# الفصل السادس نظرية الانطقة (الحزم) للمواد الصلبة الالكترونات الحرة

**أصل فجوة الطاقة**
**دالة بلوخ**
**ديناميكية حركة الالكترونات**
**(سرعة الطور وسرعة المجموعة)**
**الكتلة الفعالة**
**تأثير هول**
**المعادن، العوازل، اشباه الموصلات**

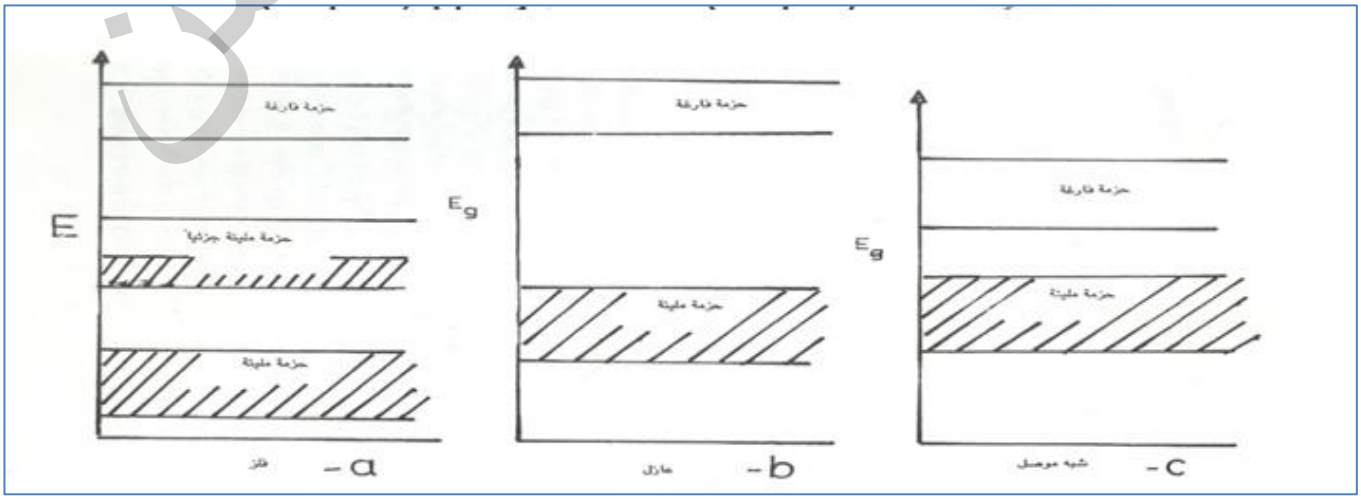
## المقدمة:

أسباب فشل النظرية الكلاسيكية والنظرية الكمية للغاز الالكتروني:

1- لم تستطع هذه النظريات تفسير تلك الفوارق الكبيرة في التوصيل الكهربائي للمواد المختلفة من عازلة إلى شبه موصلة إلى موصلة، وذلك بسبب إهمال التفاعل بين الكترونات التوصيل والطبيعة الدورية للشبيكة البلورية.

2- وكذلك عدم الأخذ بنظر الاعتبار بأن المادة الصلبة تمتلك حزمة Band متكونة من عدد كبير من مستويات الطاقة قريبة بعضها من البعض.

إن عدد مستويات الطاقة يساوي عدد الذرات في البلورة وعليه فأن حزمة الطاقة Energy Band تظهر وكأنها مستمرة، إن حزم الطاقة يمكن أن تكون مفصولة بعضها عن بعض بمناطق محظورة Forbidden تمنع إلكترونات التوصيل من احتلالها أو الوجود فيها وتسمى هذه المناطق بفجوة الطاقة Energy Gap. إن التوصيل الكهربائي في المادة الصلبة يتم عن طريق انتقال الالكترونات ضمن المادة، ولما كان لابد للإلكترون أن يحتل مستوي من الطاقة، فأن انتقال الإلكترون يجب أن يتم عن طريق انتقاله من مستوي إلى أخر. لهذا فأن التوصيل الكهربائي يتطلب وجود الكترونات ومستويات شاغرة من الالكترونات في الحزمة.



في الموصـــل (**المعادن**): إن التوصـــيل الكهربائي الجيد في الفلزات يعود إلى كون الحزمة العليا والذي يطلق عليها حزمة التوصيل Conduction Band مليئة جزئيا بالالكترونات وهذا يكون ناشئا عن أحد أمرين:

- فأما أن يكون المستوي الأصـلي في ذرة الفلز ملئ جزئيا وبهذا فأنه ينشـطر إلى حزم بحيث تبقى الحزمة مليئة جزئيا
- أو أن تكون ناشـــئة عن حزمتين متداخلتين أحدها مليئة وتعود إلى مســـتوى ملئ في الأصل وأخرى فارغة ناشئة عن مستوي أعلى وبهذا ينجم عن هذا التداخل حزمة مليئة جزئيا وكما هو مبين في الشكل (a).

**في المواد العازلة:** أما في المواد العازلة فتكون حزمة التكافؤ Valance band مليئة بالالكترونات وعلى العكس من ذلك تكون حزمة التوصـيل band Conduction فارغة من الالكترونـات. وأمـا بـالنســـبـة إلى الفجوة المحظورة بين الحزمتين فتكون كبيرة جدا بالمقارنة مع الفجوة المحظورة في الفلزات أو أشباه الموصـلات، وكما هو مبين في الشكل (b).

إن التوصـــيـل الكهربـائي يتطلـب انتقـال الإلكترون من حزمـة التكـافؤ المملوءة بالالكترونات إلى حزمة التوصـــيل الفارغة من الالكترونات عبر الفجوة المحظورة بينهما، أي أنه يجب على الإلكترون أن يكتســب طاقة لكي يتمكن من الانتقال من حزمة إلى حزمة ويطلق عل هذه الطاقة (Eg) بفجوة الطاقة.

**في المواد شبه الموصلة:** أما بالنسبة إلى المواد شبه الموصلة. فأن الفرق الأساس بينها وبين المواد العازلة يكمن في قيمة فجوة الطاقة التي تكون أقل بكثير من قيمة فجوة الطاقة في المواد العازلة وكما هر موضح في الشكل (c)

س) التوصيل الكهربائي في المواد العازلة قليل جدا. علل ذلك؟

الجواب: وذلك لكون فجوة الطـاقـة كبيرة تجعل عـدد الالكترونـات المنقولـة إلى حزمـة التوصيل قليلة في درجات الحارة الاعتيادية أو حتى في درجات الحرارة العالية.

إن قيمة فجوة الطاقة في الكثير من المواد العازلة تتراوح بين 3 إلى 10 إلكترون فولت أما التوصيل الكهربائي في المواد شبه الموصلة فتكون معتدلة نوعا ما عند درجات الحرارة العالية.

