات الفرعية) مساوياً لـ $(\boldsymbol{2l+1})$

٤- العدد الكمي المغزلي (spin quantum number, $\boldsymbol{s}$) و ينشأ من العزم المغزلي الذاتي للإلكترون و يأخذ القيم $\left(\pm\frac{1}{2}\right)$ بناء على اتجاه الدوران.

وهكذا نجد أن هذين العددين $(\boldsymbol{s}\ ,\ \boldsymbol{m})$ يصفان حالات طاقة الإلكترون الموجود خلال المدارات الفرعية.

تنشأ هذه الأعداد الكمية الأربعة من حل معادلة شرودنجر (Schrödinger) و مبدأ باولي (Pauli) لاستبعاد وجود أكثر من إلكترون له نفس الأعداد الكمية الأربعة فى نفس الوقت.

تسمى الإلكترونات التي تحتل المدارات الخارجية بإلكترونات التكافؤ (valence electrons) وتكون هذه الإلكترونات هي المسئولة عن الربط بين الذرات لتكوين جزيئات أو بلورات. الأعداد والرموز السابقة تستخدم لوصف حالات (مستويات) الطاقة الإلكترونية فى الذرة حيث يدل كل رمز على حالة طاقة معينة.

حالات الطاقة في المدارات الالكترونية

العدد الكمي الرئيسي n	المدار الاساسي	قيم l (من n القيم)	المدار الفرعي	عدد المدارات الفرعية (الاوربيتال) $(2l+1)$	عدد الالكترونات في المدار:	
					الفرعي $2(2l+1)$	الاساسي
1	K	0	s	1	2	2
2	L	0 1	s p	1 3	2 6	8
3	M	0 1 2	s p d	1 3 5	2 6 10	18
4	N	0 1 2 3	s p d f	1 3 5 7	2 6 10 14	32

رأينا في الفصل السابق مدى النجاح الذي حققه نموذج الالكترون الحر فى تفسير العديد من الخصائص الطبيعية للمواد الصلبة مثل التوصيل الكهربائي والتوصيل الحراري وبعض الخصائص الاخرى وبالرغم من ذلك لم يتمكن هذا النموذج من تفسير الفروق فى الخصائص الكهربائية بين المعادن والمواد العازلة وأشباه الموصلات. بالاضافة إلى هذا لم يتمكن نموذج الالكترون الحر من تفسير ظهور قيم موجبة لمعامل هال وكذلك العلاقة بين الكترونات التوصيل في الفلز والكترونات التكافؤ في الذرات الحرة .

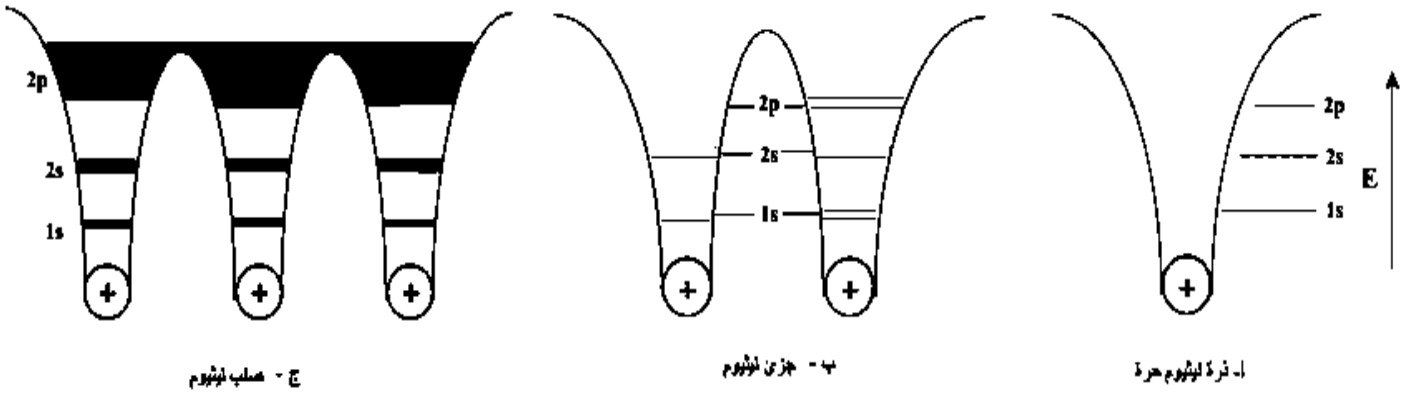
فى الفصل السابق، تكلمنا عن حركة الالكترون فى الصلب مستخدمين نموذج الالكترون الحر والذي يعتبر نموذج مبسط جدا نظرا لاهمال جهد البلورة. ولكن لا يمكن غض النظر عن هذا الجهد عند شرح النتائج العملية بطريقة كمية أو عند الحديث عن بعض الخصائص الالكترونية للصلب. لذلك باتت الحاجة ملحة إلى نموذج جديد أو نظرية جديدة تأخذ تأثير جهد البلورة فى الاعتبار وهذا ما جاءت به و حققته نظرية حزم الطاقة للمواد الصلبة.

١- منشأ حزم الطاقة

لفهم منشأ حزم الطاقة فى المواد الصلبة نجد أنه من المفيد أن نستعرض طيف الطاقة لالكترون فى الذرة الحرة وسنرى كيف أن هذا الطيف يتعدل بالتدريج عند اضافة الذرات بعضها إلى بعض لتكوين جسم صلب. لبيان ذلك، سنعتبر الليثيوم كمثالا محددا.

