

## الفصل الثاني: النظرية الكمية للإلكترونات الحرة

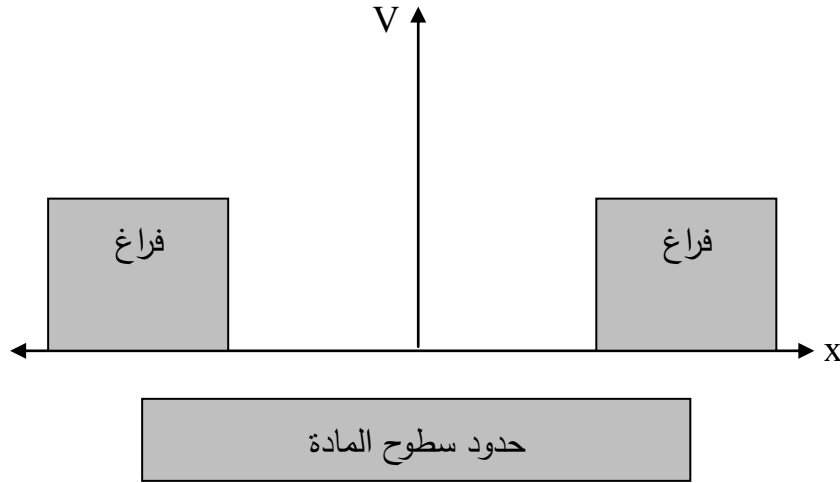
### 1- المقدمة:

سوف نناقش في هذا الفصل، نموذج التقليدي لغاز الإلكترونات الحرة ( النظرية الكلاسيكية) و النظرية الكمية للإلكترونات الحرة، و الحالة الدركية لغاز الالكترتون كما سوف نناقش أيضا، الحرارة النوعية الالكترونية للمعادن وفق النظرية الكمية و تأثير المجال المغناطيسي على حركة الإلكترونات الحرة ونبين على وجه الخصوص كيف أمكن استخدام رنين السيكلوترون (cyclotron resonance) وقياس تأثير هول (Hall's effect) الحصول على معلومات أساسية عن المعادن.

### 2- النموذج التقليدي لغاز الإلكترونات الحرة:

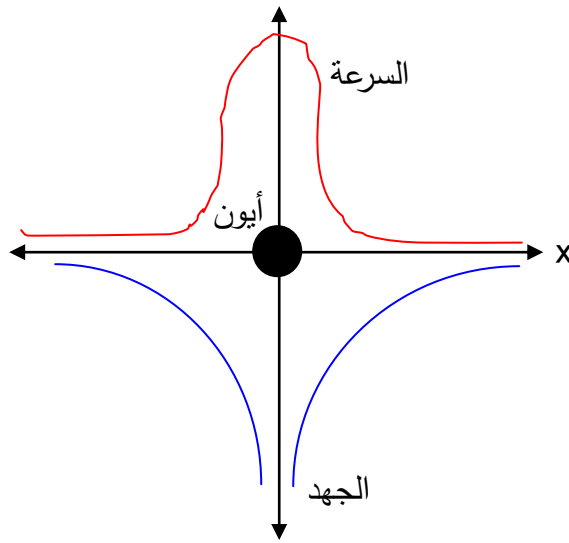
نموذج غاز الإلكترونات الحرة هو نموذج ظهر في القرن التاسع عشر لتصور شكل إلكترونات التوصيل في مادة الفلز. في هذا النموذج يمكن تخيل أن إلكترونات التوصيل حرة تماما ( مثل جزيئات الغاز) ماعدا وجود جهد على السطح الذي بدوره يقوم بحصر الإلكترونات داخل حدود العينة ولا تستطيع تجاوز سطوح المادة، كما هو مبين بالشكل (1-2). طبقا لهذا النموذج، فإن إلكترونات التوصيل تتحرك داخل العينة بدون تصادمات، ماعدا الانعكاس العرضي عند السطح، تماما كما في حالة جزيئات الغاز المثالي، لذلك نطلق على إلكترونات التوصيل غاز الإلكترونات الحرة.

الآن سنناقش بشئ من التفصيل نموذج الإلكترون الحر. من المدهش أن هذا النموذج يجب أن يصلح في كل الحالات بالرغم من أننا ومن الوهلة الأولى نتوقع تفاعل إلكترونات التوصيل بعضها مع بعض وتفاعلها أيضا مع الأيونات في الخلفية. يكون هذا التفاعل قويا، لذلك تعاني الإلكترونات الخارجية من التصادمات بصفة مستمرة لذا يجب الأخذ في الاعتبار تصور الغاز على انه غير مثالي بدرجة كبيرة.



الشكل (1-2) مخطط الجهد في نموذج غاز الإلكترون الحر.

وهنا يبرز التساؤل التالي، إذا كان الأمر كذلك، فلماذا يصلح حينئذ نموذج غاز الإلكترون الحر؟ كانت الإجابة على هذا التساؤل الأساسي غير معروفة للعلماء الأوائل الذين افترضوا هذا النموذج. أما الآن فنحن نعرف الإجابة، ولكن حيث إنها تحتاج استخدام بعض مفاهيم ميكانيكا الكم والتي سيتم مناقشتها لاحقاً وسنقدم هنا بياناً كيفي مختصراً. السبب في أن التفاعلات بين الأيونات تبدو ضعيفة سيتضح فيما يلي. بالرغم من أن الإلكترون يتفاعل مع الأيون من خلال الجذب الكولومي، إلا أن التأثيرات الكمية تدخل جهداً تنافرياً إضافياً يحاول إلغاء الجذب الكولومي، الأمر الذي يكون الجهد الكلي الناتج والذي يعرف بالجهد-الزائف (pseudopotential) ضعيفاً وخاصة في حالة المعادن القلوية. الطريقة الأخرى لتوضيح ذلك وهي ملاحظة أنه، عندما يمر إلكترون بأيون فإن سرعته تتزايد بشكل فجائي في المنطقة المجاورة للأيون، نتيجة التناقص في الجهد، كما هو موضح في الشكل (2-2). لهذا السبب، فإن الإلكترون يقضي جزءاً صغيراً من الوقت بالقرب من الأيون، حيث يكون الجهد قوياً بينما يقضي معظم الوقت حيث يكون الجهد ضعيفاً وبذلك يتصرف الإلكترون كما لو كان حراً. هذا بالإضافة إلى أنه، عندما يكون الإلكترون بعيداً جداً عن الأيون فإنه يكون محجوباً عنه بواسطة تأثير الإلكترونات الأخرى والتي يمكن القول بأنها تكون قناعاً يحجب الإلكترون عن النواة.



الشكل (2-2) تغير السرعة الموضعية للإلكترون في الفراغ.