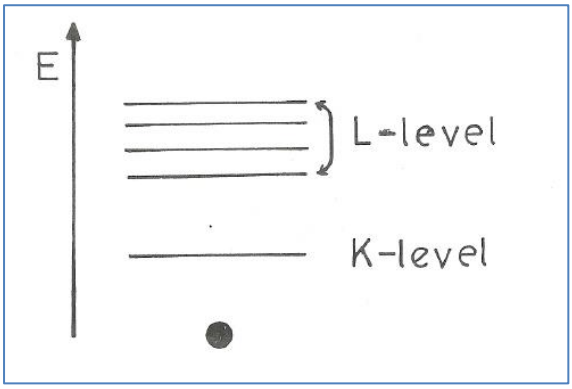
س) عند درجات الحرارة الواطئة فيكون التوصـــيل الكهربائي قليل جدا في المواد شـــبه الموصلة؟

الجواب: وذلك لأن حزمة التوصـيل تكون فارغة عند درجة حرارة الصـفر المطلق. وكلما ارتفعت درجات الحرارة ينتقل عدد كبير من الالكترونات إلى حزمة التوصـيل وترتفع قيمة التوصيل الكهربائي إلى حد كبير.

## أصل فجوة الطاقة:

## مستويات الطاقة وحزم الطاقة:

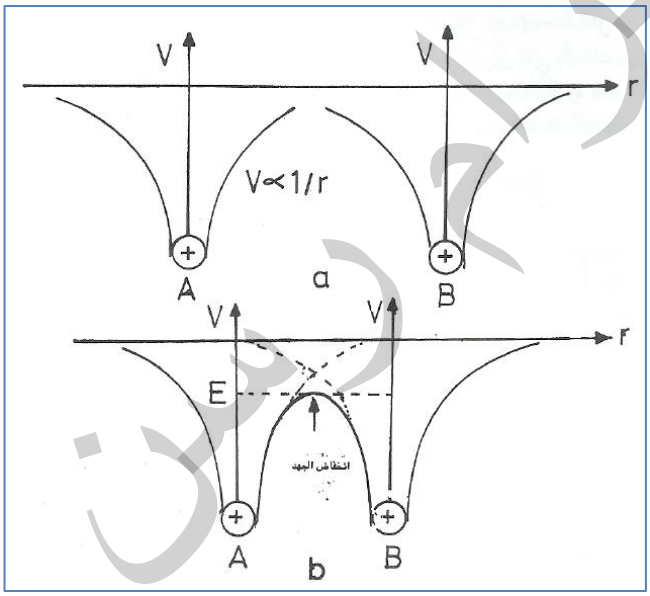
- من المعروف أن الالكترونات في حركتها في الذرة تستقر في أغلفة حول النواة وفي مجموعات أو مستويات ذات طاقة محددة.
- تقل طاقة ارتباطها بالنواة كلما بعدت مستويات وجودها عن مركز النواة وبذلك يسهل انطلاقها بحرية في مجال نفوذها.
- ولا تتساوى طاقات الالكترونات الموجودة في غلاف واحد (عدا غلاف K) بل تتفاوت (زوجيا) بقدر قربها أو بعدها عن النواة.




بين الشكل رسما توضيحيا للذرة مفردة معزولة، عن باقي الذرات ( أي بإهمال أثر الذرات الأخرى عليها) وفيه توضح المستويات التي يمكن أن تحتلها الالكترونات.

ويلاحظ أن الالكترونات تبدأ أولا في شغل المستويات القرية من النواة (ذات الطاقة الأقل) وبحيث كل مستوي لا يمكن أن يحوي أكثر من إلكترونين فقط لهما دوران برمي يتعاكس في الاتجاه وذلك حسب قاعدة باولي للاستبعاد.

**إن السؤال الذي يطرح نفسه الآن هو ماذا يحدث لهذه المستويات عند تجميع الذرات لتكوين المادة الصلبة؟.**



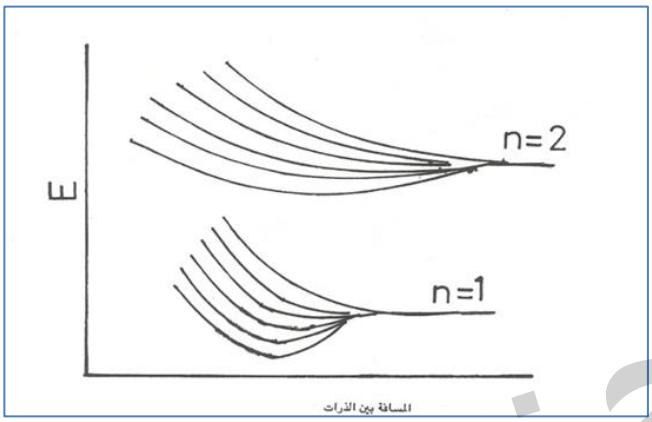

دعنا نأخذ ذرة منفردة، فأن الإلكترون يتحرك حول النواة ويكون تحت تأثير جاذبية النواة فإذا كان لهذا الإلكترون أن يتحرر من جذب النواة فعليه أن يعبر حاجز الجهد وهذا الجهد يتناسب عكسيا مع المسافة من النواة أي ان $(V \propto \frac{1}{r})$ وهكذا يبدو منحني الجهد وكما هو موضح في الشكل (a)

وألان إذا أخذنا الذرتين A وB وجعلناهما تقتربان الواحدة من الأخرى فأنه كلما ازداد التقارب بينها أصبحت قوة التجاذب بين النواة الواحدة والالكترونات الأخرى أشد وينجم عن ذلك أنه ينخفض حاجز الجهد في المجال ما بين الذرتين وكما يبدو ذلك في الشكل (b) في حين يبقى حاجز الجهد عاليا في الطرف الآخر للذرتين.

أن زيادة التقارب بين الذرتين يؤدي إلى تداخل أغلفتهما، وبهذا ينخفض حاجز الجهد بينها إلى الحد الذي يصبح فيه مستوي الطاقة E المبين في الشكل السابق واحدا لكل من

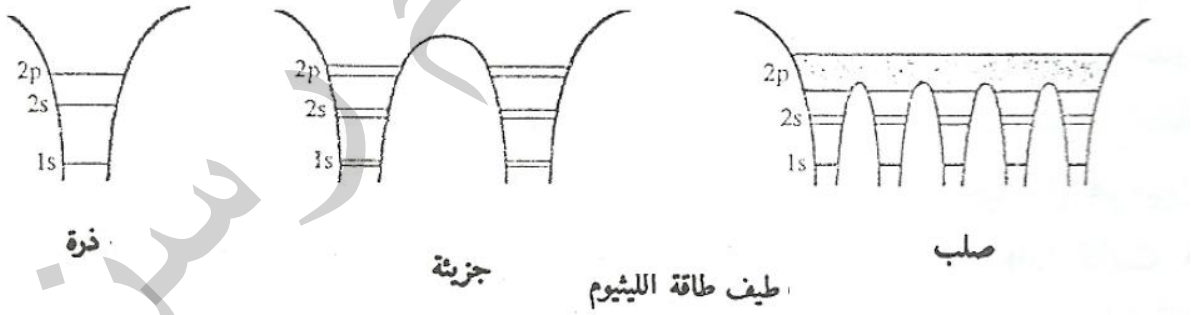
الذرتين. فإذا كان لكل مستوي إلكترون واحد فأن تداخل المستويين يعني أن المستوي الموحد للذرتين سيضم إلكترونين وعندئذ يتعذر التمييز بين إلكترون الذرة A والذرة B. إن احتواء المستوي لإلكترون لا يتعارض مع قاعدة باولي للاستبعاد شرط أن يكون للإلكترونين دوران برمي متعاكس (s=±1/2).في كل الأحوال يسع كل مستوي إلكترونان فان في الطاقة قليلا حيث لكل اتجاه دوراني طاقة.