فى ذرة الليثيوم الحرة يدور الالكترون فى بئر جهد، كما هو مبين بالشكل (أ) ادناه، عند حل معادلة شرودينجر نحصل على سلسلة من مستويات الطاقة المتفردة يرمز لها بالرموز $2p\ 2s^1 1s^2$ حيث تحتوي ذرة الليثيوم على ٣ الكترونات.

نعتبر حالة ذرتي ليثيوم يكونان جزيئة ليثيوم، Li_2 وفى هذه الحالة فإن الجهد الذي يرى بواسطة الالكترون يكون عبارة عن بئر جهد مزدوج، كما يبين الشكل (ب). حيث أن كل مستوى ذرى من المستويات $2s^1, 1s^2$ قد إنشق إلى مستويين متقاربين. والان يمكننا الحديث عن مستويات الطاقة $2p\ 2s^1 1s^2$ فى الجزيئة بنفس الطريقة ولكن آخذين فى الاعتبار أن كل مستوى من هذه المستويات يتكون من مستويين فرعيين.



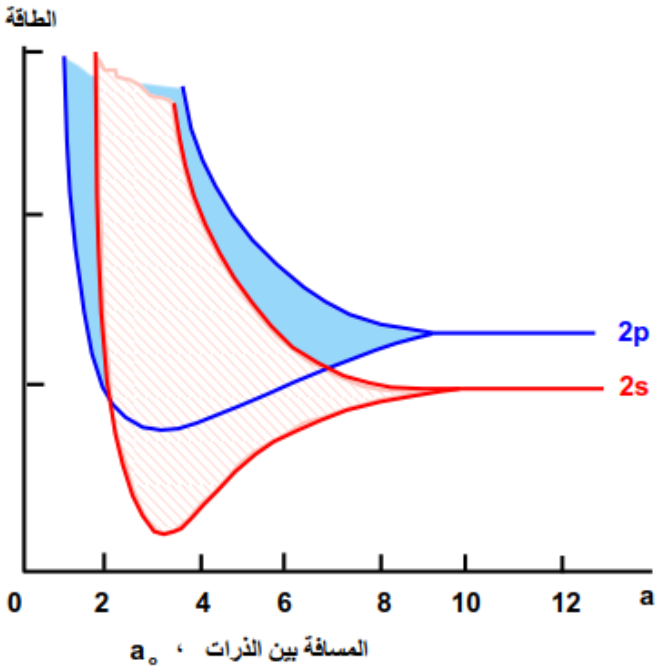
مخطط يبين تحول شكل طيف الطاقة من ذرة الليثيوم إلى جزيئة ثم إلى حالة معدنية (مادة صلبة)

يعتمد مقدار الانشقاق على مسافة التفاعل بين نويات الذارت فى الجزيئة، حيث يكون الانشقاق أكبر كلما اقتربت المسافة بين النويات والعكس صحيح. كما يعتمد الانشقاق على نوع المدار الذري $2p\ 2s\ 1s$ حيث يكون الانشقاق فى المستوى 2p أكبر منه فى حالة المستوى 2s والذي بدوره يكون اكبر منه فى حالة

المستوى 1s. و بالتالى يمكن النظر إلى الليثيوم الصلب كما لو كان جزيئ ليثيوم ضخم يحتوي على عدد كبير جدا من الذارت.

ولمعرفة شكل طيف الطاقة فى الحالة الصلبة نتخيل أن كل مستوى طاقة فى الذرة انشق إلى عدد N من المدارات الفرعية المتقاربة، حيث N هو عدد الذرات فى الصلب ، كما في الشكل (ج)، فإن المستويات الفرعية المنبثقة تكون متناهية القرب من بعضها البعض وتكّون حزمة من الطاقة (شريط أو نطاق طاقة energy band). و أن طيف الطاقة فى الحالة الصلبة يتكون من مجموعة من حزم الطاقة يفصل فيما بينها ما يسمى بفجوات طاقة energy gaps. فجوات الطاقة هذه هى مناطق (حزم) طاقة ممنوعة، أى لا يمكن أن تشغل بالالكترونات، تماما مثل المناطق التى تفصل بين مستويات الطاقة المتفردة فى الذرة الحرة والتى تعتبر مناطق محرمة على الالكترونات.

يعتبر أتساع مستويات الطاقة المنفردة (نتيجة الانشقاق) لتكوين حزم الطاقة من اهم الخصائص الاساسية للجسم الصلب. ويمكن القول أن حزمة الطاقة الاعلى تكون أكبر اتساعا وذلك بسبب أن مستوى الطاقة الاعلى (الذي كوّن هذه الحزمة) يكون ذو نصف قطر أكبر وبالتالى يتأثر بقوة جذب اصغر، وعلى النقيض، فإن مستويات الطاقة السفلى المقابلة لمدارات تكون مرتبطة بقوة كبيرة جدا نتيجة صغر نصف قطر المدار. يبين الشكل التالي حزم الطاقة 2s و 2p لفلز الليثيوم مرسومة كدالة لثابت الشبيكة a. نلاحظ من الرسم أن اتساع الحزمة يزداد مع تناقص a.