نأتي الآن إلى تفاعل الإلكترونات فيما بينها وإلى أسباب أن هذا التفاعل يكون ضعيفا. في الحقيقة، يوجد سببين لذلك: السبب الأول هو أنه طبقاً لمبدأ باولي للاستبعاد فإن الإلكترونات التي لها لف مغزلي متوازي تميل إلى البقاء بعيدة بعضها عن بعض. ثانياً، وحتى لو كان اللف المغزلي في اتجاه مضاد فإن الإلكترونات تميل إلى البقاء بعيدة بعضها عن بعض لكي تقلل طاقة النظام. عندما يصبح الإلكترونين متقاربين جداً فإن طاقة الوضع الكولومي تصبح كبيرة جداً وهذا ينتهك ميل النظام الإلكتروني بأن يكون له أقل طاقة ممكنة. عند تنفيذ هذين الاعتبارين رياضياً تنتج الحالة التالية يحاط كل إلكترون بمنطقة كروية تكون خالية من الإلكترونات الأخرى وتسمى الفجوة وأحياناً تسمى بفجوة فيرمي (Fermi hole) ويكون لها نصف قطر حوالي  $1 \text{ \AA}$ . عندما يتحرك إلكترون فإن فجوته تتحرك معه. الآن، نرى لماذا يكون التفاعل فيما بين الإلكترونات ضعيفاً. إذا قمنا بفحص التفاعل بين إلكترونين معينين فإننا نجد أن الإلكترونات الأخرى تقوم بتوزيع نفسها بالشكل الذي معه يكون الإلكترونان قيد الفحص محجوبين أحدهما عن الآخر، وبالتالي فإن التفاعل بينهما يكون ضعيفاً جداً. يختلف غاز الإلكترون الحر في الفلزات عن الغاز العادي في بعض النواحي المهمة: أولاً، يكون غاز الإلكترون الحر مشحوناً على خلاف الغاز العادي (الذي يكون عبارة عن جزيئات متعادلة). في الحقيقة، يمكن تشبيه غاز الإلكترونات الحر بالبلازما (Plasma). ثانياً، يكون تركيز الإلكترونات في الفلزات كبيراً جداً،  $N=10^{29} \text{ electron/cm}^3$ ، بينما يكون

الغاز العادي في حدود  $10^{23}$  electron/cm<sup>3</sup> ، وبمقارنة حجم عدد الإلكترونات (أو الجزيئات) مع حجم البلورة (أو الحاوية في حالة الغاز العادي) نجد انه يمكن إهمال حجم الإلكترونات. أخيراً يمكن تلخيص أهم فروض نموذج غاز الإلكترونات الحرة التقليدي في الفلزات على النحو التالي:

- 1- يشبه غاز الإلكترونات الحرة الغاز العادي في كثير من الأوجه منها: أنه يمكن إهمال حجم مكوناته (حجم الإلكترونات) مقارنة بالحجم الكلي الذي يشغله الغاز، ويمكن إهمال القوى المتبادلة بين الإلكترونات الحرة 2- يمكن وصف حركة كل جسيم (كل الإلكترون) بالإحداثيات ومركبات السرعة. 3- يكون الغاز الإلكتروني في حالة اتزان حراري مع الشبكة البلورية.

مما سبق يمكننا أن نخلص بأنه طبقاً لنظرية غاز الإلكترونات الحرة، يمكننا أن نتخيل أن الفلز كما لو يتكون من أيونات موجبة موزعة بشكل هلامي منتظم وتسمح في بحر من الشحنات السالبة وبذلك لا يوجد تفاعل بين الإلكترونات والأيونات.

### 3- النظرية الكمية للإلكترونات الحرة:

بعد اكتشاف مبدأ الانفراد لباولي استطاع سمر فيلد (Summerfield) استخدام نفس المبدأ الكتلونات الغاز الحرة في المعادن لحل مشاكل التي غانت منها نظرية درود ان الاختلاف الرئيسي بين النظريتين هو ان النظرية الكلاسيكية لدرود اعتمدت سرعة الإلكترونات على اساس توزيع ماكسويل بولتزمان والتي تعطى بالصيغة التالية:

$$F_{M.B} = Ae^{\left(-\frac{\epsilon}{k_B T}\right)} \quad 2-1$$

و طبقاً لميكانيكا الكم فإن طاقة الإلكترون في المعدن تكون مقننة، كما يبين الشكل (2-3). يتضح من هذا الشكل أن الإلكترونات في المعدن (عند درجة حرارة  $T=0$  K) تحتل مستويات طاقة طبقاً لمبدأ بولي للاستبعاد والذي ينص على أن كل مستوى طاقة يمتلئ بعدد إلكترونين اثنين، لأحدهما عزم مغزلي لأعلى وللآخر عزم مغزلي لأسفل. وبناء على ذلك، فإن إلكترونين اثنين فقط يشغلان مستوى الطاقة السفلى وآخرين يشغلان المستوى الذي يعلوه وهكذا حتى يتم تسكين جميع الإلكترونات. تسمى طاقة أعلى مستوى مشغول بطاقة فيرمي (Fermi energy) وتكون في حدود

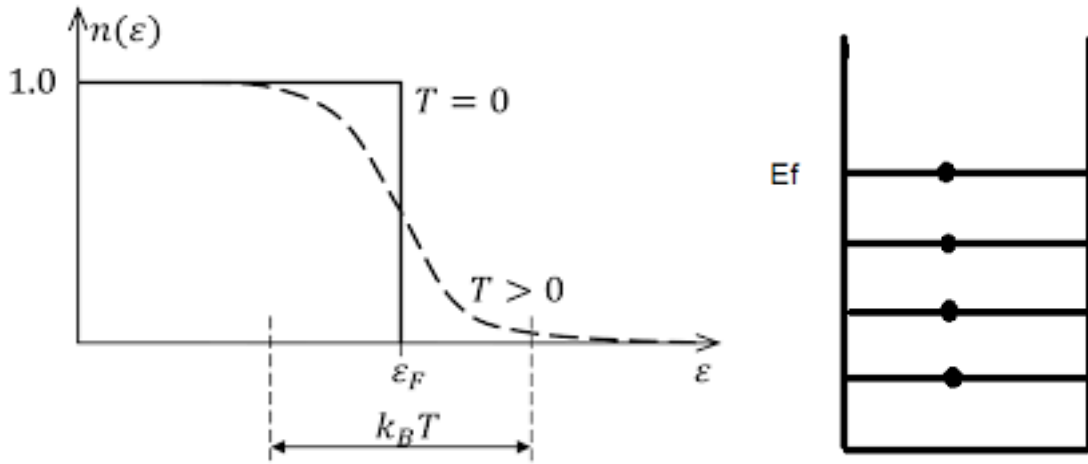
5 إلكترون فولت، كما يسمى مستوى الطاقة هذا بمستوى فيرمي (Fermi level). يتم وصف توزيع الإلكترونات بدلالة الطاقة عادة بواسطة دالة تسمى دالة توزيع الطاقة (energy distribution function) وتمثل هذه الدالة احتمال وجود (كثافة الحالة) الإلكترونات عند طاقة معينة. عند درجة الصفر المطلق ( $T=0\text{ K}$ ) تكون دالة التوزيع على الصورة