ولكن الصورة تختلف أذا كان المستوى في الذرة المنفردة في الأصل يحتوي على إلكترونين فمثلا عند التقاء أربعة ذرات من المادة فأن المستوي n =1 في كل ذرة ويكون له إلكترونان فعند تداخل الأغلفة للذرات الأربعة يصبح لدينا ثمانية الكترونات بالمستوي نفسه وهذا يتناقض مع قاعدة باولي للاستبعاد ولهذا يتحتم عندئذ انشطار المستوي n=1 إلى اربعه مستويات متقاربة بالطاقة وكل مستوي فيه إلكترونان.




ونستطيع أن نعمم هذا المبدأ بقولنا إنه إذا التقى N من الذرات في مادة فأن كل مستوي يجب أن ينشطر إلى N من المستويات ولكل مستوي إلكترونان إن المستوي الواحد يتحول إلى حزمة من المستويات level band ولها طاقة حزمة Energy band تساوي بضع إلكترون – فولت وكما هو مبين في الشكل.

لاجل توضيح ذلك دعنا نأخذ فلز الليثيوم $Li^3$ مثالا على إن ذرة الليثيوم تحتوي عل ثلاثة الكترونات موزعة عل الأغلفة الثانوية $1s^2\ 2s^1$وعند حل معادلة شرودينكر نحصل على طاقة منفصلة لذرة الليثيوم ويرمز لها 1s,2s,2pوكما هو مبين في الشكل.

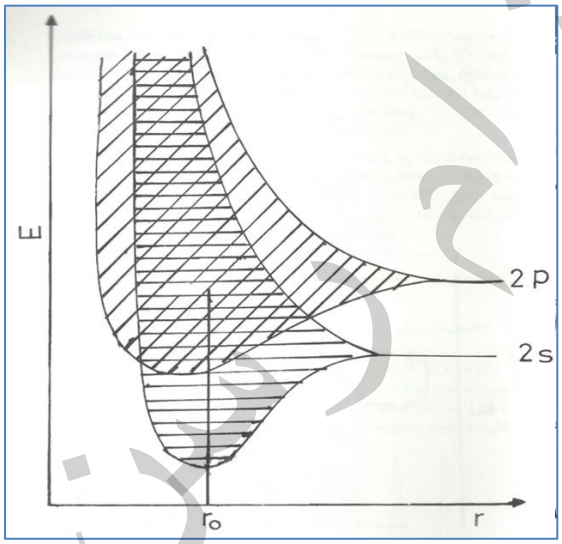



وألان إذا أخذنا ذرتين من الليثيوم وجعلناهما يقتربان الواحدة من الأخرى لتكون جزيئه الليثيوم $Li_2$. فإذا كان لكل غلاف موحد للذرتين يضم إلكترونين لها دوران برمي متعاكس (s=±1/2) ويملكان طاقة مختلفة قليلا. وعليه ينشطر الغلاف الموحد إلى مستويين فرعين للطاقة وكما هو مبين في الشكل اعلاه.

يعتمد مقدار الانشطار في كل مستوي وطاقة (غلاف موحد) أساسا على المسافة بين نواتي الذرتين المكونتين لجزيئه وعلى الغلاف الذري فمثلا يكون الانشـــطار في الغلاف الثانوي 2p اعلي من ذلك الانشطار في الغلاف الثانوي 2s ويكون الانشطار في الغلاف الثانوي 1s أوطأ من ذلك الانشطار للغلاف الثانوي 2s. إن تفسير ذلك أن، نصف قطر الغلاف الثانوي 1s يكون صغيرا جدا، أي يكون الإلكترون في هذا الغلاف مقيدا بقوة إلى نواة ذرته ولا يتأثر كثيرا بالمجال الناشئ عن اقتراب ذرة من ذرة أخرى. ومن جهة أخرى يكون العكس صحيحا، حيث يكون ارتباط الالكترونات الأغلفة الثانوية 2s و 2p مضطربا مع نوى ذراتها وذلك لكون أنصاف أقطار 2p,2s كبيرة.

يمكن تعمم الاعتبارات المذكورة أعلاه لجزيئه Li المتعددة الذرات. فلجزيئية اللثيوم ذات الذرات الثلاثة ينشطر كل غلاف إلى مستويات بينما كل غلاف في جزيئه ذات أربع ذرات إلى مجموعة رباعية. وهكذا يمكن اعتبار الليثيوم الصلب حالة نهائية عندها يصبح عدد الذرات كبيرا جدا وينتج عنها بلورة صلبة.

وبموجب ما تقدم تنشـــطر الأغلفة الموحدة إلى N من المســـتويات الثانوية المتقاربة بعضـــها مع بعض حيث N تمثل عدد الذرات إلي تضـــمها المادة الصـــلبة، ولما كان عدد الذرات N في المستويات الصلبة كبيرا جدا (حوالي $10^{23}$ ذرة لكل مول ) كانت المستويات الثانوية مقاربة جدا بعضـها من بعض حيث يمكن لها أن تتداخل بعضـها ببعض لتشكل ما يسمى بحزمة الطاقة Energy band. وعلى هذا الأساس تكون كل من الأغلفة الثانوية 2p,2s,1s.. الخ حزم طاقة 2p,2s,1s... الخ عل التعاقب وكما هو مبين في الشـــكل (5.9c).



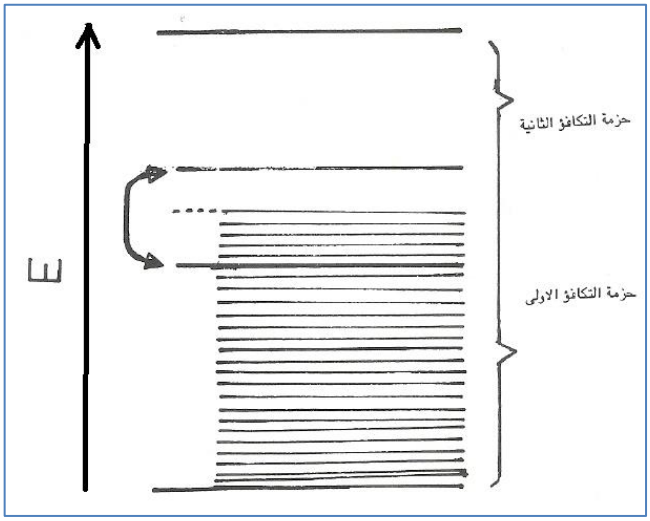

إن الفلزات في طبيعة بنيتها البلورية يحتم تقارب ذراتها من بعضـها البعض بحيث لا يمكن اعتبار ذراتها معزولة عن بعضـها لبعض بحيث أن كل ذرة تؤثر بمجالها على جارتها وهذا التأثير في الحقيقة متبادل بينها. فبدلا من إن تحتل مستويات الطاقة المختلفة في الذرة حدودا ضـيقة في حالة الذرة المعزولة فعند أن هذه الحدود أو المستويات تتوســـع في حدودها كلما اقتربت ذرتان من بعضـها البعض فتأخذ شكل حزم من مستويات عديدة الطاقة. وهذه الحزم تشـــتد في توســـعها بصـفة خاصـة في مستويات الأغلفة الخارجية وكما هو مبين في الشكل.