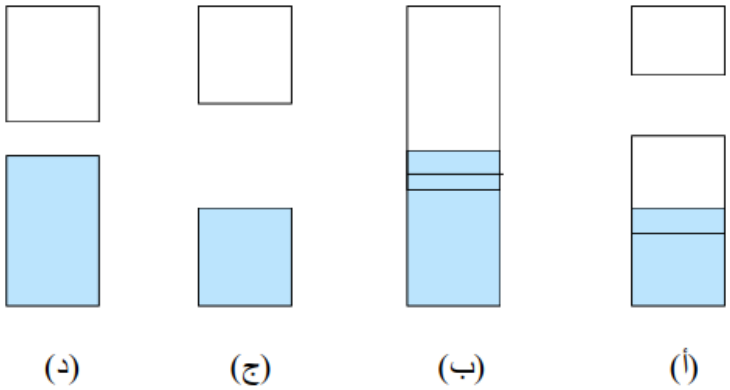
مخطط حزم الطاقة فى بلورة الليثيوم

٢- تصنيف المواد الصلبة

إن الصفات الكهربائية للمواد الصلبة تتحدد بتركيب حزم طاقتها ومدى إنشغالها بالالكترونات. وتنقسم المواد الصلبة إلى صنفين رئيسيين هما المعادن والمواد العازلة. المعدن هو صلب يسرى فيه التيار عند تطبيق مجال كهربائي عليه، بينما المادة العازلة لا تسمح بمرور التيار.

يمكن التمييز بين الصنفين استنادا إلى مفهوم ودور حزم الطاقة فى التوصيل الكهربائي. ينص هذا المفهوم على أن حزمة الطاقة الممتلئة تماما لا تحمل التيار الكهربائي حتى فى وجود المجال الكهربائي. وبناء على ذلك، فإن الصلب يسلك سلوك المعدن عندما تكون بعض حزم الطاقة ممتلئة جزئيا. وحيث أن إشغال الالكترونات لحزم الطاقة يتم وفقا لمبدأ "باولى" للاستبعاد فإن كل حزمة طاقة سوف تمتلئ بنفس كيفية امتلاء مستويات الطاقة فى الذرة الحرة.

تسمى أعلى حزمة طاقة مشغولة بالالكترونات بنطاق التكافؤ valance band بينما تسمى الحزمة الخالية بنطاق التوصيل conduction band (الشكل أ ادناه). إذا لم يكن نطاق التكافؤ ممتلئا تماما بالالكترونات يطلق عليه نطاق توصيل أو نطاق التكافؤ حيث يكون متداخل مع نطاق التوصيل (الشكل ب) وفى هذه الحالة يكون من السهل رفع الكترونات التكافؤ إلى النطاق الاعلى ومن ثم تقوم بالتوصيل عند تطبيق مجال كهربائي. تسمى المواد التى لها التركيب السابق لحزم الطاقة بالموصلات conductors مثل المعادن وبعض الفلزات مثل الليثيوم والصوديوم.



تركيب حزم الطاقة فى المادة الصلبة

اما فى المواد العازلة فيكون نطاق التكافؤ ممتلئ تماما ويكون نطاق التوصيل خال تماما بالاضافة إلى وجود فجوة طاقة كبيرة تفصل بين النطاقين (الشكل ج) الامر الذي معه يتعذر انتقال الالكترونات من نطاق التكافؤ إلى نطاق التوصيل إلا عند تطبيق مجال كهربائي متناهى فى الكبر، لذلك تسمى هذه المواد بالعازلة أو رديئة التوصيل insulator من أمثلة هذه المواد يوجد الماس وفية يبلغ مقدار فجوة الطاقة حوالى 6 eV.

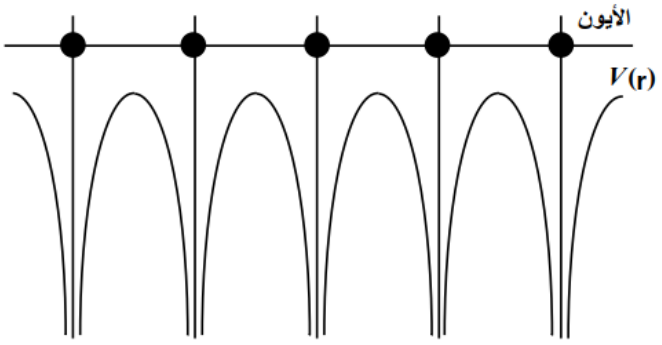
وبشكل عام، تكون فجوة الطاقة فى المواد العازلة أكبر بكثير من ٤ الكترون فولت. ولكن توجد بعض المواد العازلة مثل السيليكون والجرمانيوم، على سبيل المثال، لها تركيب يشبه تركيب الماس مع وجود فجوة طاقة صغيرة نسبيا (حوالي 1eV)(الشكل د). لذلك تكون هذه المواد رديئة التوصيل عند درجات الحرارة المنخفضة. وعند درجة حرارة الغرفة فإن نسبة قليلة من الالكترونات تكتسب طاقة حركية نتيجة التهيج الحراري وتتمكن من القفز من نطاق التكافؤ عبر فجوة الطاقة إلى نطاق التوصيل عند تطبيق مجال كهربائي مسببة تيار ملموس، لذلك تسمى مثل هذه المواد بأشباه الموصلات semiconductors حيث تقع قيمة توصيليتها الكهربائية بين المواد الموصلة والمواد العازلة.

