

الفصل الثالث: نظرية الحزم في المواد الصلبة

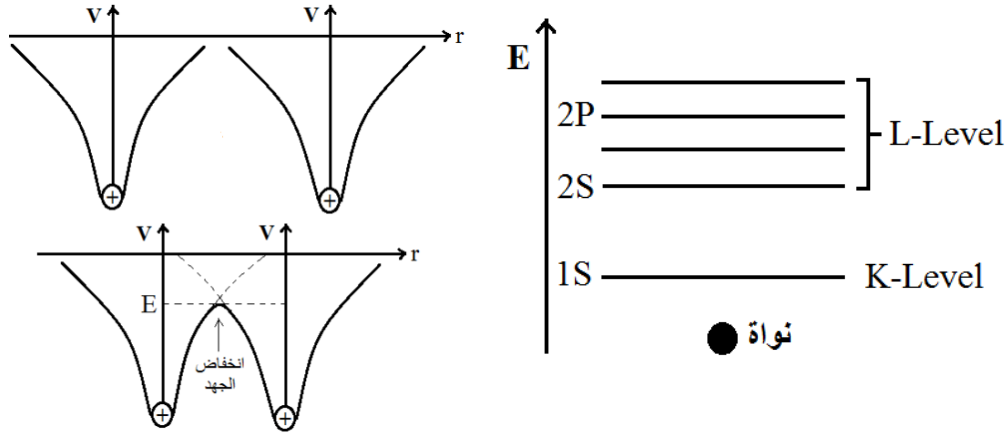
1- المقدمة:

ان الهدف الرئيسي من دراسة هذا الموضوع هو لمعرفة ما يحصل لالكترونات التوصيل في المواد الصلبة عند تسليط مجال خارجي عليها. وعليه لابد من المقارنة بين الذرات المكونة للمادة الصلبة وبين ذراتها عندما تكون معزولة. ان كل ذرة مفردة تملك مستويات طاقة محددة بقدر اشغال الالكترونات لها. اما البلورة فانها تمتلك عدد ضخم من مستويات الطاقة قريبة من بعضها البعض مكونة حزمة من الطاقة. ان عدد هذه المستويات مساوي لعدد الذرات المكونة للبلورة لذلك فان حزمة الطاقة تظهر وكأنها مستمرة. ان حزم الطاقة والفجوات بينها و مدى امتلاءها بالالكترونات تحدد صفات المادة الصلبة وعلى هذا الاساس تم تصنيف المواد الصلبة الى معادن واشباه موصلات وعوازل. ان اخفاق كل من النظرية الكلاسيكية والنظرية الكمية للغاز الالكتروني في تفسير الفارق الكبير في التوصيل الكهربائي بين المعادن و المواد الشبه الموصلة والعازلة وهو بسبب اهمال تفاعل الالكترونات التوصيل والطبيعة الدورية للشبيكة البلورية (التقوب الموجبة-الفجوات). وعليه افن دراسة منشأ الحزم في المواد الصلبة يعد موضوعا بالغ الاهمية والذي يساعدنا على فهم الخواص الكهربائية والحرارية والبصرية للمواد الصلبة بالاضافة الى معرفة تركيب الحزم. سوف نناقش في هذا الفصل، كثافة الحالة، والكتلة الفعالة للالكترون، ومفهوم الفجوات الموجبة ودراسة سطح فيرمي باربعة طرق.

2- منشأ الحزم في المواد الصلبة:

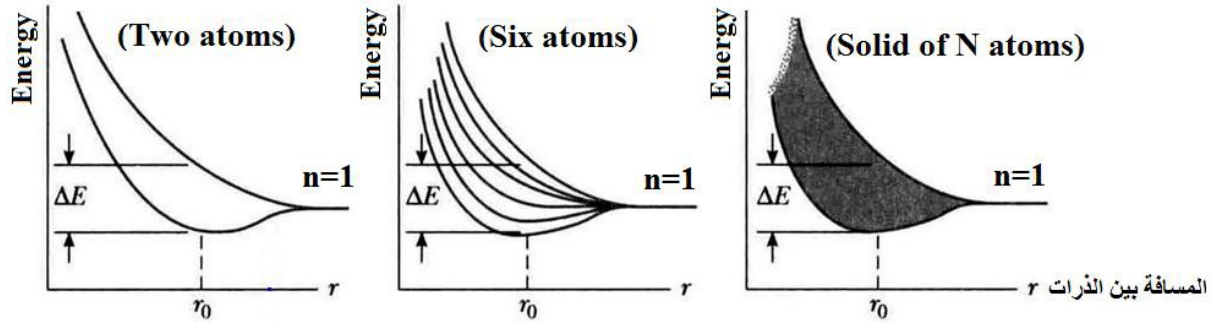
ان الخواص الكهربائية والحرارية والبصرية في المواد الصلبة البلورية تحدد على ضوء تركيب حزم طاقاتها ومدى انشغالها بالالكترونات. تنشأ حزم الطاقة في المواد الصلبة البلورية من مستويات الطاقة لذراتها المنفصلة، فاذا افترضنا وجود ذرتين منفصلتين بعيدتين عن بعضهما وتحتوي كل منهما على مستوي طاقة واحد

فاذا اقتربت هاتان الذرتان من بعضهما فان هذا المستوي سوف ينشطر الى مستويين و ذلك نتيجة التفاعل بين الذرتين ويزداد هذا الانشطار كلما اقتربت الذرتان من بعضهما وكما موضحة بالشكل (3-1).



الشكل (3-1) أ- مستويات الطاقة في ذرة معزولة. ب- لذرتين متباعدتين.

فاذا كان لدينا N من الذرات كما هو الحال في البلورة فان كل مستوي من هذه المستويات سوف ينشطر الى N من المستويات المنفصلة تحت تاثير الذرات على بعضها لذا سوف تتكون حزمة من الطاقة تحوي N من المستويات المنفصلة بدلا من مستوي واحد منفرد في كل ذرة وان الالكترونات في مادة صلبة بلورية يمكن ان يمتلك طاقات تقع ضمن هذه الحزمة فقط. فيمكن ان تتداخل حزم الطاقة المختلفة فيما بينها في هذه الحالة تكون طاقة الالكترونات مستمرة وتحدث في المعادن فقط. عندما تكون حزم الطاقة غير المتداخلة فان المسافات الفاصلة بين هذه الحزم تمثل الطاقات الممنوعة للالكترونات تدعى بحزم الطاقة الممنوعة (Forbidden energy band) او فجوة الطاقة (Energy gap) كما هو الحال في المواد الشبه الموصلة والعوازل. تكون الذرات في المواد الصلبة البلورية متقاربة جدا بحيث ان الالكترونات التساهمية تشكل نظاما واحدا مشتركا بين جميع ذرات البلورة وهذا النظام يخضع لمبدأ الانفراد لباولي. البلورة في هذه المواد تمتلك حزمة طاقة تتكون من عدد ضخم من المستويات الثانوية القريبة جدا بعضها من بعض وان عدد المستويات الطاقة المتجاورة يساوي عدد الذرات في البلورة. لذا فان هذه المستويات تبدو كأنها مستمرة كذلك تدعى بحزمة الطاقة وكما موضح بالشكل (3-2).