إن هذا التوسع يتوقف على المسافة الذرية (r). فإذا كانت هذه المسافات صغيرة أشتد التوسع في كل مستوى حتى تتداخل الحزم الناتجة لها. بينما لو كانت المسـافات كبيرة بن التوســـع في حدود ضـــيقة فلا يحدث تداخل بل تبقى فجوات gaps بينها، وحزم الطاقة الناتجة تحتوي في حد ذاتها على مستويات طاقة عديدة متباينة. وهذه المستويات يمكن إن يشغلها ويمر عبرها الكترونات، إذا أعطي للإلكترونات طاقة كافية تسمح برفعها وتواجدها في هذه المستويات. أي أن هذه المستويات الجديدة في حزم

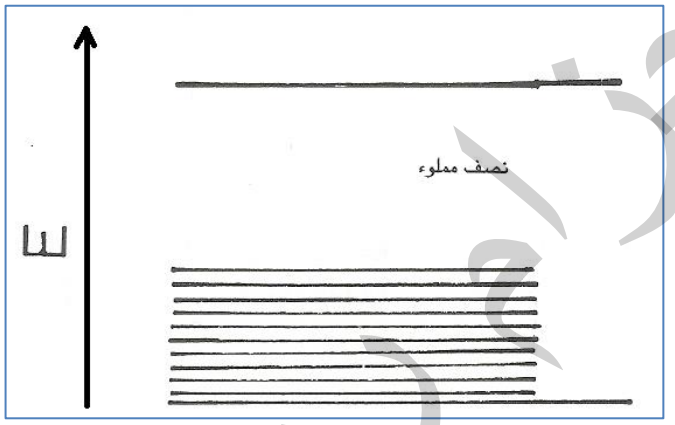
الطاقة تعتبر ممرات لتلك الالكترونات التي يؤهلها مستوى طاقتها للارتفاع إليها. وتتواجد مستويات الطاقة المكونة للحزم بإعداد ضخمة يمكنها أن تستوعب مرور كل الإلكترونان (من الغاز الالكتروني) في كل ذرة والتي يساوي عددها عدد ذرات الفلز. ولكون هذه الالكترونات إما أن تكون أحادية في الغلاف الواحد أو ثنائية.

- فإذا كان الفلز ثنائي التكافؤ فهذا يعني أن الالكترونات تشغل حزمة بكاملها.
- أما إذا كان الفلز أحادي التكافؤ فهذا يعني أن الالكترونات تشغل نصف الحزمة.

في بعض الفلزات يكون رص الذرات فيها بدرجة كبيرة تجعل من الحزم المتكونة تقترب من بعضها البعض فتتضاءل الفجوات وقد تتلاشى بل قد يحدث تداخل بين الحزم وكما هو مبين في **الشكل السابق والشكل التالي** وفي هذه الحالة لا يبذل الغاز الالكتروني أي مجهود لإيجاد مسارات له إذ أن الحزمة الثانية متصلة في تدرج مستويات طاقتها مع مستويات الحزمة الأولى وبالتالي يتصف الفلز بأنه جيد التوصيل للكهربائية.

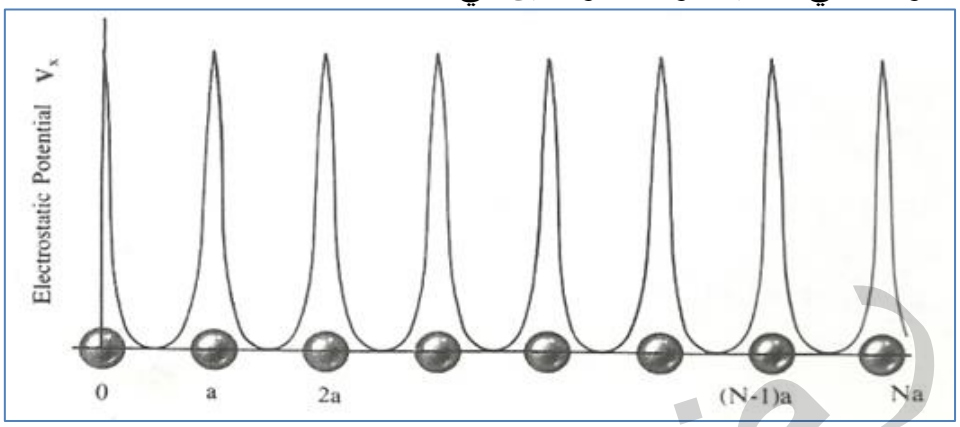



أما في الفلزات الأحادية فأن الكترونات الغاز الالكتروني لا تشغل كل الحزمة الأولى وكما مبين في الشكل وبالتالي تبقى بها مسارات فارغة تصلح لمرور الالكترونات دون إعطاء طاقة عالية لها حيث يكفي الجهد لرفع هذه الالكترونات.



## الجهد الدوري ونظرية بلوخ:

كما هو معروف أن القلوب الايونية الموجبة في البلورة المثالية تترتب عل شكل صفوف دورية منتظمة، وتكون في حالة غير مستقرة حيث تهتز حول مواقع توازنها. تتحرك الالكترونات الحرة بوجود جهد دوريpotential Periodic ناتج من ترتيب قلوب الايونات الموجبة في الشبيكة وكما هو مبين في الشكل.




لقد تمكن بلوخ من دراسة الجهد لكل دورية الشبيكة اي جهد البلورة واستنتج إن الجهد يتضمن جزئيين أساسيين هما:

**أولا: جهد كهروستاتيكي $V_i(\bar{r})$ ينشأ عن تفاعل إلكترون التوصيل مع جميع القلوب الأيونية الموجبة إلي تشكل شبيكة البلورة.** إن هذا الجزء من جهد البلورة V(r) يجب أن يمتلك الدورية الانتقالية للشبيكة المثالية نفسها $(\bar{R})$ (أي عند إهمال اهتزاز القلوب الأيونية الموجبة).

**ثانيا: جهد$V_e(r)$ ينشأ من تفاعل إلكترون التوصيل وبقية الكترونات التوصيل (إلكترون بلوخ) المتحركة خلال شبيكة البلورة.** إن هذا الجهد يجب أن يكون جهدا دوريا لكي تحقق متطلبات التعادل الكهربائي في البلورة والأخذ بنظر الاعتبار فكرة التنافر بين إلكترون وأخر.