٣- نظرية بلوخ لحزم الطاقة BLOCH THEOREM FOR ENERGY BANDS

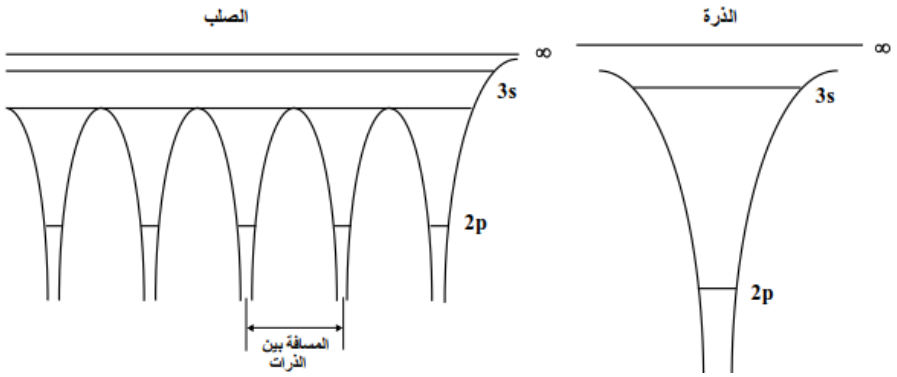
افترض العالم بلوخ أن الالكترونات تتحرك فى المواد المتبلورة تحت تأثير بئر جهد دورى ناتج عن تفاعل الالكترون مع كل الذارت الموجودة فى الصلب وكذلك مع باقى الالكترونات الاخرى. لذلك يمكن تعيين سلوك الالكترون فى البلورة من دراسة معادلة شرودنكر:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\psi(r) = E\,\psi(r)$$

حيث ان $\psi(r)$ هي دالة الحالة و E طاقة الالكترون و $V(r)$ هو جهد البلورة وهو عبارة عن بئر جهد دوري يتضمن تفاعل الالكترون مع كل الذرات الموجودة في الصلب بالاضافة الى تفاعلة مع باقي الالكترونات الاخرى. و لهذا الجهد نفس التمثيل الانتقالي للبلورة، اي ان: $V(r+R) = V(r)$ حيث R هو متجة الانتقال الشبيكي، وكما موضح بالشكل ادناه.



مخطط لجهد البلورة بالنسبة للإلكترون $V(r) \propto \frac{-1}{r}$



مقارنة بين مخطط طيف الطاقة لذرة الصوديوم و صلب الصوديوم

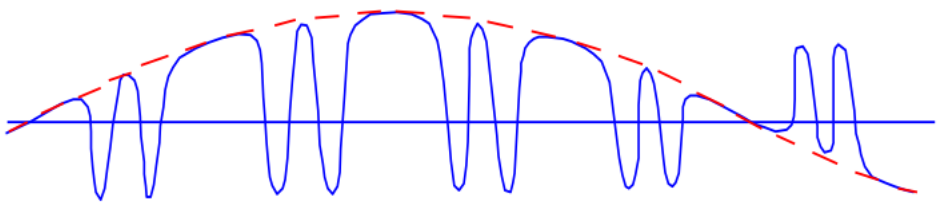
يكون حل معادلة شرودنكر طبقا لنظرية بلوخ للجهد الدورى V (r) على الصورة الاتية:

$$\psi(r) = e^{i\,k\cdot r}\,u_k(r)$$

حيث يكون للدالة $u_k(r)$ نفس التماثل الانتقالي للشبيكة، وبالتالي فأن: $u_k(r+R) = u_k(r)$ و المتجه k هو كمية ترتبط بكمية حركة (زخم) الجسيم.

تعرف دالة الحالة $\psi(r) = e^{i\,k\cdot r}\,u_k(r)$ بدالة بلوخ وهي دالة لها العديد من الخصائص:

<u>أولا</u>، لهذه الدالة شكل موجة مستوية متحركة، كما هو ممثل بالعامل $e^{ik.r}$، مما يعنى أن الالكترون ينتشر خلال البلورة مثل الجسيم الحر. يكون تأثير الدالة $u_k(\boldsymbol{r})$ هو تعديل هذه الموجة لكى تتذبذب السعة بشكل دورى من خلية إلى أخرى، كما هو مبين بالشكل ادناه ومع ذلك فإن السلوك الاساسى لدالة الحالة لا يتأثر، كما هو الحال فى الموجة المتحركة.



دالة بلوخ. يمثل الخط المتقطع الموجة $e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}$ التى تم تعديلها بواسطة $u_k(\mathbf{r})$ كدالة ذرية.

اذا كان حقاً الالكترون حراً تماماً فان دالة الحالة ناخذ الصيغة التالية: $\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\,k\cdot r}$

مما يعني ان الدالة $u_k(\boldsymbol{r})$ كمية ثابتة. لكن في الحقيقة ان الالكترون ليس حراً نظراً لتفاعله مع الشبيكة وهذا التفاعل يحدد الطابع الخاص للدالة الدورية $u_k(\boldsymbol{r})$.

ثانياً: نظراً لان الالكترون يتصرف كموجة لها المتجه k، فأن للإلكترون موجة $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ حسب قاعدة دي برولي و بالتالي يمتلك زخماً مساوياً لـ $\vec{p} = \hbar\,\vec{k}$ وهذا يسمى بـ زخم البلورة للالكترون.