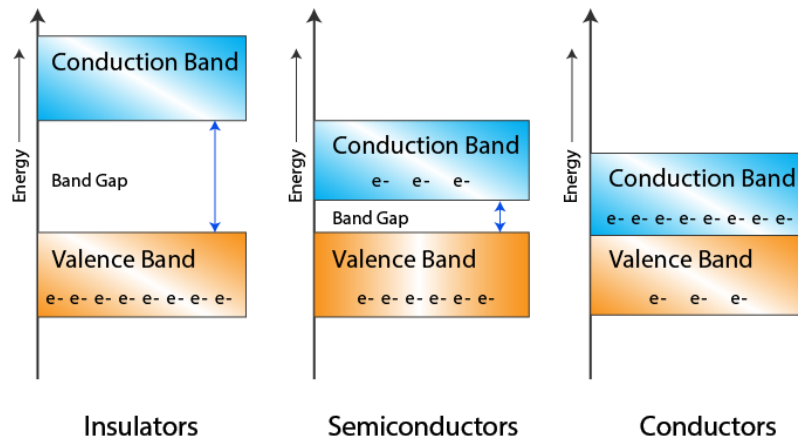


الشكل (3-2) أنشطار مستويات الطاقة عند تقارب الذرات من بعضها البعض الآخر.

ان التوصيل الجيد للمعادن يعود لكون حزمة الطاقة العليا والتي تدعى بحزمة التوصيل (Conduction band) مملوءة كلياً بالالكترونات وان حزمة التوصيل العليا و حزمة التكافؤ (Valance band) السفلى متداخلتان مع بعضهما اي لا توجد فجوة طاقة محصورة بينهما.

أما في المواد العازلة فتكون حزمة التكافؤ السفلى مملوءة كلياً بالالكترونات وعلى عكس ذلك تكون حزمة التوصيل العليا فارغة كلياً من الالكترونات و يتخللها فجوة طاقة محصورة كبيرة بين الحزمتين بالمقارنة مع الفجوة المحصورة للمعادن او اشباه الموصلات. ان التوصيل الكهربائي في المواد العازلة يكون قليل جداً او معدوم بسبب كون فجوة الطاقة المحصورة كبيرة مما يجعل عدد الالكترونات المنقولة الى حزمة التوصيل قليلة جداً او معدومة في درجات الحرارة الاعتيادية او حتى عند درجات حرارية عالية وكما في الشكل (3-3).

ان عرض فجوة الطاقة هذه تختلف في اشباه الموصلات عما هو عليه في العوازل فهي صغيرة نوعاً ما في الاولى بحيث ان اي تغيير محسوس في درجة الحرارة شبه الموصل يمكن ان يؤدي الى اثاره بالالكترونات في الحزمة لمملوءة وانتقالها عبر فجوة الطاقة الى حزمة التوصيل ان هذا الانتقال يمثل عملية التوصيل في المواد الشبه موصلة (الشكل (3-3)).



الشكل (3-3) مخطط حزم الطاقة في المواد الصلبة (المعادن-اشباه الموصلات-العوازل).

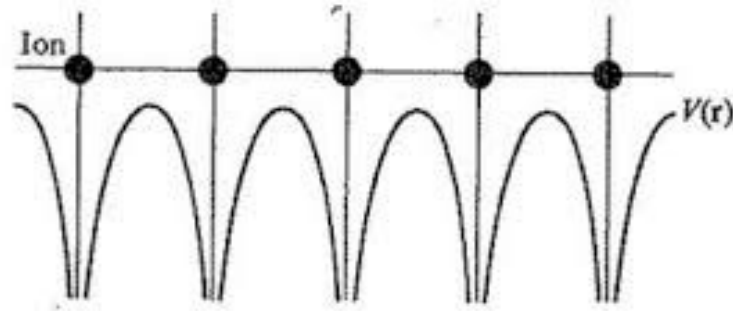
3- الجهد الدوري:

ان من صفات البلورة التامة (Perfect crystal) هو ترتيب الايوناتها على شكل صفوف دورية منتظمة، فعليه لابد من دراسة سلوك الالكترونات في جهد $V(r)$ و له نفس دورية الشبكة اي ان

$$V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r}) \quad 3-1$$

حيث \vec{R} متجه الشبكة، والان سوف نفرض ان ترتيب الايونات في صفوف دورية هي حالة مثالية، حيث لا يمكن الحصول دائما على بلورة تامة النقاوة. لان هناك احتمالية لوجود ايونات في مواقع غير مواقعها الاصلية وهذا بالطبع يؤدي الى تحطيم التماثل الانتقالي (translation symmetry) حتى في البلورات النقية. في هذا البند سنناقش مستويات الطاقة ودالات الموجة للاكترون المنفرد في بلورة ذات دورية لا نهائية وكما موضحة بالشكل (3-4)، وعليه فان مجموعة الالكترونات المتعددة تعامل على انها تجمع لجسيمات غير متصادمة تشغل مستوي الالكترون واحد وحسب قوانين احصاء فيرمي. ان معادلة شرودنكر للاكترون منفرد تاخذ الصيغة التالية:

$$(-\nabla^2 + V(r))\Psi = \epsilon\psi \quad 3-2$$



الشكل (3-4) الجهد الدوري لبلورة تامة.

يمكن حل المعادلة (3-2) و ذلك باستخدام الشروط الدورية 1- نعبّر عن البلورة ببعد واحد، اي تحتوي على سلسلة خطية من الذرات تفصلها المسافة a . باستخدام شروط بورن-فون كارمان في الدورية، حيث نتصور ان المتسلسلة بشكل حلقة كبيرة طولها L وتحتوي N من الدورات، فان

$$\psi(x + Na) = \psi(x) \quad 3-3$$

ان اهم افراضات نظرية الحزم في المواد الصلبة هي ان احتمالية وجود الالكترون في اي نقطة من نقاط البلورة متساوية، اي ان احتمالية وجود الالكترون في النقاط التي تفصلها مسافة ma تكون متساوية، حيث m هو عدد صحيح وعليه