وعلى هذا الأساس يمكن كتابة الجهد الكلي للبلورة بـ:

$$V(\bar{r}) = V_i(\bar{r}) + V_e(\bar{r})$$

وألان وبعد معرفة الجهد الكلي يمكن كتابة معادلة شرودينكر بالصيغة الرياضية التالية:

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

وممكن كتابة الجهد الكلي الدوري لإلكترون التوصيل بالصيغة التالية:

$$U(r) = -e\,V(\bar{r})$$

وبالتعويض نحصل عل:

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

لقد تمكن بلوخ من حل المعادلة الاخيرة لتعطي نوعين من الحلول:

$$\psi(\bar{r}) = u_k(\bar{r})\, e^{\pm 2\,\mu.\bar{r}}$$

$$\psi(\bar{r}) = u_k(\bar{r})\, e^{\pm\, i.j.k}$$

✓ الحل الأول غير محدود حيث أن الدالة الموجية $\psi(\bar{r})$ تؤول إلى ما لانهاية عندما تؤول r إلى ما لانهاية لذلك فلهذا الحل يمثل أمواج متقدمة Progressive wave غير موجودة بالشبيكة.

✓ أما الحل الثاني فيمثل أمواجا موقوفة Stationary Wave وتسمى هذه المعادلة بنظرية بلوخ.

في الحلين السابقين $\bar{k}$ هي متجه الموجة الذي يرافق طول موجة ديبرولى إي $\left(\bar{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\right)$ وزخم ديرولي $\left(\bar{p} = \hbar\bar{k}\right)$ حيث يدعى الزخم P بالزخم البلوري للإلكترون.

إن $u_k(\bar{r})$ هي دالة موجية لاتتوقف على الزمن ولكن على متجه الموجه $\bar{k}$ فقط الذي ينسب عادة إلى زخم الإلكترون فضلا عن امتلاكها تماثلا انتقالي$\bar{R}$ إي لها نفس دورية الشبيكة وهذا بعني أن:

$$u_k(\bar{r}) = u_k(\bar{r} + \bar{R})$$

حيث إن ( $\bar{R}$) تمثل المتجه الانتقالي للشبيكة

وبتعويض المعادلة الاخيرة في الحل الثاني نحصل عل:

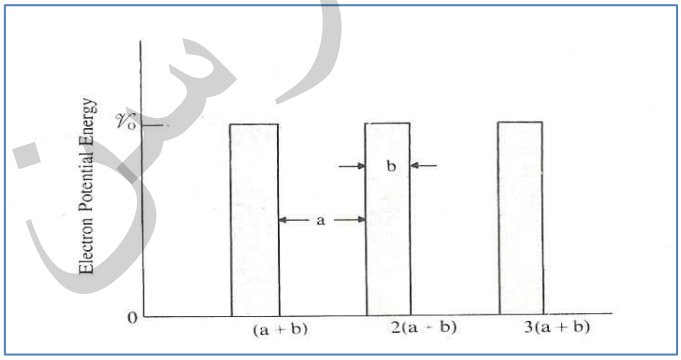
$$\psi_k(\bar{r} + \bar{R}) = u_k(\bar{r} + \bar{R})e^{i\bar{k}(\bar{r}+\bar{R})}$$

$$\psi = \psi_k(\bar{r})e^{i\bar{k}.\bar{R}}$$

وندعى هذه المعادلة بدالة بلوخ.

إن ملخص نظرية بلوخ تنص على أن الدوال الذاتية لمعادلة موجة مرافقة لإلكترون تحت تأثير جهد دوري تكون بصيغة حاصل ضرب موجة مستوية متنقلة $e^{\mathrm{ikr}}$ مع الدالة $u_k(\bar{r})$ ذات دورية مثل تلك لشبيكة البلورة $(\bar{R})$

## نموذج كرونيج وبيني:




لتوضيح وجود مناطق من الطاقة مسموح بها للإلكترون وأخرى محظورة عليه وضع كرونيج وبيني نموذجا من بعد واحد يمثل شبيكة خطية مكونة من ذرات تبعد بعضها مسافة (a + b) وكما هو مبين في الشكل. يمكن تمثيل الخواص المميزة لانتشار الأمواج الالكترونية عل هذه الشبيكة بتركيب دوري مربع له نفس دورية الشبيكة ويمثل بئر الجهد الذي تتحرك عليه الالكترونات، لقد اعتبر الطاقة الكامنة مساوية صفرا في مناطق مثل (0<x<a) بينما اعتبرها مساوية ل($u_\circ$) في مناطق مثل a<x<a +b ولذلك تكون دورية الشبيكة (period) في (a +b)

حيث ان b تمثل سمك حاجز الجهد وان a يمثل اتساع بئر الجهد. إن الدوال الموجبة إلي استخدماها كرونيج وبيني لحل معادلة شرودنكر الخطية في أتجاه (x) تكون بصيغة ($\psi_K(x) = u_k(x)e^{ikx}$) حيث إن $u_k(x)$ تمثل دالة معدلة modulating للموجات المستوية المنتقلة ولها دورية الشبكة نفسها. لقد تمكن كرونيج وبيني من حل معادلة شرودنكر

$$\frac{d^2(k)}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2}(E - u_\circ)\psi(k) = 0$$

$$\frac{d^2u(k)}{dx^2} + 2ik\frac{du(k)}{dx} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - E_k - v)u_k = 0$$

يمكن حل معادلة شرويدنكر للمنطقتين المتميزتين وهما:

أولا: في المنطقة 0<X<a إي داخل بئر الجهد يكون حل المعادلة على هذا الشكل

$$u_1(k) = Ae^{i(\alpha-k)x} + Be^{-i(\alpha+k)x}$$

حيث أن

$$\alpha = \sqrt{\frac{8\pi^2 m}{2h}}E = \frac{2\pi}{h}\sqrt{2mE}$$

ثانيا: في المنطقة a<x<(a + b) أي داخل حاجز الجهد يكون حل المعادلة على هذا الشكل:

$$u_2(k) = Ce^{(\beta-ik)x} + De^{-(\beta+ik)x}$$

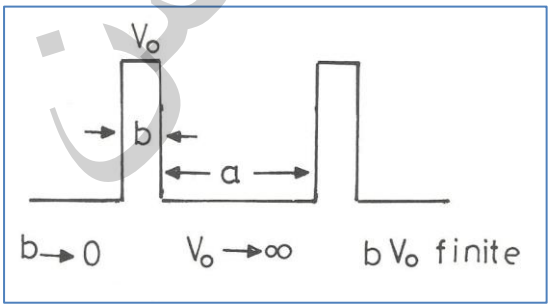
حيث أن

$$\beta = \left[\frac{8\pi^2 m}{h^2}(u_\circ - E)\right]^{\frac{1}{2}}$$

إن الحل النهائي للمعادلات يؤدي إلى:

$$\left[\frac{\beta^2-\alpha^2}{2\beta\alpha}\right]\sinh\beta b \sin\alpha a + cosh\beta b \cos\alpha a = \cosh(a+b)$$

وللحصول عل حل بسيط فلقد اجري كرونيج وبيني التقريب التالي والموضح في الشكل.