ثالثاً: دالة بلوخ $\psi(r)$ تمثل المدار البلوري و تكون دالة غير متمركزة خلال الصلب كله و غير متمركزة حول اي ذرة معينة. وهكذا يكون الالكترون مشترك بواسطة البلورة ككل. وهذا يتفق مع البند اولاً الذي وصفنا فيه ان الالكترون يسلك سلوك الموجة المتحركة.

الان، نعيد كتابة معادلة شرودينجر بدلالة الطاقة وذلك بالتعويض فى المعادلة عن الدالة ψ_k بدالة بلوخ وحذف العامل $e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}$ وبعد اجراء العمليات اللازمة نحصل على:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla + i\,\vec{k}\right)^2 + V(r)\right] u_k(r) = E_k u_k(r)$$

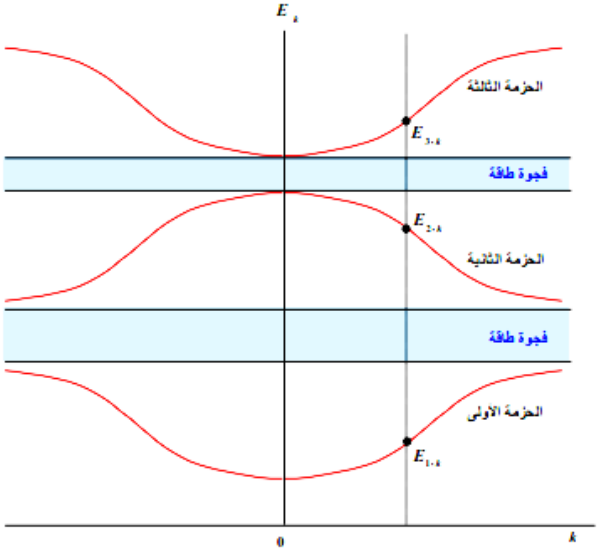
وهذه المعادلة فى الحقيقة تمثل معادلة الموجة للدالة الدورية $u_k(\boldsymbol{r})$. وبحل هذه المعادلة نحصل على القيم الذاتية للطاقة. لاحظ أن المؤثر داخل الاقواس المربعة يكون دالة صريحة فى **k** وبالتالى فإن كلا الدالتين الذاتيتين والقيم الذاتية تعتمد على **k** .

لا تؤدى معادلة القيمة الذاتية إلى حل واحد ولكن تؤدى إلى حلول عديدة، حيث يوجد لكل قيمة من قيم **k** العديد من الحلول التى تمثل مجموعة من الطاقات المنفردة E_{1k}, E_{2k}،.....، كما يبين الشكل التالي.

وحيث أن هذه الطاقات تعتمد على **k** فإنها تتغير بشكل متواصل عند تغير **k** على مدى قيمها. وينتج عن كل مستوى طاقة حزمة طاقة، كما هو مبين بالشكل. سنشير من الان فصاعدا إلى القيمة الذاتية للطاقة بالرمز $E_n(\mathbf{k})$ ، حيث يشير الدليل n إلى رقم الحزمة.

لاحظ أن عدد حزم الطاقة يكون كبير (عادة مالانهاية) ولكن نجد أن الحزم السفلية فقط تكون مشغولة بالالكترونات وتغطى كل حزمة مدى معين من الطاقة يمتد من اقل قيمة تأخدها إلى أعلى قيمة عند رسمها

فى فضاء **k**. تكون الفترات المحصورة بين الحزم ممثلة لفجوات الطاقة وهى مناطق طاقة ممنوع شغلها بالالكترونات. لاحظ أيضا أن أهمية رسم طيف الطاقة فى فضاء **k** تكمن فى أنه يمكن تصنيف حالات الالكترون خلال الحزمة طبقا لكمية الحركة (الزخم) الذي يكون دالة في **k**.

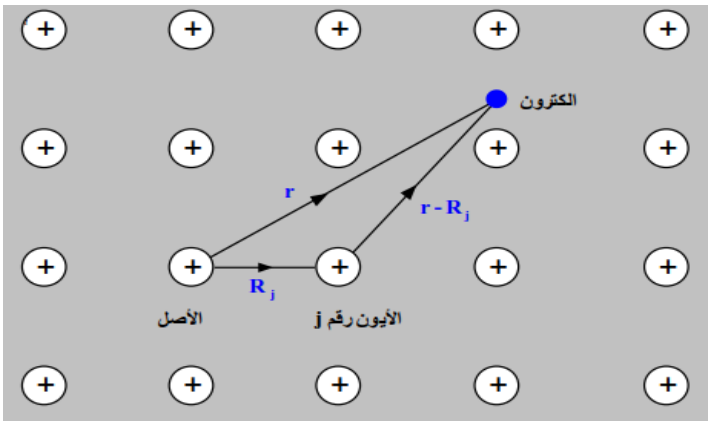


حزم وفجوات الطاقة.