$$f(E) = \begin{cases} 1 & E < E_F \\ 0 & E > E_F \end{cases} \quad 2-2$$

تدل المعادلة السابقة على أن مستويات الطاقة التي تقع أسفل مستوى فيرمي ( $E_F$ ) تكون ممتلئة تماما، بينما تكون المستويات التي تقع أعلى مستوى فيرمي فارغة تماما، كما هو مبين في الشكل (2-3). عندما ترتفع درجة حرارة النظام ( $T > K$ ) فإن الطاقة الحرارية تثير الإلكترونات ويتغير شكل دالة التوزيع. في الحقيقة، لا تتوزع الطاقة الحرارية على جميع الإلكترونات بالتساوي، كما في المعالجة التقليدية، وذلك لأن الإلكترونات التي تقع بعيدا أسفل مستوى فيرمي لا تمتص الطاقة وذلك لأنها لو فعلت فإنها ستنتقل إلى المستوى الأعلى والذي يكون مشغولا بالفعل وبالتالي فإنها لا تمتص الطاقة. لهذا فإن الإلكترونات التي تمتص الطاقة الحرارية هي فقط الإلكترونات التي تقع قريبة أسفل مستوى فيرمي وبالتالي تثار وتنتقل إلى مستويات طاقة أعلى من مستوى فيرمي. يكون عدد هذه الإلكترونات صغيرا بالمقارنة بالعدد الكلي للإلكترونات ويكون هذا العدد هو الذي يشارك في السعة الحرارية وفي هذه الحالة تكتب دالة التوزيع (عند  $T \neq k$ ) على الصورة،

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1} \quad 2-3$$

تسمى الدالة السابقة دالة توزيع فيرمي-ديراك (Fermi-Dirac). وكما يبين الشكل (2-3) تكون هذه الدالة شبيهة إلى حد كبير بدالة التوزيع عند الصفر المطلق ما عدا بالقرب من مستوى فيرمي، حيث تم إثارة عدد صغير من الإلكترونات أسفل المستوى وانتقلت إلى أعلاه. يمكن استخدام دالة التوزيع (المعادلة 2-3) لحساب الطاقة الحرارية وبالتالي يمكن حساب السعة الحرارية للإلكترونات. يمكننا حساب السعة الحرارية بشكل جيد بواسطة تقريب مبسط كما يلي.



الشكل (2-3) أ- يتم ملئ مستويات الطاقة بالإلكترونات طبقاً لمبدأ باولسب- دالة توزيع فيرمي للإلكترونات عند درجة الصفر المطلق و درجة حرارة اعلى من الصفر.

بما أن الإلكترونات التي تقع في المدى  $kT$  من مستوى فيرمي هي فقط التي تتأثر، فإننا يمكننا أن نخلص بأن عددها يكون  $kT/E_F$ .

4- سطح فيرمي: Fermi Surface

الإلكترونات في المعدن تكون في حالة حركة عشوائية مستمرة ويمكن اعتبارها جسيمات حرة، لذلك فإن طاقة الإلكترونات تعتبر كلها طاقة حركة يمكن كتابتها على الصورة،

$$E = \frac{1}{2} m \cdot v^2$$

2-4

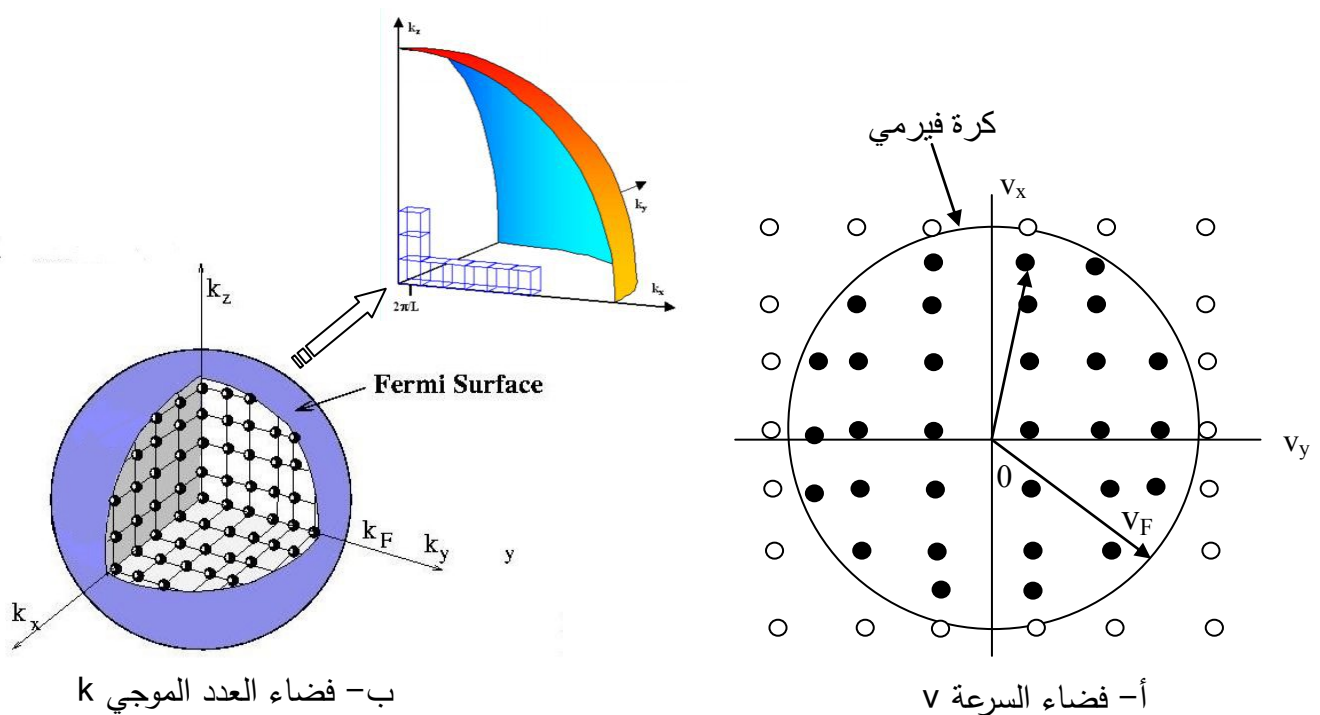
حيث  $v$  سرعة الجسيم

دعنا الآن ندخل مبدأ فضاء السرعة الذي تكون المحاور فيه هي  $v_x, v_y, v_z$ . تمثل كل نقطة في هذا الفضاء سرعة معينة (مقداراً واتجاهاً). لفهم وتعريف سطح فيرمي، ندرس إلكترونات التوصيل في فضاء السرعة. وبما أن الإلكترونات تتحرك بسرعات عديدة ومختلفة وعشوائية فإنه يمكن تمثيلها بنقط تملأ فضاء متجانساً، كما هو ممثل في الشكل (2-4) أ. يبين الشكل (2-4) ب فضاء العدد الموجي لمفهوم سطح فيرمي. يكون نصف قطر هذه الكرة هو سرعة فيرمي ( $v_F$ ) والتي ترتبط بطاقة فيرمي بالعلاقة،

$$E = \frac{1}{2} m^* v_F^2$$

2-5

لاحظ، على كل حال أن كل النقط الواقعة خارج الكرة تكون فارغة (من الإلكترونات) وسبب ذلك أن هذه النقط تمثل طاقات اكبر من  $E_F$  وتكون غير مشغولة بالإلكترونات عند  $T=0$  ك، كما بيننا من قبل. وهكذا، تكون جميع النقط داخل الكرة مشغولة بالكامل وتسمى هذه الكرة بكرة فيرمي وسطها يسمى سطح فيرمي.