لقد اعتبر كرونيج وبيي أن سمك حاجز الجهد أ صغيرا جدا ويؤول للصفر كما اعتبرا إن ارتفاع حاجز الجهد $V_\circ$ كبيرا جدا ويؤول إلى مالا نهاية. ولكن يبق حاصل الضرب $bV_\circ$ محدود القيمة.

إن هذا التقريب لا يغير من طبيعة الحل النهائي ولكن فقط يسهل إيجاد حل للمشكلة باستخدام العلاقات الرياضية البسيطة كما يأتي:

أ- فإذا كانت $V_\circ \to \infty$ فأن قيمة E تكون صغيرة نسبيا ولذلك يجد أن قيمة $\beta$ تصبح:

$$\beta = \left(\frac{8\pi^2 m}{h^2}\right)^{1/2}$$

تعويض هذه الفرضيات في معادلة الحل النهائي نحصل عل:.

$$\cos ka = \cos \alpha a + P\,\frac{\sin \alpha a}{\alpha a}$$

حيث أن

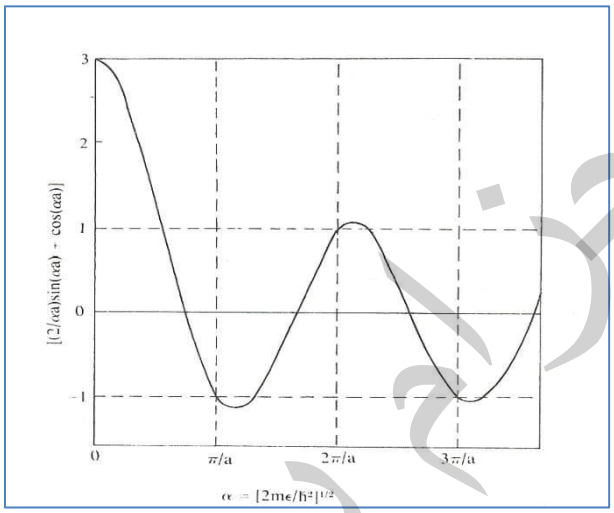
$$p = \frac{4\pi^2 m V_o ab}{h^2}$$

وان

$$\alpha = \left(\frac{8\pi^2 mE}{h^2}\right)^{1/2}$$

ولدراسة المعادلة نرسمها بيانيا، ليكن الطرف الأيسر من المعادلة يقع على المحور Xوالطرف الأيمن يقع عل المحور Y وكما هو مبين في الشكل.

نلاحظ إن الطرف الأيسر من المعادلة coska أخذ قيمة واحدة فقط لكل قيمة ل K أي لكل قيمة طاقة الكترونية E.




كما إن دالة جيب التمام تجعل حدود التغير للطرف الأيسر من المعادلة لا تتعدى ١ ± هي قيم تغير coska مابين أقل قيمة واكبر قيمة.

لذلك فكل قيم $\alpha a$ التي تعطي قيمة للطرف الأيمن من المعادلة اكبر من ١+ أو اقل من ١- تعتبر غير حقيقية.

يمثل المحور السيني $(\alpha a)$ محورا للطاقة الالكترونية وتكون بذلك قيم الطاقة الالكترونية الممثلة بقيم $\alpha a$ التي تعطي قيما للطرف الأيمن من المعادلة داخل الحدود 1± هي فقط القيم المسموح بها لطاقة الإلكترون. إما القيم الأخرى التي تخرج بقيمة الطرف الأيمن من هذه الحزمة فهي كلها **قيم غير حقيقية** أو بمعنى أخر **قيم غير مسموح** بها.

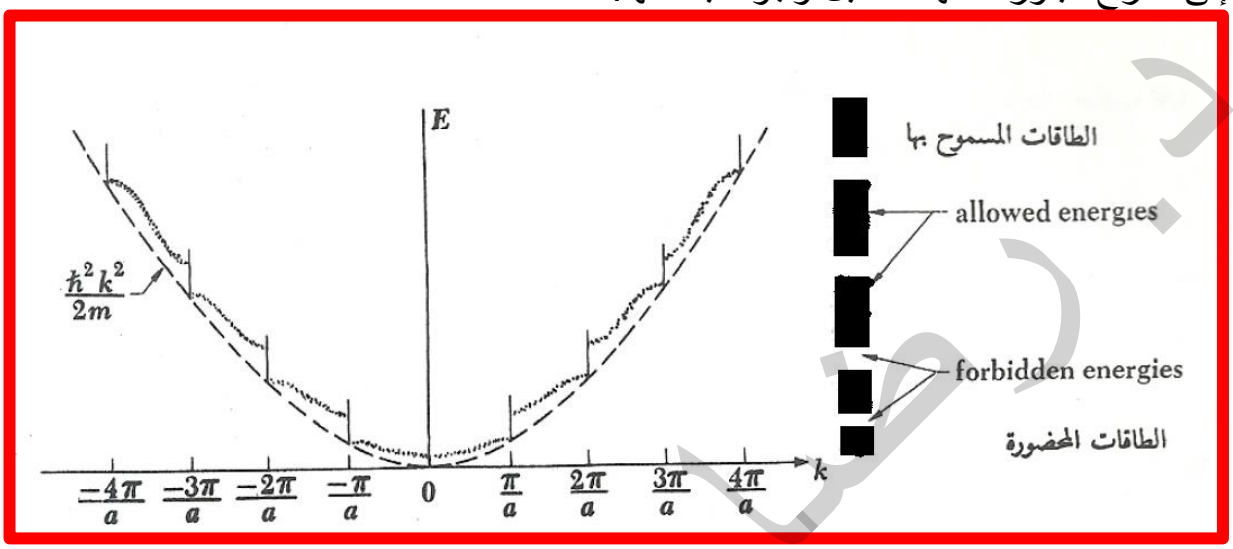
**من هنا يتضح وجود حزم للطاقة مسموح بها وأخرى محظورة.** اي أن الجهد الدوري لذرات الشبيكة قد جعل وجود حزم محضوره من الطاقة الالكترونية لا يمكن لأي إلكترون أن يتواجد بداخلها. ويلاحظ انه كلما ازداد ارتفاع بئر الجهد (أي إن $V_o$b تزداد) نجد إن أتساع هذه الحزمة المحظورة يقل.

إذا رسمت العلاقة بين **طاقة الإلكترون ومقلوب طول الموجة المرافق** نحصل عل الشكل التالي والذي فيه تظهر الحزم المحظورة من الطاقة، يلاحظ من الشكل وجود انقطاع في المنحني كلما كان $k = \frac{\pi n}{a}$ و بما إن $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

فعليه نحصل على

$$n\lambda = 2a$$

إن هذه المعادلة هي نفس معادلة براك التي تعطي انعكاسا قويا للالكترونات الساقطة عموديا عل سطح البلورة. إن هذا يعني انه تبعا لقانون براك فأن أي إلكترون يتحصل داخل البلورة عل طاقة تدخله في المنطقة المحظورة يستطار وdنعكس على المستويات الذرية إلى خارج البلورة لأنها لا تقبل وجوده بداخلها.