الان، نتحول بالدراسة إلى الجهد البلوري **V(r)** وتأثيره على الالكترون. يتكون هذا الجهد من جزئين: الاول، هو تفاعل الالكترون مع القلب الايونية المكونة للشبيكة والجزء الثانى هو تفاعله مع الالكترونات الاخرى التى تتحرك خلال الشبيكة، وبالتالى يمكن كتابة الجهد **V(r)** على هيئة مجموع جهدين على الصورة،

$$V(r) = V_i(r) + V_e(r)$$

حيث يمثل الحد الاول تفاعل الالكترون مع القلوب الايونية ويمثل الحد الثانى التفاعل مع الالكترونات. يمكن كتابة الحد الايونى على الصورة: $V_i(r) = \sum_i v_i(\vec{r} - \overrightarrow{R_j})$ حيث ان: $v_i(\vec{r} - \overrightarrow{R_j})$ هو جهد الايون الموضوع عند متجه الشبيكة $\overrightarrow{R_j}$ كما مبين في الشكل التالي. اما علامة المجموع فتعني الجمع على كل الايونات. و من الواضح ان لـ $V_i(r)$ نفس دورية الشبيكة.



تفاعل الالكترون مع القلوب الأيونية.

يسمى الجهد $V_e(r)$ بتفاعل الكترون – الكترون و يسبب العديد من العقبات ويجعل المعالجة النظرية صعبة جدا للاسباب التالية:

اولاً: يمكن حساب هذا الجهد فقط اذا علمنا كل حالات الالكترونات الاخرى (وهذه الحالات غير معلومة بشكل واضح).

ثانياً: هذا الجهد لا يمتلك صفة الدورية، و ذلك لان الالكترونات لا تكون في حركة ثابتة فسي الشبيكة.

ثالثاً: لغرض المعالجة الصحيحة لهذا الجهد، يجب الاخذ بالاعتبار حركية كل الالكترونات في نفس الوقت، وليس حركة الكترون واحد في زمن معين. وهذا الامر اكثر صعوبة في الوقت الحاضر.

بناءً على ما ذكر من الصعوبات، ولأن تفاعل الكترون – الكترون يعتبر تفاعلاً ضعيفاً للاسباب المذكورة في الموضوع السابق، لذا يكون التاثير السائد لهذا التفاعل هو ان الالكترونات تنشر نفسها حول الايونات بحيث تحجبها عن الالكترونات الاخرى مما يجعل تفاعل الكترون – الكترون اكثر ضعفاً حتى الى المدى الطويل.

الان يمكن كتابة تعبير مقرب للجهد البلوري الكلي كما يلي:

$$V(r) = \sum_j \nu_s(\vec{r} - \overrightarrow{R_J})$$

حيث $\nu_s(\vec{r} - \overrightarrow{R_J})$ هو جهد الايون المحجوب المتمركز عند نقطة الشبيكة $\overrightarrow{R_J}$. ونظراً لكونه جهداً دورياً، فأنه يحقق متطلبات نظرية بلوخ.

٤- عدد الحالات في حزمة الطاقة:

لحساب عدد الحالات في حزمة الطاقة سوف نعتبر حالة البعد الواحد لغرض التبسيط، حيث في هذه الحالة ستكون دالة بلوخ كما يلي:

$$\psi(r) = e^{i\,kx}\,u_k(x)$$

واذا فرضنا ان هذه الدالة تحقق شرط الحدود الدورية فان القيم المسموحة لـ k تاخذ الصيغة التالية:

$$k = n\frac{2\pi}{L} \qquad \ldots\ldots\ldots (H.W)$$

حيث $n = 0, \pm1, \pm2, \ldots..$ ، مع ملاحظة ان الدالة $u_k(x)$ هي من يمتلك صفة الدورية، اي ان: $u_k(x + L) = u_k(x)$.

وكما علمنا سابقاً بأن القيم المسموحة لـ k تشكل شبكة منتظمة طولها L بفاصلة بينية مقدارها $\frac{2\pi}{L}$ ، لذا يمكن الحصول على عدد الحالات داخل المنطقة الاولى التي طولها $\frac{2\pi}{a}$ كما يلي:

$$\frac{\frac{2\pi}{a}}{\frac{2\pi}{L}} = \frac{L}{a} = N$$

a هي المسافة بين الذرات، N عدد خلايا الوحدة. وهذا يؤكد ان كل حزمة طاقة تحتوي على N من المستويات في المنطقة الاولى، و طبقاً لمبدأ باولي للاستبعاد فأن كل مستوي يملأ بألكترونين متعاكسين بالبرم فبالتالي يكون اقصى عدد من الالكترونات يمكن ان يشغل الحزمة الواحدة هو 2N

٥- الكتلة الفعالة Effective mass:

عندما يتعرض الالكترون داخل البلورة الى قوة خارجية نتيجة تسليط مجال كهربائي، فأن هذه القوة ستمثل معدل التغير في زخم البلورة $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ وان الالكترون يتحرك بتعجيل مقداره يعطى بما يلي:

$$a_i = \frac{dv_i}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial^2\varepsilon}{\partial k_i \partial k_j}F_j \quad \ldots\ldots\ldots (1)$$

و بمقارنة العلاقة اعلاه بقانون نيوتن الثاني: $\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{1}{m}\vec{F}$ ، حيث يتضح من العلاقتين انه لا يمكن تطبيق معادلة قانون نيوتن بشكلها الحالي، لان الالكترون داخل البلورة يعاني من تاثيرات قوى اخرى اضافة الى القوة الناتجة بسبب المجال الكهربائي. لذا، يجب استخدام مفهوم اخر وهو ان تكون كتلة الالكترون متغيرة و يرمز لها بالرمز m^*، ومعادلة قانون نيوتن تصبح بالشكل: $\vec{a} = \frac{1}{m^*}\vec{F}$ بحيث عند مقارنتها مع العلاقة (1) اعلاه نجد ان:

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2\varepsilon}{\partial k_i \partial k_j} \ldots\ldots (2)$$

حيث نلاحظ ان الكتلة العددية الثابتة القيمة قد استبدلت بالكتلة الفعالة m^*. وانه لغاية في الاهمية استخدام مفهوم الكتلة الفعالة لمعرفة مسار الالكترون خلال حزمة الطاقة في بلورة نقية جدا.