الشكل (2-4) أ- مخطط يوضح كرة وسطها فيرمي.

يمثل سطح فيرمي أهمية كبيرة في العديد من ظواهر الحالة الصلبة، فعلى سبيل المثال، لا تتأثير خصائص الانتقال بشكل ملحوظ بدرجة الحرارة، حيث انه، عند رفع درجة الحرارة يثار فقط عدد قليل من الإلكترونات في الداخل وتنتقل إلى خارج سطح فيرمي ويكون لذلك تأثير طفيف جدا. تكون سرعة فيرمي كبيرة جدا، فعند التعويض في المعادلة السابقة بالطاقة  $E_F=5$  eV نجد أن  $v_F = (E_F/m^*)^{1/2} = 10^6$  m.s<sup>-1</sup> وهي أكبر من سرعة الضوء بمائة مرة. وهكذا فإن الإلكترونات

الموجودة عند سطح فيرمي تتحرك بسرعة كبيرة جدا، بالإضافة إلى أن سطح فيرمي لا يعتمد على درجة الحرارة.

تتبع قيمة طاقة فيرمي بالدرجة الأولى بواسطة تركيز الإلكترونات، فكلما زاد التركيز كلما ارتفع مستوى الطاقة الأعلى اللازم لتسكين كل الإلكترونات (الشكل (2-3) ب) وبالتالي تكون  $E_F$  أعلى. كما سنرى لاحقا، يمكن كتابة  $E_F$  على الصورة،

$$E_F = \frac{\hbar}{2m^*} \left( 3\pi^2 N \right)^{2/3} \quad 2-6$$

فيما يلي سنناقش تأثير سطح فيرمي على بعض الخصائص الفيزيائية التي تمت معالجتها من قبل.

### 5- حساب طاقة فيرمي للمعدن: Calculate of Fermi energy of metal

لحساب طاقة فيرمي لنموذج من معدن يحتوي على  $N$  من الإلكترونات الحرة وذلك بملاء مستويات الطاقة الدنيا من  $\epsilon = 0$  و لغاية  $\epsilon = \epsilon_F$  المطلوب إيجادها. ان عدد الإلكترونات التي تشغل مستوي معين من الطاقة  $\epsilon$  يساوي عدد الحالات  $g(\epsilon)$  عند مستوى الطاقة  $\epsilon$  حيث كل حالة تستوعب الإلكترونا واحدا فقط. ولذلك

$$N = \int_0^{\epsilon_F} g(\epsilon) d\epsilon \quad 2-7$$

حيث  $g(\epsilon)d\epsilon$  تمثل عدد الحالات المحصورة بين  $\epsilon$  و  $\epsilon + d\epsilon$  المتوفرة للإلكترون، وباستخدام نفس الطريقة لحالة فوتونات الجسم الاسود لإيجاد عدد الحالات  $g(\epsilon)d\epsilon$ . هناك تشابه تام بين هاتين الحالتين حيث حالتا يرم الإلكترون  $m_s = +\frac{1}{2}$  و  $m_s = -\frac{1}{2}$  اللتان تؤديان إلى تضاعف الحالة في فضاء الحالة (phase space) كتضاعف الحالات في فضاء الحالة لغاز الفوتونات نتيجة وجود اتجاهين ممكنين لاستقطاب الفوتونات، و بدلالة الزخم نجد ان

$$g(p)dp = \frac{8\pi V p^2 dp}{h^3} \quad 2-8$$



اما بالنسبة للإلكترون غير نسبي (non relativistic) لدينا

$$p^2 dp = (2m^3 \epsilon)^{1/2} d\epsilon \quad 2-9$$

و عليه

$$g(\epsilon)d\epsilon = \frac{8\sqrt{2\pi} Vm^{3/2}}{h^3} \epsilon^{1/2} d\epsilon \quad 2-10$$

و بالتعويض عن قيمة  $g(\epsilon)d\epsilon$  من المعادلة 2-10 في المعادلة 2-7

$$N = \frac{8\sqrt{2\pi} Vm^{3/2}}{h^3} \int_0^{\epsilon_F} \epsilon^{1/2} d\epsilon \quad 2-11$$

$$N = \frac{8\sqrt{2\pi} Vm^{3/2}}{h^3} \epsilon_F^{3/2} \quad 2-12$$

$$\epsilon_F = \frac{h^2}{2m} \left( \frac{3N}{8\pi V} \right)^{2/3} \quad 2-13$$

حيث  $\epsilon_F$  تمثل طاقة فيرمي، والمقدار  $\left(\frac{N}{V}\right)$  يمثل كثافة الإلكترونات الحرة في المعدن وعليه فان  $\epsilon_F$  لا تعتمد على حجم النموذج تحت الدراسة بل هو مقدار ثابت لكل معدن.

ولحساب معدل الطاقة للإلكترونات عند الصفر المطلق ( $T=0$  k) ولهذا نحسب اولا الطاقة الكلية للإلكترونات (u) عند  $T=0$  k حيث

$$u = \int_0^{\epsilon_F} \epsilon n(\epsilon) d\epsilon \quad 2-14$$

ولما كانت جميع الإلكترونات عند  $T=0$  k تمتلك طاقات اقل من  $\epsilon_F$  اة تساويها، فعليه عند  $T=0$  k فان

$$e^{(\epsilon_F - \epsilon)/k_B T} = 0 \quad \text{ولذلك}$$

$$u = -\frac{3N}{2} \epsilon_F^{-3/2} \int_0^{\epsilon_F} \epsilon^{3/2} d\epsilon \quad 2-15$$

$$u = \frac{3}{5} N \epsilon_F \quad 2-16$$

ان معدل طاقة الإلكترونات  $\langle \epsilon \rangle$  يساوي الطاقة الكلية مقسومة على عدد الإلكترونات  $N$  الموجودة اي

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{3}{5} \epsilon_F \quad 2-17$$

### 6- كثافة الحالة لغاز الإلكترون: Density of state of electron gas

بما ان الإلكترونات لا تتصادم مع بعضها البعض ( حسب نظرية الإلكترونات الحرة) فيمكننا ايجاد الحالة الدركية لنظام مكون من  $N$  الإلكترون عن طريق حساب مستويات الطاقة للإلكترون واحد منفرد في حجم  $V$  ثم يتم ملء هذه المستويات بالإلكترونات وحسب مبداء الانفرد لباولي والذي ينص على ان لايمكن اشغال حالة كمية باكثر من الإلكترون واحد. لذا يمكن وصف الإلكترون المنفرد بدالة موجية  $\psi(\mathbf{r})$ . واذا لم يتصادم الإلكترون فان الدالة الموجية التابعة لمستوى الطاقة  $\epsilon$  تحقق معادلة شرودنكر غير المعتمدة على الزمن

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = \epsilon \psi(\mathbf{r}) \quad 2-18$$

الان نفترض ان الإلكترون محصور داخل مكعب طول ضلعه  $L=V^{1/3}$ . ان الشروط الحدودية لحل معادلة شرودنكر (2-18) لحيز ذي ثلاثة ابعاد هي