$$|\psi(x + ma)|^2 = |\psi(x)|^2 \quad 3-4$$

اي ان

$$\psi(x + a) = C\psi(x)$$

$$\psi(x + ma) = C^m\psi(x)$$

حيث C عدد مركب ذو معامل يساوي واحد. عندما $m=N$ فان

$$\psi(x + Na) = C^N\psi(x) \quad 3-5$$

وبمقارنة المعادلتين (3-4) و (3-5) نجد ان

$$C^N = 1$$

$$C = e^{(2\pi im/N)} \quad m=0,1,2,\dots,N \quad 3-6$$

وعليه فان الدالة ψ تحقق الشرط

$$\psi(x + a) = e^{ika}\psi(x) \quad 3-7$$

$$k = \frac{2\pi m}{Na} \quad \text{حيث}$$

من المعادلات اعلاه، يتضح ايضا ان $\frac{d\psi}{dx}$ تحقق نفس الشروط. هناك N من القيم غير المتساوية لـ k وكل قيمة تعود للمسافة $\frac{2\pi}{a}$ و التي سوف نطلق عليها فضاء k (k-space). وعليه يمكن ان نضيف لقيم k مضاعفات $\pm \frac{2\pi}{a}$ بحيث لا تؤثر على شكل المعادلة (3-7). ان k تمثل عددا كميا وحداته نفس وحدات العدد الموجي (wave number) ويمثل مستويات مختلفة طاقاتها تعتمد ايضا على k. ولما كانت الالكترونات تنتقل بالاتجاهين الموجب والسالب فسوف نلاحظ ان $\hbar k$ له نفس خاصية الزخم وان قيم k الصغيرة تمتد بين $+\frac{\pi}{a}$ الى $-\frac{\pi}{a}$ وليست بين صفر و $+\frac{\pi}{a}$. و اذا كانت جميع المستويات في الحزمة مملوءة فهناك الالكترون ذو قيمة k والكترون اخر ذو قيمة -k. وعليه فان الحزم المملوءة كليا لا تساهم في عملية التوصيل الكهربائي وكما تم ذكره في الفصل السابق. لنفرض ان البلورة ذات دورية بثلاثة اتجاهات وان طول كل دورة يساوي $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ في كل اتجاه. ونفرض كذلك ان $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ متعامدة مع بعضها وباتجاه المحاور x,y,z على التوالي. فان الدالة ψ تحقق الشرط.

$$\psi_{lmn}(x + a, y + b, z + c) = e^{[2\pi i(\frac{l}{G_1} + \frac{m}{G_2} + \frac{n}{G_3})]} \psi_{lmn}(x, y, z) \quad 3-8$$

حيث a, m, n اعداد صحيحة. لذا فان

$$k_x = \frac{2\pi l}{aG_1}, \quad k_y = \frac{2\pi m}{aG_2}, \quad k_z = \frac{2\pi n}{aG_3},$$

$$\psi_{lmn}(x+a, y+b, z+c) = e^{(ik_x a + ik_y b + ik_z c)} \psi_{lmn}(x, y, z)$$

لاي متجه \vec{R}_l ، حيث $\vec{R}_l = p\vec{a} + q\vec{b} + r\vec{c}$ (حيث p, q, r اعداد صحيحة). نجد ان

$$\psi_k(\vec{r} + \vec{R}_l) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} \psi_k(\vec{r}) \quad 3-9$$

وتدعى المعادلة (3-9) بعلاقة بلوخ (Bloch relation) وهي اساس الدورية لدالات الموجة في بلورة تامة النقاوة وعليه يمكن حل معادلة شرودنكر بناء على ذلك الشرط. نفرض مؤثر انتقالي يعمل على انتقال الشبكة بمقدار

\vec{R}_l ، بحيث

$$T_l \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{R}_l) \quad 3-10$$

ان المؤثرات T_l موحدة مع بعضها، ولما كان الجهد دوريا فانها موحدة مع هاملتونين (Hamiltonian) وعليه فان القيم المسموحة هي ثابت الحركة. ان دالة الموجة للالكترونون في البلورة يجب ان تكون الدالات المسموحة لكل المؤثرات T_l . وهذا يعني

$$T_l \psi(\vec{r}) = C_l \psi(\vec{r})$$

حيث C_l عدد، نفرض مؤثرين انتقاليين T_i و T_j حيث

$$T_j T_i \psi(\vec{r}) = C_j C_i \psi(\vec{r})$$

ولكن حاصل ضرب $T_j T_i$ هو مؤثر انتقالي يساوي T_m وعليه

$$T_m \psi(\vec{r}) = C_m \psi(\vec{r})$$

وإذا كان $C_m = C_i C_j$ ، و $\vec{R}_m = \vec{R}_i + \vec{R}_j$ ، فان العدد C_i يعتمد اسأ على \vec{R}_i ، بحيث

$$C(\vec{R}) = e^{\vec{b} \cdot \vec{R}}$$

ان المتجه \vec{b} يمثل دالة ψ معينة. فعليه فان \vec{b} يجب ان ياخذ الصيغة $i\vec{k}$ وان \vec{k} ذات قيمة حقيقية، لذلك

$$T_i \psi_k(\vec{r}) = \psi_k(\vec{r} + \vec{R}_i) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \psi_k(\vec{r})$$

وتدعى هذه المعادلة بنظرية بلوخ (Bloch theorem).

4- دالة بلوخ:

بكتابة المعادلة التالية:

$$u_k(\vec{r}) = e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \psi_k(\vec{r})$$

نحصل على

$$u_k(\vec{r} + \vec{R}_i) = e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r} + \vec{R}_i)} \psi_k(\vec{r} + \vec{R}_i)$$

$$u_k(\vec{r} + \vec{R}_i) = e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \psi_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r})$$

وهذا يعني ان $u_k(\vec{r})$ لها نفس دورية الشبكة. يمكن ملاحظة ان

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_k(\vec{r}) \quad (3-11)$$

وعليه فان دالات الموجة للالكترون الواحد في البلورة تامة النقاوة هي حاصل ضرب موجة مستوية (plane

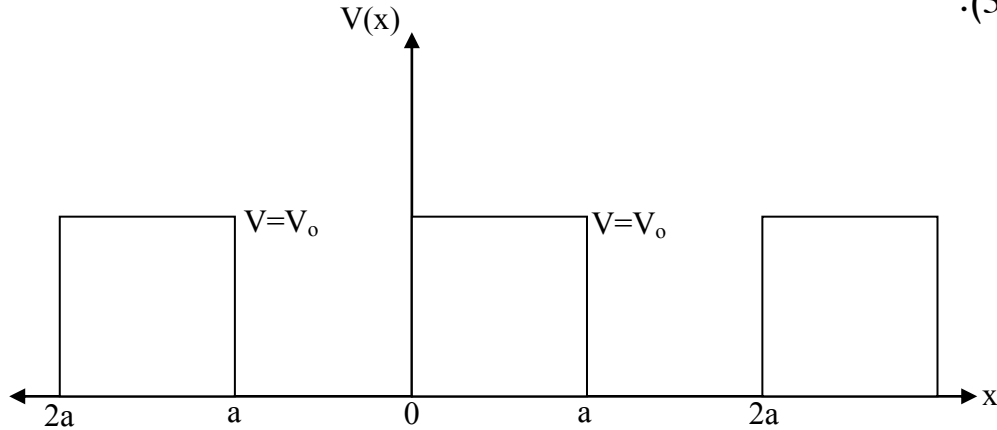
wave) بدالة لها نفس دورية الشبكة. ان دالة الموجة هذه تسمى دالة بلوخ (Bloch function). ان دالة بلوخ

$u_k(\vec{r})$ تسلك نفس سلوك الموجة الذرية قرب نوى الذرات.