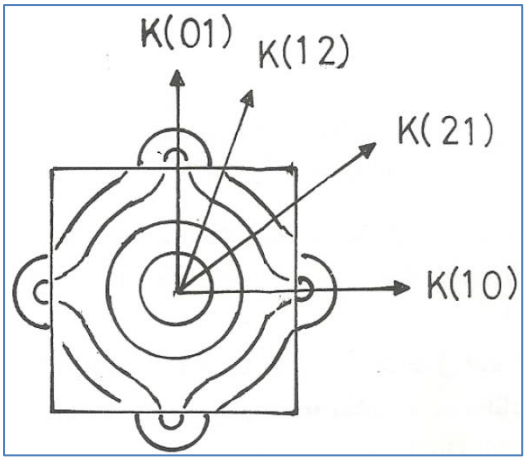

## 9.5 مناطق برليون في نظرية الحزم

سبق أن تكلمنا عن مناطق برليون وقلنا أن نظرية الحزم يمكن تفسيرها معتمدا عل مفهوم الشبكة المقلوبة، أي على الفضاء المقلوب k.space. إن مناطق برليون تعد أصغر حجم في الفضاء المقلوب ويحوي على نقطة شبيكة مقلوبة مركزة في داخله، يحاط الحجم من قبل مجموعة من المستويات تكون عمودية على المسافات التي تربط نقطة الشبيكة المتمركزة مع نقاط الشبيكة المقلوبة المجاورة لها.

## 9.6 سطح فيرمي Fermi surface

إن سطح فيرمي عبارة عن سطح في فضاء متجه الموجة k ذي طاقة ثابتة تساوي $E_f$. يعد سطح فيرمي ذا أهمية في تفسير الكثير من الظواهر الفيزيائية خاصة في فيزياء الحالة الصلبة. *إن شكل ومواصفات سطح فيرمي لفلز ما ذا أهمية كبيرة في تحديد الخواص الالكترونية لذلك الفلز حيث يعزى سريان التيار الكهربائي في الفلز إلى التغيرات الحاصلة في احتمالية الإشغال للحالات الالكترونية قرب سطح فيرمي. يعتمد شكل سطح فيرمي على التفاعل بين الالكترونات والشبيكة ولذلك يحدد شكل سطح فيرمي بواسطة هندسة المنحنيات المقفلة للطاقة Contours Energy في الحزمة حيث يعتبر سطح فيرمي نفسه منحنى مقفل للطاقة.*

دعنا نفرض أن بلورة ذات بعدين وأنها فارغة من الالكترونات وافرض أن البنية البلورية لها منطقة برليون الأول عل شكل مربع. دعنا نبدأ ألان بملء الشبيكة تدريجيا بالالكترونات، إذا وصلنا النقط المختلفة في فضاء متجه الموجة والتي يكون لها نفس الطاقة الالكترونية نحصل عل إشكال دائرية طالما كنا بعيدين عن حدود منطقة برليون. إن حركة الالكترونات في هذه الدوائر تكون غير مقيدة ولكن إذا اقتربنا من حدود المنطقة نجد أن **منحنيات تساوي الطاقة** Contours Energy تنتهي عند هذه الحدود إذ أن قيم K تكون اكبر في الأركان عنها عند الجوانب. مثلا k(21) >k (10) و كما هو مبين في الشكل.




إن الاستمرار في إضافة الكترونات للبلورة تمتلئ أركان منطقة برليون الأولى تماما. وبعد هذه المرحلة لن يدخل أي الكترون في المنطقة الثانية إلا إذا كانت طاقته من الكبر بحيث يستطيع تعدي المنطقة الممنوعة للطاقة بين منطقتي برليون الأولى والثانية.

**الكتلة الفعالة للإلكترون: (الى هنا قبل التطبيق)**

عندما تنتشر الموجة $e^{i(kx+\omega t)}$ في وسط التشتت فان سرعة الموجة تساوي $\frac{\omega}{k}$. بينما سرعة مجموعة الأمواج $V_g = \frac{d\omega}{dk}$ في بعد واحد وتساوي $(\text{grad}_k \omega)$ $(\nabla_k . \omega)$ في ثلاثة ابعاد. أن الإلكترون الواقع تحت تأثير جهد دوري يتعجل بالنسبة للشبيكة عند تسليط مجال كهربائي خارجي عليه ولكن لا يحافظ عل كتلته الاعتيادية (m) في فضاء الحر، بل تتغير إلى ما يسمى **بالكتلة الفعالة** ويرمز لها بالرمز $m^*$. اذن، فعندما يتعرض الإلكترون داخل البلورة إلى قوة خارجية F، فأن مقدار التغير الحاصل في طاقته في زمن dt يساوي

$$\frac{dE}{dt} = -F.V_e$$

حيث أن $V_e$ تمثل سرعة الالكترون:

$$E = \hbar\omega$$
$$\bar{P} = \hbar\,\bar{k}$$

والتي تساوي

$$V_e = \nabla_p . \omega = \frac{1}{\hbar}\nabla_k E$$
$$V_e = \text{grad}_p . \omega = \frac{1}{\hbar}\text{grad}_k E$$

نعوض $V_e$ في المعادلة الأولى نحصل على:

$$\frac{dE}{dt} = -F.\frac{1}{\hbar}\nabla_k E$$

$$\therefore\ dE = \frac{1}{\hbar} F.\nabla_k E dt$$

وبما أن

$$E = \hbar\omega \qquad \frac{dE}{d\bar{k}} = \nabla_k E$$
$$\therefore\ dE = \nabla_k E.d\bar{k}$$

فمن المعادلتين نحصل عل:

$$\frac{1}{\hbar} F.\nabla_k E dt = \nabla_k E.dk$$
$$\frac{1}{\hbar} F.\nabla_k E dt - \nabla_k E.dk = 0$$

$$\nabla_k \mathrm{E}\left[\frac{1}{\hbar}\mathrm{F.dt} - \mathrm{dk}\right] = 0 \qquad \text{أو}$$

ولكن $\nabla_k \mathrm{E} \neq 0$ وذلك لأن قيمة k غير ثابتة لوجود المجال الكهربائي، وعليه فأن

$$\frac{1}{\hbar}\mathrm{F.dt} - \mathrm{dk} = 0 \qquad \therefore\ F = \hbar\,\frac{dk}{dt}$$

وبذلك فإن القوة تمثل معدل تغيير زخم البلورة $(\hbar k)$ crystal momentum.

إن الإلكترون تحت تأثير هذه القوة يتحرك بتعجيل مقداره

$$\vec{a} = \frac{\mathrm{dv_e}}{\mathrm{dt}} = \frac{1}{m}\vec{F} \qquad \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathrm{k}}\ \frac{\mathrm{dE}}{\mathrm{dt}} = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathrm{k}}\bar{\mathrm{F}}.\bar{\mathrm{v}}$$

او

$$\vec{a} = \frac{1}{m^*}\vec{F} = \frac{1}{\hbar^2}\nabla_{\mathrm{k}}[\bar{\mathrm{F}}.\nabla_{\mathrm{k}}\mathrm{E}]$$

إن المعادلة الاخيرة لها صيغة قانون نيوتن الثاني في الحركة بشرط أن نعد المقدار $\left(\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2\mathrm{E}}{\mathrm{dk}^2}\right)^{-1}$ يمثل كتلة.