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z) \quad 2-19$$

$$\psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z)$$

وتسمى المعادلة (2-19) بشرط بورن-فون كارمان. وعليه

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad 2-20$$

وان طاقة الالكترون

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad 2-21$$

حيث  $\vec{k}$  متجه الموجه. وهنا لابد الاشارة بانه يمكن كتابة الزخم الخطي بدلالة المؤثر  $\hat{p}$  في الميكانيك الكمي

حيث

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \quad 2-22$$

يمكن تطبيق ذلك على المعادلة 2-20 لنحصل على

$$\vec{p}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad 2-23$$

و عليه فان الموجه المستوية  $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$  هي الدالة المسموحة للزخم الخطي و بذلك فان القيمة المسموحة للزخم

هي:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad 2-24$$

اما سرعة الالكترون  $\vec{v}$  فتساوي

$$\vec{v} = \frac{\hbar \vec{k}}{m} \quad 2-25$$

يمكن كتابة متجه الموجه  $\vec{k}$  بدلالة طول الموجه  $\lambda$  بحيث  $\lambda = 2\pi/k$  وتدعى بمعادلة دي برولي.

ان هناك قيما مسموحة لـ  $k$  تحقق معادلة الموجة بحيث  $e^{ik_x L} = e^{ik_y L} = e^{ik_z L} = 1$ ، لما كانت  $e^{i2\pi n} = 1$  حيث  $n$  عدد صحيح، فان قيم  $k$  المسموحة هي

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L}, \quad \text{and} \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L} \quad 2-26$$

حيث  $n_x, n_y, n_z$  اعداد صحيحة في فضاء ثلاثي الابعاد  $k_x, k_y, k_z$  (فضاء  $k$ ) تكون القيم المسموحة لمتجه الموجة هي مضاعفات  $\frac{2\pi}{L}$  وكما بالشكل (2-5) يوضح الفضاء في بعدين. ان الحجم الاخير يساوي  $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$  وكما في الشكل (2-5). فان حيز حجمه  $\Omega$  في فضاء  $k$  يحتوي على

$$\frac{\Omega}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{\Omega V}{8\pi^3} \quad 2-27$$

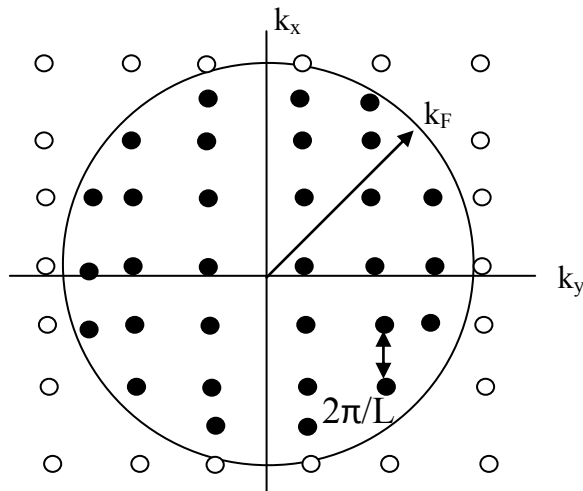
من القيم المسموحة لـ  $k$ . اي ان العدد المسموح لقيم  $k$  لوحدة الحجم في فضاء  $k$  يساوي  $\frac{V}{8\pi^3}$  و يعرف احيانا بكثافة المستويات في فضاء  $k$ .

وفي الحالة الدركية لنظام متكون من  $N$  من الالكترونات الحرة فان المدارات التي يمكن تمثيلها بنقاط داخل كرة في فضاء  $k$ . ان نصف قطر هذه الكرة يساوي  $k_F$  وحجمها  $\Omega$  يساوي  $\frac{4\pi k_F^3}{3}$ . ومن المعادلة (2-27) فان العدد المسموح لقيم  $k$  ضمن هذه الكرة يساوي

$$\left(\frac{4}{3}\pi k_F^3\right) \left(\frac{V}{8\pi^3}\right) = \frac{k_F^3}{6\pi^2} V \quad 2-28$$

وعليه فان العدد الكلي للمدارات

$$N = 2 \frac{k_F^3}{6\pi^2} V = \frac{k_F^3}{3\pi^2} V \quad 2-29$$



الشكل (2-5) يبين نقاط مرسومة في بعدين في فضاء  $k$ .

ان العدد 2 في المعادلة (2-29) هو نتيجة وجود قمتين للعدد الكلي البرمي  $ms = \pm 1/2$  لكل قيمة مسموحة لـ  $k$ . و بذلك لو كان لدينا  $N$  من الالكترونات في الحجم  $V$  فان الحالة الدركية للنظام تكون على اساس اشغال جميع المستويات المنفردة التي بها  $k$  اقل من  $k_F$  ونترك تلك المستويات التي بها  $k$  اكبر من  $k_F$  غير مشغولة، حيث

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{1/3}$$

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$

2-30

حيث  $n$  تمثل الكثافة الالكترونية.

ان الكرة التي نصف قطرها  $k_F$  تسمى بكرة فيرمي وان السطح الذي يفصل بين المستويات المملوءة والمستويات الفارغة يسمى بسطح فيرمي لذا فان طاقة الالكترونات عند سطح فيرمي تساوي  $\epsilon_F = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ، وزخم هذه الالكترونات هو

$$p_F = \hbar k_F$$

2-31

أما سرعتها  $v_F$  فتساوي

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} \quad 2-32$$

وتسمى سرعة فيرمي وتلعب دوراً مهماً في نظرية المعادن بالمقارنة مع السرعة الحرارية  $v = (3k_B T/m)^{1/2}$  وحسب النظرية الكلاسيكية. نستطيع صياغة المعادلات أعلاه بدلالات عددية و ذلك باستخدام المقدار  $r_s/a_0$  (دون وحدات) والذي تتغير قيمته من 2 إلى 6 في المعادن. بما أن قطر كرة حجمها يساوي  $V$  لكل الإلكترون توصيل هو

$$\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{4\pi r_s^3}{3} \quad 2-33$$

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{1/3} \quad 2-34$$

من المعادلتين (2-34) و (2-31) نحصل على

$$k_F = \frac{\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3}}{r_s} \quad 2-35$$

$$k_F = \frac{3.63}{\frac{r_s}{a_0}} \text{ \AA}^{-1} \quad 2-36$$

حيث  $a_0$  يمثل نصف قطر بور، وسرعة فيرمي هي

$$v_F = \left(\frac{\hbar}{m}\right) k_F = \frac{4.2}{\frac{r_s}{a_0}} \times 10^8 \frac{cm}{s} \quad 2-37$$

ان جميع الجسيمات في الغاز الكلاسيكي عند درجة حرارة الصفر المطلق ( $T=0$  k) لها سرعة تساوي صفرا. حتى في درجة حرارة الغرفة فان السرعة الحرارية للجسيمات الكلاسيكية التي تحمل كتلة الإلكترونات تساوي ما يقارب  $10^7$  cm/s. من المعادلة (2-36) نجد طاقة فيرمي بدلالة نصف قطر بور

$$\varepsilon_F = \frac{50.1}{\left(\frac{r_s}{a_0}\right)^2} \text{ eV} \quad 2-38$$