5- بلورة ذات شبكة ببعد واحد:

لكي نلاحظ منشأ الحزم المسموحة و الممنوعة كنتيجة لشروط الدورية. نفرض بلورة ذات شبكة ببعد واحد وكما

في الشكل (3-5).



الشكل (3-5) الجهد الدوري لشبكة في بعد واحد.

ان طول الدورة في هذا التركيب يساوي 2a وعليه فان شروط بلوخ هي

$$\psi_k(x + 2a) = e^{2iak}\psi_k(x)$$

وبتفاضل المعادلة اعلاه نحصل

$$\frac{d}{dx}\psi_k(x + 2a) = e^{2iak}\frac{d}{dx}\psi_k(x) \quad 3-12$$

و حسب الميكانيك الكلاسيكي فان الالكترون يبقى محصورا داخل جدار الجهد اذا كانت طاقته ϵ اقل من V_0 .

اما اذا كانت طاقته اكبر من V_0 فان سرعة الالكترون داخل الجهد تساوي $(2\epsilon/m_0)$ وسرعته عند جدار الجهد

تساوي $\left(2\frac{\epsilon-V_0}{m_0}\right)^{1/2}$ و لكن حسب النظرية الكمية فان الالكترون يكون موجودا خارج جدران الجهد بالرغم من

ان طاقته ϵ اقل من V_0 .

ان حل معادلة شرودنكر للحالة $-a \leq x \leq 0$ تاخذ الصيغة التالية

$$\psi_1 = A\cos q_0 x + B\sin q_0 x \quad 3-13$$

$$q_0 = \frac{2m_0\varepsilon}{\hbar^2}$$

ان الثوابت A, B نحدد قيمتها باستخدام شروط حدودية. وبنفس الطريقة، عندما تكون $0 \leq x \leq a$ فان

$$\psi_2 = C\cos qx + D\sin qx \quad 3-14$$

$$q^2 = \frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}$$

ان قيمة q تكون خيالية عندما $\varepsilon < V_0$. باستخدام الشروط الحدودية (boundary conditions) نلاحظ ما يلي

$$-1 \text{ ان } \psi \cdot \frac{d}{dx} \psi \text{ تكون مستمرة عند } x=0.$$

$$-2 \text{ و } \psi(+a) = e^{2iak}\psi(-a) \text{ و } \frac{d}{dx} \psi(+a) = e^{2iak}\frac{d}{dx} \psi(-a) \text{ و عليه فان } \psi_2(0) = 0 \text{ و}$$

$$\frac{d}{dx} \psi_2(0) = qD \text{ وبذلك}$$

$$\psi_2(+a) = \cos qa \psi_2(0) + \frac{1}{q} \sin qa \frac{d}{dx} \psi_2(0) \quad \text{و}$$

$$\frac{d}{dx} \psi_2(+a) = -q \sin qa \psi_2(0) + \cos qa \frac{d}{dx} \psi_2(0)$$

وباستخدام المصفوفة matrix نحصل على

$$\begin{vmatrix} \psi_2(+a) \\ \frac{d}{dx} \psi_2(+a) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos qa & \frac{1}{q} \sin qa \\ -q \sin qa & \cos qa \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \psi_2(0) \\ \frac{d}{dx} \psi_2(0) \end{vmatrix}$$

وبنفس الطريقة

$$\begin{vmatrix} \psi_1(0) \\ \frac{d}{dx} \psi_1(0) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos q_0 a & \frac{1}{q_0} \sin q_0 a \\ -q_0 \sin q_0 a & \cos q_0 a \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \psi_1(-a) \\ \frac{d}{dx} \psi_1(-a) \end{vmatrix}$$

والان $\psi_1(0) = \psi_2(0)$ و $\frac{d}{dx} \psi_1(0) = \frac{d}{dx} \psi_2(0)$ ، و عليه

$$\left| \begin{array}{c} \psi_2(a) \\ \frac{d}{dx} \psi_2(a) \end{array} \right| = \left| \begin{array}{cc} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} \psi_1(-a) \\ \frac{d}{dx} \psi_1(-a) \end{array} \right|$$

حيث ان

$$b_{11} = \cos q a \cos q_0 a - \frac{q_0}{q} \sin q a \sin q_0 a$$

$$b_{22} = -\frac{q}{q_0} \sin q a \sin q_0 a + \cos q a \cos q_0 a$$

$$\left| \begin{array}{c} \psi_2(a) \\ \frac{d}{dx} \psi_2(a) \end{array} \right| = e^{2iak} \left| \begin{array}{c} \psi_1(-a) \\ \frac{d}{dx} \psi_1(-a) \end{array} \right|$$

$$\left| \begin{array}{cc} b_{11} - e^{2iak} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} - e^{2iak} \end{array} \right| = 0$$

ان المحدد $b_{ij}=1$ وعليه فان حل المصفوفة اعلاه

$$e^{2iak} = \frac{1}{2} (b_{11} + b_{22}) \pm i \left[1 - \frac{1}{4} (b_{11} + b_{22})^2 \right]^{1/2}$$

$$\cos 2ka = \frac{1}{2} (b_{11} + b_{22})$$

$$\cos 2ka = \cos q a \cos q_0 a - \frac{q^2 + q_0^2}{2q q_0} \sin q a \sin q_0 a \quad 3-15$$

لما كانت q, q_0 تتضمنان الطاقة ϵ فان المعادلة (3-15) تمثل العلاقة بين ϵ و k ضمنيا. ولما كانت قيمة k

حقيقية، فان المسافة ذات معنى فيزيائي مقبول عندما لا تتجاوز القيمة المطلقة للجانب الايمن من المعادلة (3-

15) على الواحد. ان هذه المعادلة توضح لنا منشأ الحزم المسموحة و الممنوعة للمواد الصلبة. واذا كانت ان هذه

$a < V_0$ فان $q = ip$ ، وهي كمية خيالية، وعليه

$$\cos 2ka = \cosh p a \cos q_0 a - \frac{q_0^2 - p^2}{2p q} \sinh p a \sin q_0 a \quad 3-16$$

و اذا كانت V_0 كبيرة جدا و $\epsilon \ll V_0$ (بالنسبة للمستويات العميقة) فان المعادلة (3-16) تصبح كالآتي

$$\cos 2ka = \cosh pa \left[\cos q_0 a + \frac{p}{2q_0} \sin q_0 a \right] \quad 3-17$$

حيث ان $p \gg q_0$

ان المعادلة (3-17) تتحقق فقط عندما تكون مستويات الطاقة ضيقة حيث $\sin q_0 a$ يكون سالبا وصغيرا جدا (اذا كانت $\cos q_0 a$ موجبة). من الشرط $\sin q_0 a = 0$ نحصل على

$$\epsilon_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} \quad 3-18$$

ان المعادلة (3-18) تمثل القيم المسموحة للطاقة عندما يكون جهد الجدار ذات عمق ما لا نهاية وهذا يعود للمستويات الذرية البعيدة. وعليه فان المستويات لا تتوسع كثيرا عندما تقترب الذرات من بعضها لتكوين البلورة.