كذلك، لكي نفهم سبب مرور التيار في البلورة على اساس تكون الحزم فلابد من الاشارة الى ما يلي:

١-اذا كانت الحزمة مملوءة جزئيا فان الالكترونات تنزاح باتجاه المجال المسلط، وبذلك تكون الكتلة الفعلية موجبة و عدد الالكترونات التي تتحرك باتجاه المجال اكثر من عدد الالكترونات المتحركة بعكس اتجاه المجال، لذلك يتولد التيار في البلورة.

٢-عندما تكون الحزمة مملوءة كليا، فان الالكترونات لا تنزاح و عليه فلا يتولد تيار (التيار يساوي صفر)، اي ان متجه الموجة $(\vec{k} = 0)$.

٦-مفهوم الفجوات الموجبة:

اذا كانت حزمة الطاقة مملوءة كليا (انظر النقطة ٢ اعلاه) ماعدا الحالة الالكترونية التي تمتلك متجه موجة $\vec{k} \neq 0$، فيمكن القول انه توجد فجوة hole عند تلك الحالة ومتجه موجتها يساوي $\overrightarrow{k'}$. وان هذه الفجوة تتحرك في المجال بكتلة فعالة معاكسة للكتلة الفعالة للالكترون، اي ان: $m_h^*(\vec{k}) = -m_e^*(\vec{k})$

ان الفجوات تتولد عند الحافات العليا لحزمة الطاقة حيث تكون الكتلة الفعالة للالكترونات ذات اشارة سالبة، وعندها فان كتلة الفجوات تكون موجبة.

٧- كثافة الحالات في ثلاثة ابعاد:

نفرض وجود بلورة مكعبة طول ضلعها يساوي L و نفرض ان توزيع انماط الاهتزاز المسموحة في فضاء الطور k مشابهة لتوزيع انماط الاهتزاز في سلسلة خطية احادية الذرات طولها L على طول المحاور الديكارتية للفضاء k (k_x, k_y, k_z). وهذا يعني تطبيق الشروط الحدودية الدورية على N^3 من الذرات داخل

المكعب وبذلك فأن متجه الموجة k في الفضاء يمتلك المركبات k_x, k_y, k_z . و لايجاد كثافة الحالات يجب ان نعبر عن الحركة الموجية في الابعاد الثلاثة على النحو التالي:

$$U(x,y,z) = U_o\, e^{i\,(k_x\,x + k_y\,y + k_z\,z)} \qquad \ldots\ldots\ eq.1$$

$$U(x+L, y+L, z+L) = U_o\, e^{i\,(k_x\,(x+L) + k_y\,(y+L) + k_z\,(z+L))}$$

$$U(x+L, y+L, z+L) = U_o\, e^{i\,(k_x\,x + k_y\,y + k_z\,z)}\ e^{i\,(k_x\,L + k_y\,L + k_z\,L)} \qquad \ldots\ldots\ eq.2$$

و بأستخدام الشروط الدورية الحدودية للمعادلتين اعلاه (١) و (٢):