كذلك يمكن ايجاد درجة حرارة فيرمي بالصيغة

$$T_F = \frac{\varepsilon_F}{k_B} = \frac{58.2}{\left(\frac{r_s}{a_0}\right)^2} \times 10^4 \text{ k} \quad 2-39$$

وعلى نقيض ذلك، فان طاقة كل الإلكترون في الغاز الكلاسيكي تساوي  $3/2k_B T$  و تساوي صفرا عندما  $T=0$  k بينما ترتفع قيمة هذه الطاقة لتساوي تقريبا درجة الحرارة المعطاة لتأخذ الصيغة

$$T = \frac{2}{5} T_F \approx 10^4 \text{ k} \quad 2-40$$

ان كثافة الحالة  $D(\varepsilon)$  تعرف بعدد المدارات لوحدة الطاقة ويمكن ايجاد قيمتها من المعادلتين (2-29) و (2-16)

$$N = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \varepsilon^{3/2} \quad 2-41$$

وبذلك فان كثافة الحالة

$$D(\varepsilon) \equiv \frac{dN}{d\varepsilon} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \varepsilon^{1/2} \quad 2-42$$

ويمكن التعبير عن كثافة الحالة بصيغة اخرى عندما تكتب المعادلة (2-42) بالشكل التالي

$$\ln N = \frac{3}{2} \ln \varepsilon + \text{constant}$$

$$\frac{dN}{N} = \frac{3}{2} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon}$$

$$D(\varepsilon) = \frac{dN}{d\varepsilon} = \frac{3N}{2\varepsilon} \quad 2-43$$

### 7- الحرارة النوعية الالكترونية للمعادن:

يمكن تعريف الحرارة النوعية الالكترونية على النحو التالي

$$C_{ele} = \frac{du}{dT} \quad 2-44$$

$$u = \int_0^{\infty} D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon - \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon \quad 2-45$$

حيث  $f(\varepsilon)$  هي دالة التوزيع لفيرمي ديراك، و  $D(\varepsilon)$  هي كثافة الحالة للمعدن

$$\varepsilon_F N = \varepsilon_F \int_0^{\infty} D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \quad 2-46$$

نفاضل كل من المعادلة 45 و 46 نحصل

$$C_{ele} = \frac{\partial u}{\partial T} = \int_0^{\infty} \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon \frac{\partial f}{\partial T}$$

$$0 = \varepsilon_F \frac{\partial N}{\partial T} = \int_0^{\infty} \varepsilon_F D(\varepsilon) \frac{\partial f}{\partial T} d\varepsilon$$

$$C_{ele} = \int_0^{\infty} (\varepsilon - \varepsilon_F) D(\varepsilon) \frac{\partial f}{\partial T} d\varepsilon$$

عند درجات حرارة واطئة  $kBT/\varepsilon_F < 0.01$  فان المقدار  $\frac{\partial f}{\partial T}$  يصبح كبيرا عندما تقترب  $\varepsilon$  من طاقة فيرمي  $\varepsilon_F$

$$C_{ele} = D(\varepsilon_F) \int_0^{\infty} (\varepsilon - \varepsilon_F) \frac{\partial f}{\partial T} d\varepsilon$$



$$\frac{\partial f}{\partial T} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T^2} \frac{e^{(\varepsilon - \varepsilon_F)/k_B T}}{(e^{(\varepsilon - \varepsilon_F)/k_B T} + 1)^2}$$

$$C_{ele} = \frac{1}{3} \pi^2 D(\varepsilon_F) k_B^2 T \quad 2-47$$

$$C_{ele} = \frac{1}{2} \pi^2 N k_B \frac{k_B T}{\varepsilon_F} = \frac{1}{2} \pi^2 N k_B \frac{T}{T_F} = \gamma T$$

$$\gamma = \frac{1}{2} \pi^2 \frac{N k_B}{T_F}$$

### 8- تأثير سطح فيرمي على التوصيلية الكهربائية:

لدراسة تأثير سطح فيرمي على التوصيلية الكهربائية ومقارنتها مع الصورة التقليدية نعتبر الشكل (2-4). في غياب المجال الكهربائي تتمركز كرة فيرمي عند نقطة الأصل، كما هو مبين بالجزء (أ) من الشكل. في هذه الحالة، تتحرك مختلف الإلكترونات بسرعة كبيرة جدا وتحمل تيارات مختلفة وتكون محصلة التيار النهائي صفرا نظرا لتمائل عشوائية الحركة في كل الاتجاهات. عند تطبيق مجال كهربائي في الاتجاه الموجب لمحور x (مثلا) فإن كل إلكترون يكتسب سرعة انجراف  $v_d = - \left( \frac{e\tau}{m^*} \right) E$ . تؤدي هذه السرعة إلى إزاحة سطح فيرمي في عكس اتجاه المجال المطبق كما يبين الشكل (2-4) ب. بالرغم من أن هذه الإزاحة تكون صغيرة جدا وبالرغم من أن معظم الإلكترونات تلاشى تأثير بعضها بعض (على شكل أزواج من الإلكترونات يتحرك في كل منها إلكترون في اتجاه عكس اتجاه حركة الإلكترون الأخر)، فإنه يوجد عدد قليل (البعض) من الإلكترونات لا يتلاشى تأثيرها (الجزء المظلل من الشكل) وبالتالي ينتج التيار الكهربائي. يمكن حساب كثافة التيار الناتج كما يلي.

يكون جزء الإلكترونات (التي لم يتلاشى تأثيرها والتي تكون مسؤولة عن التوصيل الكهربائي) هو  $v_d/v_F$  وبالتالي يكون تركيزها هو  $N(v_d/v_F)$ . وحيث أن كل إلكترون يتحرك بسرعة  $-v_d$ ، فإن كثافة التيار الناتج تعطى بالعلاقة

$$J \approx -eN \left( \frac{v_d}{v_F} \right) (-v_d) = Nev_d \quad 2-48$$

بالتعويض عن السرعة الانجراف نحصل على

$$J = \frac{Ne^2\tau_F}{m^*} E \quad 2-49$$

حيث  $\tau_F$  هو زمن تصادم الإلكترون الموجود عند سطح فيرمي. لذلك يمكن كتابة التوصيلية الكهربائية على الصورة،

$$\sigma = \frac{Ne^2\tau_F}{m^*} \quad 2-50$$

المعادلة السابقة هي معادلة تقريبية ولا تختلف عن المعادلة التي حصلنا عليها بالطريقة التقليدية فيما عدا انه تم استبدال زمن التصادم  $\tau$  بزمن تصادم فيرمي  $\tau_F$ . وهكذا يتبين أن الصورة الحقيقية للتوصيلية الكهربائية تختلف قليلا عن الصورة التقليدية التي يفترض فيها أن جميع الإلكترونات تتحرك بسرعة  $vd$  وجميعها تشارك بالتساوي في حمل التيار في حين أن التيار يحمل بواسطة عدد قليل فقط وهي الإلكترونات التي تتحرك بسرعة عالية. كما ترى، تعطى كلا الصورتين نفس النتيجة ولكن التصور الأخير هو الأكثر دقة. يتضح الآن أهمية سطح فيرمي في ظواهر النقل، حيث أن التيار الكهربائي يحمل بواسطة الإلكترونات التي تقع فقط بالقرب من سطح فيرمي، بينما ليس للإلكترونات التي تقع في العمق علاقة بالتوصيل الكهربائي.