6- كثافة الحالة الالكترونية:

كما ناقشنا في الفصل السابق، ان الحالة الالكترونية لوحدة الحجم في فضاء k هي $2 \left(\frac{V}{8\pi^3} \right)$ ، و عليه عند معالجة الحالة لوحدة حجم بلورية، فان عدد الحالات في حجم $d^3 \vec{k}$ في فضاء k هي:

$$dn_s = \frac{1}{4\pi^3} d^3 \vec{k} \quad 3-19$$

ان عدد الحالات لوحدة الطاقة $\frac{dn_s}{d\epsilon}$ تسمى كثافة الحالة ويرمز لها $D(\epsilon)$. ان معرفة كثافة الحالة عند مستوى فيرمي له اهمية كبيرة في معرفة خواص المعادن كالحرارة النوعية الالكترونية مثلا. لما كانت كثافة الحالة في فضاء k لها مقدار ثابت $\frac{1}{4\pi^3}$ ، فعليه فان عدد الحالات في حجم مقداره A في فضاء k يساوي

$$n_s = \frac{1}{4\pi^3} \int_V d^3 k \quad 3-20$$

و الان نختار سطحاً ذا طاقة ثابتة تتراوح قيمتها بين ε و $\varepsilon+d\varepsilon$ وناخذ مقطعاً من الحجم في فضاء k . نلاحظ ان

$$d\varepsilon = \nabla_k \varepsilon \cdot dk = |\nabla_k \varepsilon| dk_{\perp}$$

$$d^3k = dS dk_{\perp} = \frac{dS d\varepsilon}{|\nabla_k \varepsilon|}$$

حيث dS تمثل مساحة مقطع من سطح ذي طاقة ثابتة. كما في الشكل (3-6) وعليه فان

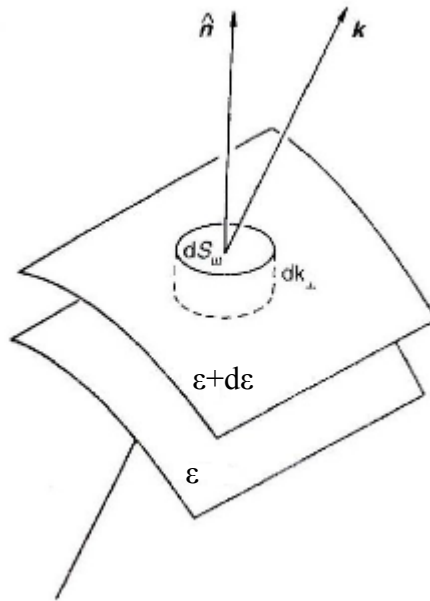
$$D(\varepsilon) = \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{dS}{|\nabla_k \varepsilon|}$$

حيث التكامل يشمل سطحاً ذا طاقة ثابتة $\varepsilon(k)=\varepsilon$ في فضاء k . لنحسب الان كثافة الحالة عندما تكون العلاقة بين ε, k بالصيغة التالية

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{\hbar k^2}{2m^*}$$

3-21

حيث تمثل m^* الكتلة الفعلية (effective mass) للإلكترون. وعليه



الشكل (3-6) سطح في فضاء k لحساب كثافة الحالة.

$$\nabla_k \varepsilon = \frac{\hbar^2 k}{m^*}$$

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{4\pi^3} \frac{m^*}{\hbar^2} \int \frac{dS}{k}$$

$$dS = 4\pi k^2$$

$$D(\varepsilon) = \frac{m^*}{4\pi^3 \hbar^2} 4\pi k$$

ومن المعادلة (3-21) فان

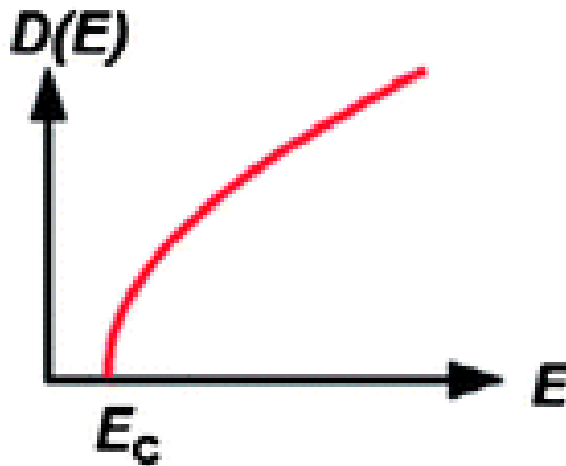
$$(\varepsilon - \varepsilon_0)^{1/2} = \frac{\hbar k}{(2m^*)^{1/2}} \quad \text{وعليه}$$

$$D(\varepsilon) = \frac{(2m^*)^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} (\varepsilon - \varepsilon_0)^{1/2} \quad 3-22$$

نلاحظ من المعادلة (3-22) ان كثافة الحالة تتناسب مع $\varepsilon^{1/2}$ و هذا يعني ان كثافة الحالة شكل قطع مكافئ

(parabolic shape) كما في الشكل (3-7)، و نلاحظ ايضا ان كثافة الحالة تتناسب مع $m^{*3/2}$ حيث بزيادة

الكتلة الفعلية تزداد كثافة الحالة.



الشكل (3-7) العلاقة بين كثافة الحالة والطاقة.

7- الكتلة الفعلية: Effective mass

عندما تنتشر الموجة $e^{i(kx-wt)}$ في وسط التشتت (dispersion medium) فان سرعة الموجة تساوي $\frac{w}{k}$ ،

بينما سرعة مجموعة الامواج (group velocity) $v_g = \frac{dw}{dk}$ في بعد واحد وفي ثلاثة ابعاد فانها تساوي $\nabla_k W$

ومن العلاقتين

$$\varepsilon = \hbar w \quad \text{و}$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad 3-23$$

نحصل على سرعة الالكترون

$$v = \nabla_k W = \frac{1}{\hbar} \nabla_k \varepsilon \quad 3-24$$

عندما يتعرض الالكترون الى قوة خارجية \vec{E} (نتيجة تسليط مجال كهربائي) فان مقدار التغير الحاصل في طاقته

في زمن dt يساوي

$$d\varepsilon = \vec{F} \cdot \vec{v} dt = F \cdot \frac{1}{\hbar} \nabla_k \varepsilon dt \quad 3-25$$

ومن العلاقة تربط بين k, ε نحصل على

$$d\varepsilon = \nabla_k \varepsilon \cdot dk \quad 3-26$$

ومن المعادلتين (3-25) و (3-26)

$$\frac{1}{\hbar} F \cdot \nabla_k \varepsilon dt = \nabla_k \varepsilon \cdot dk \quad \text{او}$$

$$\nabla_k \varepsilon \cdot \left[\frac{1}{\hbar} F dt - dk \right] = 0 \quad \text{ولكن} \quad \nabla_k \varepsilon \neq 0$$