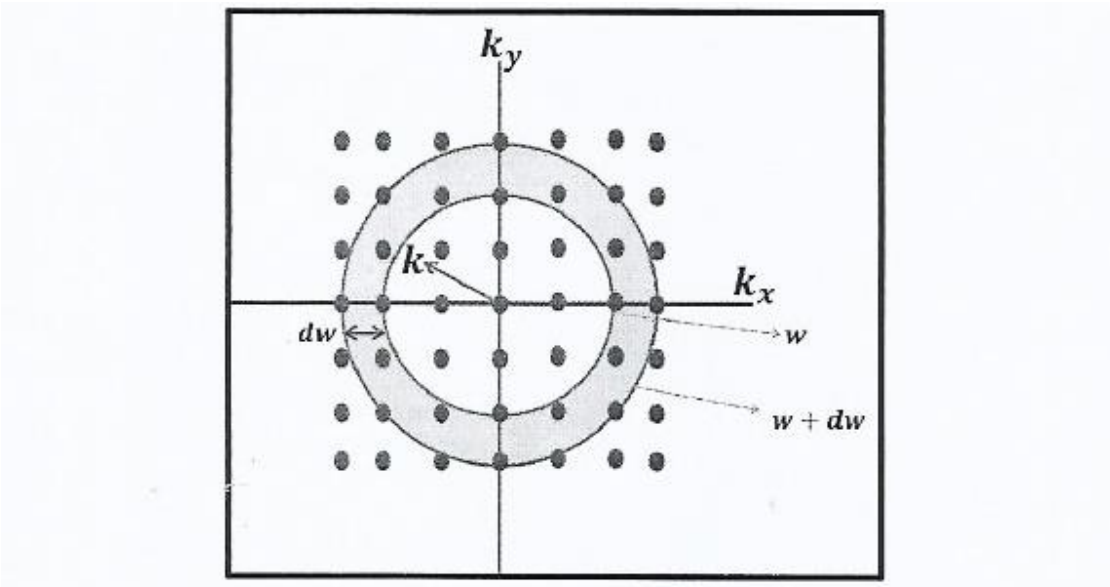
$$U(x+L, y+L, z+L) = U(x,y,z)$$

$$U_o\, e^{i\,(k_x\,x + k_y\,y + k_z\,z)}\ e^{i\,(k_x\,L + k_y\,L + k_z\,L)} = U_o\, e^{i\,(k_x\,x + k_y\,y + k_z\,z)}$$

$$e^{i\,(k_x\,L + k_y\,L + k_z\,L)} = 1$$

So, $\quad k_x = n\frac{2\pi}{L} \quad , \quad k_y = m\frac{2\pi}{L} \quad , \quad k_z = l\frac{2\pi}{L}$

حيث ان n, m, l هي اعداد صحيحة. و المسافة بين كل نقطتين متجاورتين تساوي $\frac{2\pi}{L}$. فاذا رسمنا القيم المسموحة لـ k_x, k_y, k_z في فضاء k فسوف تتشكل شبيكة ثلاثية الابعاد كما موضح بالشكل ادناه.



القيم المسموحة لـ k للموجة تنتقل في ثلاثة ابعاد. القشرة الدائرية المضللة تستخدم لحساب عدد الانماط

ان كل نقطة في الشبيكة المتكونة هي تمثل نمطاً اهتزازياً واحداً. ان الهدف الاساس الان هو ايجاد عدد الانماط في داخل كرة نصف قطرها k و حجمها يساوي $\frac{4}{3}\pi k^3$ ، و بما ان كل نقطة في الشبيكة تشغل حجماً مقداره $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ لذا يكون عدد الانماط الكلية داخل هذه الكرة مساوياً لـ:

$$N_{T\ modes} = \frac{\frac{4}{3}\pi k^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{4}{3}\pi k^3 \frac{V}{(2\pi)^3} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots . eq.3$$

حيث ان L^3 يساوي V حجم البلورة. فالمعادلة اعلاه تعطي عدد جميع الموجات المسموحة التي تنتقل في جميع الاتجاهات. و للحصول على عدد الانماط في القشرة الكروية المحصورة بين k و $k+dk$ وذلك بأخذ المشتقة للمعادلة (٣) بالنسبة الى k:

$$dN_{T\ modes} = 4\,\pi\,k^2 \frac{V}{(2\pi)^3} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots . eq.4$$

اما عدد الانماط الواقعة بين الترددات ω و $\omega+d\omega$ والذي يعرف بـ كثافة الحالات $g(\omega)d\omega$ فنحصل عليه من تحويل المتغير k الى المتغير ω من خلال استخدام التعريف $\omega=v_{ph}k$، و بذلك المعادلة (٤) تصبح كما يلي:

$$g(\omega)d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\,\pi \left(\frac{\omega}{v_{ph}}\right)^2 \frac{1}{v_{ph}} d\omega \qquad \ldots\ldots .. \ eq.5$$

و عليه، فأن عدد الانماط $g(\omega)$ هو:

$$g(\omega) = \frac{V}{2\,\pi^2} \frac{\omega^2}{v_{ph}^3} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots \ eq.6$$

هذه المعادلة تستخدم ايضاً في نموذج ديباي للحرارة النوعية. ومن خلال هذه المعادلة ايضا نرى ان عدد الانماط $g(\omega)$ يزداد مع ω^2 خلافاً لحالة $g(\omega)$ في بعد واحد حيث تكون كمية ثابتة.

٨ـكثافة الحالات للشبيكة:

ان كثافة الحالات تلعب دوراً مهماً في بعض الظواهر الفيزيائية المتعلقة باهتزازات الشبيكة و على الخصوص الحرارة النوعية. والان سنناقش الدالة المناسبة للشبيكة الحقيقية ومن الممكن استخدام هذه النتيجة للحصول على النتيجة الدقيقة للحرارة النوعية.

و من دون التطرق الى التفاصيل، فقد تم اشتقاق معادلة كثافة الحالات والحصول على الصيغة التالية:

$$g(\omega) = \frac{2L}{a\,\pi\,\omega_m\left|cos\frac{k\,a}{2}\right|} = \frac{2L}{a\,\pi\,\omega_m\left|\sqrt{1-sin^2\frac{k\,a}{2}}\right|}$$

$$= \frac{2L}{a\,\pi\,\omega_m\left|\sqrt{1-\frac{\omega^2}{\omega_m^2}}\right|} = \frac{2L}{a\,\pi\left|\sqrt{\omega_m^2-\omega^2}\right|}$$

حيث ان $g(\omega)$ عند $\omega=0$ تكون $\frac{2L}{a\,\pi\,\omega_m^2} = const.$ ثم تزداد بزيادة ω الى ان يصل $\omega = \omega_m$ فأن $g(\omega_m)=\infty$. و عندما تكون $\omega > \omega_m$ فأن تتلاشى لان قيمة التردد هذه تقع خارج حدود منطقة برليون.