### 9- التوصيلية الحرارية في المعادن: Thermal conductivity in metals

كما بيننا في الباب السابق، تتدفق الطاقة الحرارية من طرف القضيب الأعلى درجة حرارة إلى الطرف الأقل. يتناسب التيار الحراري (كمية الطاقة الحرارية التي تعبر وحدة المساحة من المقطع في وحدة الزمن) مع الميل الحراري، أي أن ،

$$Q = -k \frac{dT}{dx}$$

حيث  $k$  تسمى التوصيلية الحرارية في المواد العازلة تنتقل الحرارة أساسا بواسطة الفونونات، بينما في المعادن فإنها يمكن أن تنتقل بواسطة كل من الإلكترونات والفونونات. ولهذا يمكن كتابة التوصيلية الحرارية على صورة مجموع مشاركة كل من الإلكترونات والفونونات على النحو،

$$k = k_{ele} + k_{ph} \quad 2-51$$

حيث تشير  $k_{ph}$  و  $k_{ele}$  إلى الإلكترونات والفونونات على الترتيب. في معظم المعادن تكون مشاركة الإلكترونات في التوصيل الحراري أكبر من مشاركة الفونونات، حيث  $k_{ph} \approx 10^{-2} k_{ele}$ ، لذا سنهمل تأثير الفونونات في المعالجة الحالية.

يمكن توضيح كيف تحدث عملية التوصيل الحراري بواسطة الإلكترونات بالشكل عند الطرف الساخن من القضيب (على اليسار من الشكل)، تتحرك الإلكترونات في جميع الاتجاهات ولكن جزء معين منها يتحرك إلى اليمين ويحمل الطاقة الحرارية إلى الطرف البارد من القضيب. بالمثل، عند الطرف البارد من القضيب (على اليمين من الشكل)، تتحرك الإلكترونات في جميع الاتجاهات ولكن جزء معين منها يتحرك إلى اليسار ويحمل الطاقة الحرارية إلى الطرف الساخن. وبالرغم من أن عدد الإلكترونات التي تتحرك في اتجاهين متضادين يكون متساويا، إلا أنه في المتوسط تكون طاقة الإلكترونات التي تتحرك من اليسار إلى اليمين أكبر من طاقة الإلكترونات التي تتحرك من اليمين إلى اليسار وبالتالي فإن المحصلة النهائية تكون انتقال الطاقة إلى اليمين مسببة تيارا حراريا. لاحظ أن الطاقة الحرارية تنتقل بواسطة تلك الإلكترونات القريبة من سطح فيرمي وذلك لأن الإلكترونات الأخرى (الموجودة في العمق) تلاشى تأثير بعضها بعض. لحساب التوصيلية الحرارية بطريقة كمية نستخدم العلاقة

$$k = \frac{1}{3} C_v l v \quad 2-52$$

حيث  $C_v$  الحرارة النوعية عند حجم ثابت و  $v$  سرعة الإلكترونات و  $l$  متوسط طول المسار الحر للجسيم تحت الاعتبار. في الحالة الحالية حيث تتضمن الإلكترونات، فإن  $C_v$  تكون الحرارة النوعية للإلكترونات ويجب استنتاجها من المعادلة (2-47)، بالإضافة إلى ما سبق يجب استبدال كل من  $v$

و  $k$  بالمقادير  $v_F$  و  $l_F$  على الترتيب، حيث أن الإلكترونات الواقعة على سطح فيرمي فقط هي المؤثرة. وهكذا،

$$k = \frac{1}{3} \left( \frac{\pi^2 k^2 T}{2 \varepsilon_F} \right) v_F l_F \quad 2-53$$

عند تعويض القيم  $\varepsilon_F = \frac{1}{2} m^* v_F^2$  و  $\tau_F = \frac{l_F}{v_F}$  فإنه يمكن تبسيط المعادلة السابقة إلى الصورة،

$$k = \frac{1}{3} \left( \frac{\pi^2 N k^2 T \tau_F}{3 m^* 2 \varepsilon_F} \right) \quad 2-54$$

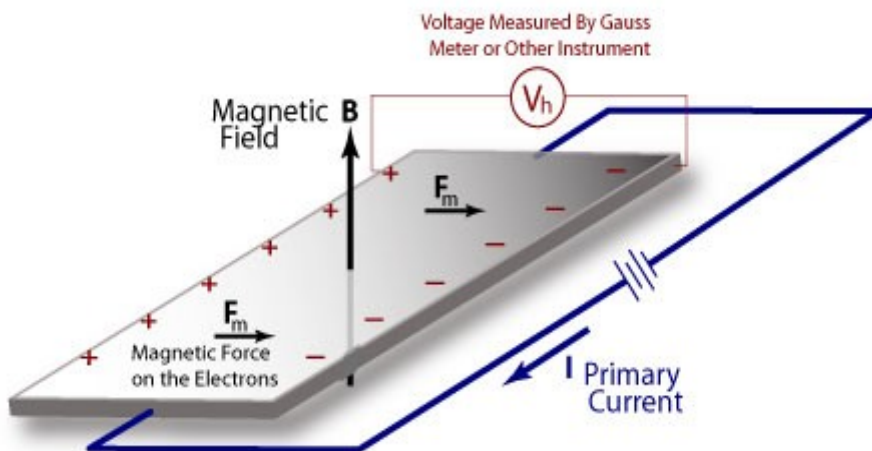
المعادلة السابقة تعبر عن التوصيلية الحرارية بدلالة الخصائص الإلكترونية للمعدن.

### 10- حركة الإلكترونات في المجال المغناطيسي:

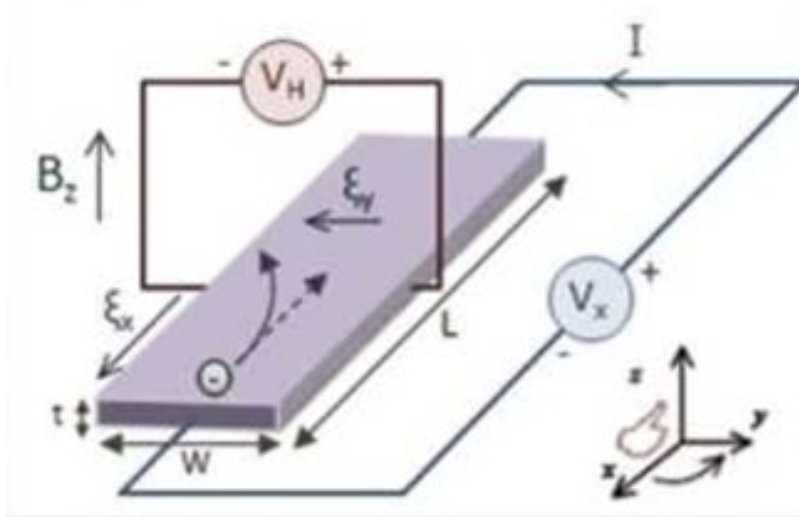
يولد تطبيق مجال مغناطيسي على المعدن العديد من التأثيرات الشيقة والتي تنتج من إلكترونات التوصيل، مثل تأثير هول (Hall's effect) و رنين السيكلوترون (cyclotron resonance) في هذا الفصل، سوف نستخدم هذين التأثيرين في فحص خصائص إلكترونات التوصيل.