و ذلك لان k غير ثابتة لوجود المجال الكهربائي، وعليه فان

$$F = \hbar \frac{dk}{dt} \quad 3-27$$

و بذلك فان القوة تمثل معدل تغير زخم البلورة $\hbar k$ (crystal momentum) ان الالكترون تحت تاثير هذه القوة يتحرك بتعجيل مقداره

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k \frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k (\vec{F} \cdot \vec{v}) \quad \text{او}$$

$$\vec{a} = \frac{1}{\hbar^2} \nabla_k [\vec{F} \cdot \nabla_k \varepsilon] \quad 3-28$$

ان المعادلة (3-28) لالكترون داخل بلورة تمثل قانون نيوتن في الحركة

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{1}{m} \vec{F} \quad 3-29$$

ان المركبات الثلاثة للمتجه \vec{a} في المعادلة (3-28) هي

$$\vec{a} = \frac{dv_i}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 \varepsilon_{ij}}{\partial k_i \partial k_j} F_j \quad 3-30$$

من الواضح لايمكن تطبيق قانون نيوتن بصيغته البسيطة (3-29) لان الالكترون داخل البلورة يعاني من تاثيرات

قوى اخرى بالاضافة الى المجال الكهربائي المسلط عليه. وعليه فلا بد من ادخال مفهوم الكتلة الفعلية m^* في

المعادلة (3-29) لتصبح

$$\vec{a} = \frac{1}{m^*} \vec{F} \quad 3-31$$

وبالمقارنة بين المعادلتين 30 و 31 نحصل على

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_{ij}}{\partial k_i \partial k_j} \quad 3-32$$

نفرض ان \vec{e} وحدة متجه (unit vector) باتجاه \vec{F} . ونضرب طرفي المعادلة (3-31) نحصل على مركبة التعجيل المطلوبة a_F .

$$a_F = \vec{e} \cdot \vec{a} = \vec{e} \cdot \left(\frac{1}{m^*}\right) \vec{F}$$

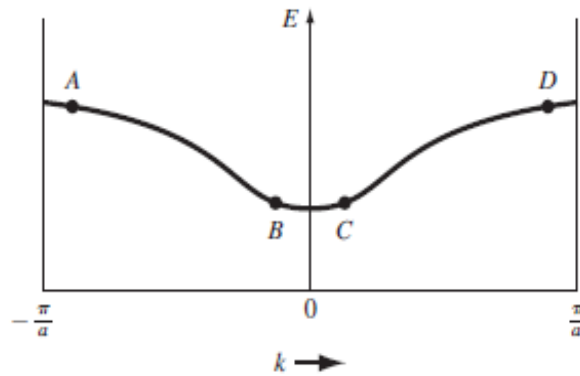
$$a_F = F \vec{e} \cdot \left(\frac{1}{m^*}\right) \vec{e}$$

$$a_F = \left(\frac{F}{m_F}\right)$$

$$\frac{1}{m_F} = \vec{e} \cdot \left(\frac{1}{m^*}\right) \vec{e}$$

3-33

ان اهمية مفهوم الكتلة الفعلية هو لمعرفة مسار الالكترن خلال حزمة الطاقة في بلورة نقية جدا. نفرض ان شكل العلاقة بين k, ϵ وكما موضح في الشكل (3-8).



الشكل (3-8) حركة الالكترن خلال حزمة الطاقة.

8- مفهوم الفجوات الموجبة:

عندما تكون حزمة طاقة مملوءة كليا عدا الحالة التي يكون متجه موجتها \vec{k} ، فيمكن القول انه توجد فجوة (hole) عند تلك الحالة ومتجه موجتها يساوي \vec{k}' ايضا. ان الفجوة تتحرك في مجال وكان لها كتلة فعلية تعاكس تماما الكتلة الفعلية للالكترن ولها نفس زخم البلورة، اي

$$\left(\frac{1}{m_h^*(k)}\right) = -\left(\frac{1}{m_e^*(k)}\right)$$

3-34

ان الفجوات تتولد قرب الحافات العليا من حزمة الطاقة، حيث الكتلة الفعلية للالكترونات عند تلك الحافات تكون سالبة و بذلك فان الكتلة الفعلية للفجوات وكذلك شحنتها تكون موجبة. نفرض ان حدود منطقة بريليون تمتد +k الى -k و عليه فان معدل التعجيل

$$\vec{a} = \int_{-k}^{+k} \frac{F}{m^*} dk$$

ان القوة F لا تعتمد على k وباستخدام المعادلة (3-32) نحصل على

$$\vec{a} = \frac{F}{\hbar^2} \left[\frac{d\mathcal{E}}{dk} \right]_{-k}^k$$

ولكن $\frac{d\mathcal{E}}{dk}$ تتناسب مع السرعة والتي تساوي صفر عند حافتي منطقة بريليون. وبذلك فان معدل تعجيل $\vec{a} = 0$. ولان عندما تكون حزمة الطاقة مملوءة عدا الحالة التي يكون متجه موجتها k' فان التعجيل يساوي التكامل اعلاه ناقصا تعجيل الالكترون الذي متجه موجته $k'/$ اي

$$\vec{a} = 0 - \frac{1}{m^*(k')} \vec{F}$$

ولما كانت الكتلة الفعلية للالكترون m_e^* قرب قمة حزمة الطاقة سالبة، فان الكتلة الفعلية للفجوة m_h^* المتولدة نتيجة فقدان الكترون تكون موجبة.

9- دراسة سطح فيرمي:

ان دراسة سطح فيرمي ذات اهمية بالغة في فيزياء الحالة الصلبة، حيث شكل سطح فيرمي يساعدنا في فهم الخواص الكهربائية والبصرية في المعادن. اما الهدف الثاني من هذه الدراسة يساعدنا في فهم تركيب حزم الطاقة في المواد الصلبة. هناك طرق عديدة تستخدم لدراسة سطح فيرمي منها:

1- الظاهرة السطحية الشاذة

2- التردد المداري

3- الظاهرة الصوتية المغناطيسية

4- ظاهرة دي هاز-فان الفن

ويمكن اجراء التجارب اعلاه في حالة تحقق الشروط التالية

1- توفر بلورة احادية التبلور

2- بلورة نقية جدا

3- درجات حرارة واطئة

4- مجال مغناطيسي عالي

ان من اهم الطرق المستخدمة في قياس سطح فيرمي هي ظاهرة دي هاز-فان الفن حيث ان نتائج العملية تحقق معلومات دقيقة عن سطح فيرمي ولمعظم المعادن.

9-1- الظاهرة السطحية الشاذة:

اجريت اول دراسة لتحديد شكل سطح فيرمي من قبل العالم بيبارد (Pippard) وذلك بقياس انعكاس وامتصاص الموجات الكهرومغناطيسية الدقيقة (electromagnetic microwave) من سطح معدن النحاس (بغيايب المجال المغناطيسي) واذا كان تردد الموجات الدقيقة ω ليس كبيرا، فان المجال الناتج عن هذه الموجات سوف يخترق المعدن لمسافة δ_c حيث

$$\delta_c = \frac{1}{\sqrt{\frac{\mu_0 \omega \sigma}{2}}} \quad 3-35$$

وتسمى δ_c العمق السطحي الكلاسيكي (classical skin depth) و σ التوصيلية الكهربائية تم اشتقاق المعادلة اعلاه على اساس ان العمق السطحي δ_c اكبر من معدل مسار الالكترون الحر l . عندما تكون البلورة نقية جدا وعند درجات حرارية واطئة جدا فان δ_c تقترب او اقل من معدل مسار الالكترون الحر l وبذلك فاننا نحتاج الى نظرية اكثر دقة لتفسير سبب عدم استخدام نظرية تناقص المجال اسيا خلال المسافة δ_c وبذلك تسمى الظاهرة السطحية الشاذة ان جزءا من الالكترونات يساوي δ/l يساهم في عملية التوصيل الكهربائي وعليه فان

$$n_{eff} = \frac{\delta}{l} n$$

حيث n كثافة الالكترونات و n_{eff} كثافة الالكترونات الفعالة δ هي العمق السطحي. وبذلك فان

$$\sigma_{eff} = \frac{\delta}{l} \sigma_0$$

حيث σ_0 التوصيلية الكهربائية الاعتيادية و σ_{eff} هي التوصيلية الكهربائية الفعالة

$$\sigma_{eff} = \frac{\delta}{l} \left(\frac{n_e^2 l}{m v_f} \right) = \frac{n_e^2 \delta}{m v_f} \quad 3-36$$

وبالتعويض عن σ ب σ_{eff} في المعادلة (3-35) نحصل على

$$\delta = \left(\frac{1}{\mu_0 w \sigma_{eff}^{1/2}} \right)^{1/2} \quad 3-37$$

من المعادلتين 36 و 37 نحصل على

$$\delta^3 = \frac{2m v_f}{\mu_0 w n_e^2} \quad 3-38$$

نلاحظ من المعادلة اعلاه ان التوصيلية الفعالة تتناسب مع $w^{1/3}$ ولا تعتمد على مسار الالكترون الحر وبذلك فاننا ضمن حالة شاذة تدعى الظاهرة السحية الشاذة. ان من اهم مميزات هذه الظاهرة هو اعتمادها على الشكل

الهندسي لسطح فيرمي وذلك لان الالكترونات التي تسير موازية للسطح هي التي تساهم في عملية التوصيل الكهربائي.

9-2- التردد المداري (السايترون):

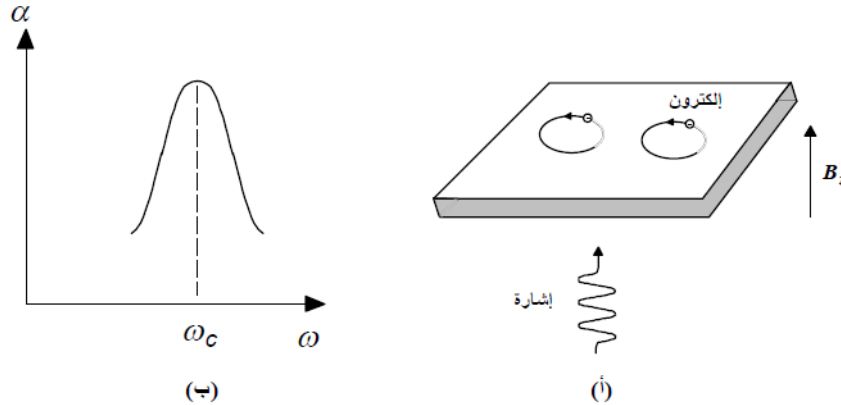
في هذه الظاهرة عند تطبيق مجال مغناطيسي عمودي على شريحة معدنية فإن ذلك يجعل الإلكترونات تتحرك

في مسار دائري عكس اتجاه حركة عقارب الساعة في مستوى عمودي على المجال وكما موضح بالشكل (3-9)

(9أ). تسمى مثل هذه الحركة بحركة السيكلوترون. يعطى تردد هذه الحركة (تردد السيكلوترون) بالعلاقة الآتية

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*}$$

3-39



الشكل (3-9) أ- رسم تخطيطي يبين حركة السيكلوترون، ب- اعتماد معامل الامتصاص على التردد.

بالتعويض في هذه المعادلة بكتلة الإلكترون الحر نجد أن التردد الخطي للسيكلوترون يكون

$$\nu_c = \frac{\omega_c}{2\pi} = 2.8B \text{ GHz}$$

حيث B بالكيلوكاوس، فإذا كانت B=1kG فان التردد يكون $\nu_c = 2.8 \text{ GHz}$ ويكون في مدى

المواجت الدقيقة.

افترض الآن أن إشارة كهرومغناطيسية تمر عبر الشريحة المعدنية في اتجاه موازى للمجال المغناطيسي، فإن المجال الكهربى للإشارة سوف يؤثر على الإلكترونات ويتم إمتصاص جزء من طاقة الإشارة بواسطة الإلكترونات. يكون معدل الإمتصاص قيمة عظمى عندما يتساوى تردد الإشارة مع تردد السيكلوترون، أي أن، $\omega = \omega_c$

تعبر هذه المعادلة عن حالة الرنين فى السيكلوترون وعندما تتحقق هذه الحالة يكون الإلكترون فى طور واحد مع الموجة على مدى كامل الدورة. عندما لا تتحقق هذه المعادلة فإن الإلكترون يكون فى طور واحد مع الموجة على مدى جزء من الدورة يمتص فيها الطاقة من الموجة وفى باقى الدورة يكون خارج طور الموجة ويفقد الطاقة التى امتصها.

يستخدم تردد السيكلوترون بشكل شائع فى قياس كتلة الإلكترون فى المعادن والمواد شبه الموصلة. يتم تعيين تردد السيكلوترون من المنحنى ويعوض به فى المعادلة (3-39) لحساب قيمة الكتلة الفعالة للإلكترون. وتعتبر هذه الطريقة دقيقة جدا وخاصة عند استخدام شعاع الليزر.

9-3- الظاهرة الصوتية المغناطيسية:

يمكن الحصول على معلومات مباشرة عن الشكل الهندسى لسطح فيرمي وذلك عن طريق قياس توهين (attenuation) الموجات الصوتية فى المعادن خلال انتشارها عموديا على مجال مغناطيسى منتظم و خاصة اذا كانت الموجة ناتجة عن ازاحة الايونات التى تكون عمودية على اتجاه انتشارها وعلى اتجاه المجال المغناطيسى المسلط لما كانت هذه الايونات مشحونة كهربائيا، فان الموجة تكون مصحوبة بمجال كهربائى له نفس التردد و متجه الموجة والاستقطاب. ان الالكترونات فى المعدن تتصادم مع الموجة الضوئية من خلال هذا المجال الكهربائى وعليه اما ان تكون معرقله او مقوية لانتشار الموجة. اذا استطاع الالكترون ان يعمل عدة مدارات كاملة بوجود المجال المغناطيسى قبل تصادمه فان توهين الموجات الصوتية يعتمد على الطول الموجى بطريقة تعكس لنا الشكل الهندسى لسطح فيرمي. عندما يقترب الطول الموجى للموجة الصوتية من ابعاد المدار