#### 10-1 تأثير هول:

عندما يمر تيار كهربائي  $J_x$  في شريحة معدنية في اتجاه محور  $x$  تحت تأثير مجال مغناطيسي عمودي على هذا الاتجاه شدته  $B_z$  يتولد مجال كهربائي عمودي على كل من التيار الكهربائي والمجال المغناطيسي، أي في اتجاه محور  $y$ . تعرف الظاهرة السابقة بتأثير هول ويمكن توضيحها بالشكل (2-6).



الشكل (2-6) أ- رسم تخطيطي لتأثير ومجال هول.



الشكل (2-6) ب- رسم توضيحي لتأثير المجال المغناطيسي على انحراف الإلكترونات.

لفهم هذا التأثير نفترض أولاً حالة ما قبل تطبيق المجال المغناطيسي. في هذه الحالة يتدفق التيار الكهربائي في الاتجاه الموجب لمحور  $x$  وهذا يعني أن إلكترونات التوصيل تتحرك بسرعة انحراف  $\vec{v}$  في الاتجاه السالب لمحور  $x$ . عند تطبيق المجال المغناطيسي فإن الإلكترونات تقع في نفس الوقت تحت تأثير قوة لورنتز (Lorentz force) مقدارها

$$\vec{F} = e(\vec{v} \times \vec{B}) \quad 2-55$$

وتسبب هذه القوة انحناء لحركة الإلكترونات في الاتجاه الأسفل كما هو مبين بالشكل (2-6) ب. ومع مرور الوقت تتكدس الإلكترونات على السطح السفلي وتتولد بالاستقطاب شحنات موجبة مساوية على السطح العلوي. يولد تراكم الشحنات السالبة والموجبة على السطحين السفلي والعلوي مجالاً كهربائياً يسمى مجال هول. لحساب مجال هول افترض أن قوة لورنتز التي تؤدي إلى تراكم الشحنات في المكان الأول تكون في الاتجاه السالب لمحور  $y$  وتعطى بالعلاقة،

$$F_L = ev_x B_z \quad 2-56$$

اختفاء الإشارة السالبة من المعادلة السابقة يعني أن  $F_L$  تكون سالبة وذلك لأن  $v_x$  تكون في الاتجاه السالب لمحور  $x$  كما يوضح الشكل. ينتج المجال المتكون بالشحنة الموجود على السطح قوة تعاكس قوة لورنتز. تستمر عملية تراكم الشحنة حتى تتساوى قوة هول ( $F_H$ ) تماماً مع قوة لورنتز ونحصل على حالة اتزان. عند هذه الحالة تكون  $F_H = F_L$ ، وبالتالي نحصل على،

$$-eE_H = -ev_x B_z$$

$$E_H = v^x B_z \quad 2-57$$

ويسمى هذا المجال مجال هول.

أحيانا يكون من المفيد التعبير عن هذا المجال بكميات قابلة للقياس ولذلك يتم التعبير عن السرعة  $v_x$  بدلالة كثافة التيار  $J_x = -env_x$ ، وهذا يؤدي الى

$$E_H = -\frac{1}{ne} J_x B_z \quad 2-58$$

$$R_H = \frac{E_y}{J_x B_z} \quad 2-59$$

$$\rho_B = \frac{E_x}{J_x} \quad 2-60$$

حيث ان  $R_H$  ثابت تناسب هول، و  $\rho_B$  هي المقاومة النوعية الممغنطة.

$$\vec{F} = -e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad 2-61$$

و بدلالة الزخم الخطي

$$\vec{F} = \left[ \frac{d\vec{p}}{dt} + \frac{\vec{p}}{t} \right] \quad 2-62$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -e \left[ \vec{E} + \frac{\vec{p}}{m} \times \vec{B} \right] - \frac{\vec{p}}{t} \quad 2-63$$

وفي حالة التوازن

$$0 = -eE_x - w_c p_y - \frac{p_x}{t}$$

$$0 = -eE_y + w_c p_x - \frac{p_y}{t} \quad 2-64$$

حيث  $w_c = \frac{eB}{m}$  يسمى بالتردد المداري (السايتروني)، نضرب المعادلة 64 بـ  $-\frac{ne\tau}{m}$  نحصل

$$\sigma_o E_x = \tau w_c J_y + J_x \quad 2-65$$

$$\sigma_o E_y = -\tau w_c J_x + J_y \quad 2-66$$

حيث  $\sigma_0 = \frac{ne\tau}{m}$  تسمى التوصيلية الكهربائية للتيار المستمر بغياب المجال الكهربائي. يمكن تحديد مجال هول  $E_y = E_H$  على أساس عدم مرور تيار مستعرض خلال الشريحة باتجاه محور  $y$  حيث يمر التيار باتجاه محور  $x$  فقط. وعندما نعوض عن قيمة  $J_y = 0$  في المعادلة 65 نجد ان

$$E_y = E_H = - \left( \frac{w_c \tau}{\sigma_0} \right) J_x = - \left( \frac{B}{ne} \right) J_x \quad 2-67$$

من المعادلتين 59 و 67 نحصل على

$$R_H = - \frac{1}{ne} \quad 2-68$$

يتضح من المعادلة (2-59) أن مجال هول يتناسب طردياً مع كل من كثافة التيار وشدة المجال المغناطيسي ويعرف ثابت التناسب  $\left( \frac{E_H}{J_x B_z} \right)$  هذا بثابت هول ويرمز له عادة بـ  $R_H$  بالرمز  $R_H$ . وهكذا يكون ثابت هول على الصورة،  $R_H = - \frac{1}{ne}$ ، تعتبر النتيجة السابقة مهمة جداً من الناحية العملية. وبما أن ثابت هول يتناسب عكسياً مع كثافة الإلكترونات ( $n$ ) فإن هذا يعني أننا يمكننا تعيين  $n$  بواسطة قياس جهد هول عملياً وتعتبر هذه الطريقة هي الطريقة القياسية لتعيين تركيز الإلكترونات في المادة. ومن الناحية العملية فإن هذه التقنية ذات قيمة لأنه، بخلاف  $n$ ، فإن الكمية الأخرى التي يعتمد عليها ثابت هول هي شحنة الإلكترون ( $-e$ ) وهي ثابت فيزيائي أساسي وقيمه معروفة بدقة. من السمات الأخرى المفيدة لثابت هول والتي تعطى معلومات إضافية عن المادة هي أن إشارة الثابت تحدد على نوع حاملات التيار، حيث تدل الإشارة السالبة على أن حاملات التيار هي الإلكترونات، بينما تدل الإشارة الموجبة على أن حاملات التيار هي الفجوات الموجبة.