الالكتروني فان تاثير المجال الكهربائي للموجة على الالكترون يعتمد على مدى تقارب طول الموجة λ مع اقصى بعد خطي l_c للمدار باتجاه انتشار الموجة (l_c يمثل قطر مدار الالكترون). عندما يكون الالكترون في مدار قطره يساوي نصف طول الموجة فان الالكترون بتعجيل دائم (بتباطاً دائم) خلال مداره الكامل بواسطة الموجة الصوتية. اما اذا كان قطر المدار مساويا الى طول موجة كاملة فان الالكترون يتعجل دائما خلال جزء من مداره ويتباطأ في الجزء المتبقي من المدار وكما موضح بالشكل (10-3). اي ان اقتران الالكترون بالموجة يكون ضعيفا عندما يساوي قطر مداره nl ويكون قويا عندما يساوي قطر مداره $(n+1/2)l$ ، اي

$$l_c = nl \quad \text{اقتران ضعيف}$$

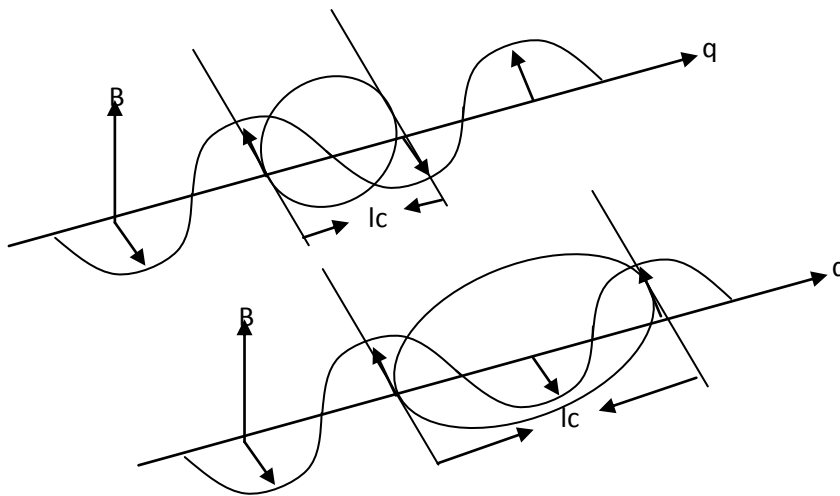
$$l_c = (n + \frac{1}{2})l \quad \text{اقتران قوي}$$

لذا فان الالكترونات القريبة من سطح فيرمي تستطيع التأثير على توهين الموجات الصوتية لان مبدأ الانفراد يمنع الالكترونات ذات الطاقات القليلة من تبادل كميات قليلة من الطاقة مع الموجة. ان التوهين والموجات الصوتية تتغير دوريا مع مقلوب الطول الموجي، وان الدورة تساوي مقلوب اقصى قطر لسطح فيرمي باتجاه انتشار الموجة.

اي

$$\Delta \left(\frac{l}{l_c} \right) = \frac{l}{l_c}$$

3-40



الشكل (10-3) مدار الالكترون في قطر يساوي نصف طول الموجة الصوتية وطول موجة كاملة.

9-4- ظاهرة دي هاز-فان الفن:

في هذه التجربة يتطاب بلورة نقية جدا ومجال مغناطيسي عالي عند درجات حرارة واطئة. تكون المدارات الالكترونية مكممة بوحدات طاقة $\hbar\omega_c$ عندما يكون المجال المغناطيسي موازي للمحور z، اي

$$\epsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \quad 3-41$$

اي ان طاقة المدارات الالكترونية هي مجموع الطاقة المكممة للحركة الدورانية في مستو عمودي على المجال و الطاقة الانتقالية باتجاه المجال، لما كانت

$$\omega_c = \frac{eB}{m_e}$$

$$m_e = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{dA}{d\epsilon} \quad 3-42$$

$$\omega_c = \frac{2\pi eB}{\hbar^2} \frac{\partial \epsilon}{\partial A} \quad 3-43$$

ان المعادلة (3-42) تتحقق عندما

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2\pi m_e} A_n \quad 3-44$$

حيث A_n مساحة المدار في فضاء k. ومن المعادلتين 41 و 44 نحصل على

$$A_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi eB}{\hbar} \quad 3-45$$

نستنتج من المعادلة اعلاه ان المساحة الدائرية للاكترون هي مكممة ايضا في فضاء k بوحدات $\frac{2\pi eB}{\hbar}$. ان المستويات الجديدة موجود مجال مغناطيسي تسمى مستويات لانداو (Landau levels). ان المساحة بين سطحي الطاقة التي تفصلهما طاقة مكممة قدرها $d\epsilon$ هي

$$dA = \frac{2\pi m_e}{\hbar^2} d\varepsilon$$

عند زيادة قيمة المجال المغناطيسي المسلط فان مستويات لانداو تكبر وتترك سطح فيرمي وهذا يؤدي الى ظاهرة التذبذب في معظم الخواص الفيزيائية في المعادن كالمقاومة النوعية والحرارة النوعية. وعند هذه الحالة فان

$$A_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi e B}{\hbar} = A_0 \quad 3-46$$

حيث A_0 اقصى مساحة external area للمدار. عندما تكون n كبيرة ($n=10^4$) فمن 46 نحصل على

$$n = \frac{F}{B}$$

حيث $F = \frac{\hbar A_0}{2\pi e}$ ويسمى تردد دي هاز-فان الف. ان العزم المغناطيسي μ (magnetic momentum) عند

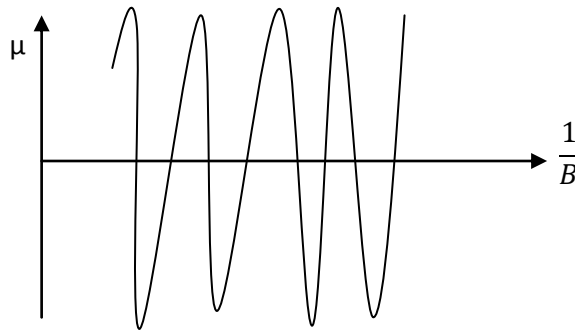
درجة حرارة الصفر المطلق ياخذ الصيغة التالية $\mu = -\frac{\partial u}{\partial B}$ ، حيث μ يتذبذب مع $1/B$ وكما في الشكل (3-

11). ان تذبذب العزم المغناطيسي عند تغير المجال و في درجات حرارة الواضئة يدعى ظاهرة دي هاز-فان

الف. ان التذبذب يحصل بفترات متساوية من $1/B$ ، وعليه

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi e}{\hbar A_0} \quad 3-47$$

من قياس $\Delta\left(\frac{1}{B}\right)$ يمكن الحصول على مساحة سطح فيرمي ومنها يمكن معرفة شكل وابعاد سطح فيرمي.



الشكل (3-11) العزم المغناطيسي كدالة $1/B$.