F=ma $\qquad \frac{1}{m^*} = \frac{a}{F}$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2\mathrm{E}}{\mathrm{dk}^2} = \left[\frac{\left(\frac{d^2\mathrm{E}}{\mathrm{dk}^2}\right)}{\hbar^2}\right]$$

ولذلك يمكن تعريف الكتلة الفعالة $m^*$ بالصيغة التالية

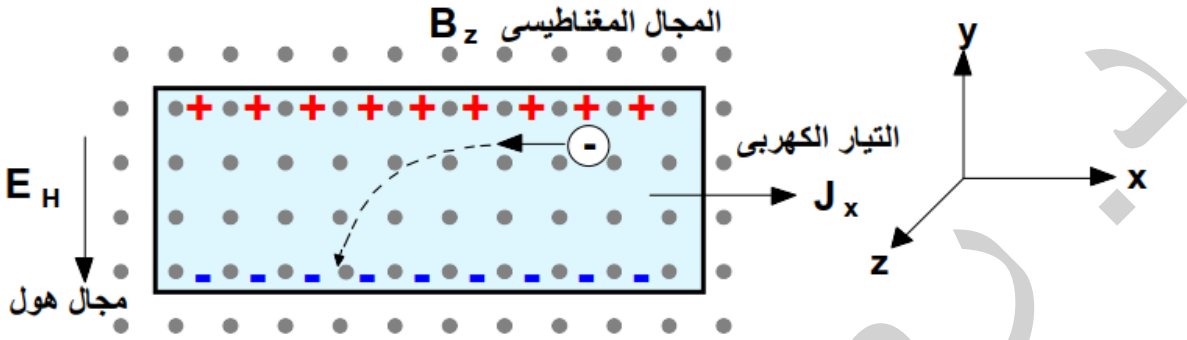
$$\boldsymbol{m^* = \hbar^2 / (d^2E / dk^2)}$$

وهكذا نجد أنه اذا كانت F تمثل القوة الخارجية المؤثرة على إلكترون في مادة صلبة دورية ذي بعد واحد وكان $\bar{a}$ يمثل التعجيل الفعلي لإلكترون ناشي عن كل من القوة الخارجية F وتفاعل الإلكترون وجهد البلورة فأن إلكترون بلوخ يتصرف مثل إلكترون حر (في خارج المادة الصلبة) ذي كتلة فعالة لا تعطي بالعلاقة $F = m^* a$. تختلف $m^*$ عن كتلة الإلكترون الحر (m) من حيث أنها ليست كمية ثابتة وموجبة الإشارة دانما ولكن تكون $m^*$ مساوية m عندما يكون إلكترون بلوخ إلكترونا حرا وتعطى طاقته بالعلاقة:

$$\left(\boldsymbol{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}\right)$$

## تأثير هول Hall's Effect:

عندما يمر تيار كهربائي كثافته $J_x$ في سلك باتجاه محور X تحت تاثير مجال مغناطيسي عمودي على هذا الاتجاه شدته $B_Z$ يتولد مجال كهربائي عمودي على كل من التيار الكهربائي والمجال المغناطيسي اي في اتجاه محور y تعرف هذه الظاهرة بتأثير هول ويمكن توضيحها بالشكل الاتي:




لفهم هذا التأثير نفترض اولا حاله ما قبل تطبيق المجال المغناطيسي في هذه الحاله يتدفق التيار الكهربائي في الاتجاه الموجب لمحور X وهذا يعني ان الكترونات التوصيل تتحرك بسرعه انجراف V في الاتجاه السالب لمحور X. عند تطبيق المجال المغناطيسي فان الالكترونات تقع في نفس الوقت تحت تأثير قوة لورنتز (Lorentz force) مقدارها $\vec{F} = -e(\vec{v} \times \vec{B})$ وتسبب هذه القوه انحناء لحركه الالكترونات في الاتجاه الاسفل كما هو مبين بالشكل أعلاه.

ومع مرور الوقت تتكدس الالكترونات على السطح الاسفل و تتولد نتيجة للاستقطاب شحنات موجبه مساويه على السطح العلوي. يولد تراكم الشحنات السالبة و الموجبة على السطحين السفلي والعلوي مجالا كهربائيا يسمى مجال هول.

لحساب مجال هول افترض ان قوة لورنتز التي تؤدي الى تراكم الشحنات في المكان الاول تكون في الاتجاه السالب لمحور y وتعطي بالعلاقة

$$F_L = ev_xB_z$$

اختفاء الإشارة السالبة ( نتيجة الضرب الاتجاهي) من المعادلة السابقة يعني $F_L$ تكون سالبة وذلك لان $v_x$ تكون في الاتجاه السالب لمحور X كما موضح في الشكل السابق.

ينتج المجال المتكون من الشحنة الموجودة على السطح قوه تعاكس قوه لورنتز تستمر عمليه تراكم الشحنة حتى تساوي قوه هول ($F_H$) تماما مع قوة لورنتز و نحصل على حاله اتزان عند هذه الحالة تكون $F_L=F_H$ وبالتالي نحصل على،

$$-F_H=- e\, v_x\, B_z$$

نقسم على e

$$E_H= v_x\, B_z$$

ويسمى هذا المجال بمجال هول.

احيانا يكون من المفيد التعبير عن هذا المجال بكميات قابله للقياس ولذلك يتم التعبير عن السرعة Vx بدلاله كثافة التيار:

$$J_x = N(-e)v_x$$

وهذا يؤدي الى ان المجال:

$$E_H = \frac{-1}{Ne} J_x B_z$$

يتضح من المعادلة السابقة ان مجال هول يتناسب طرديا مع كل من كثافه التيار و شده المجال المغناطيسي و يعرف ثابت التناسب $\left(\frac{E_H}{J_x B_z}\right)$ هذا بثابت هول ويرمز له عادة بالرمز $R_H$. وهكذا يكون ثابت هول على الصورة:

$$R_H = -\frac{1}{N\, e}$$

تعتبر النتيجة السابقة مهمه جدا من الناحية العلمية. وبما ان ثابت هول يتناسب عكسيا مع كثافه الالكترونات(N) فان هذا يعني اننا يمكننا تعيينN بواسطة قياس جهد هول عمليا وتعتبر هذه الطريقة هي الطريقة القياسي لتعيين تركيز الالكترونات في المادة. ومن الناحية العملية فان هذه التقنيه ذات اهميه عملية لأنه بخلاف N، فان الكميه الاخرى التي يعتمد عليها ثابت هول هي شحنه الالكترون (e-) وهي ثابت فيزيائي اساسي وقيمته معروفه بدقة.

من السمات الاخرى المفيدة لثابت هول والتي تعطي معلومات اضافية عن المادة هي ان اشاره الثابت تحدد نوع حاملات التيار حيث تدل الإشارة السالبة على حاملات التيار هي الالكترونات ( كما في الفلزات) بينما

تدل الإشارة الموجبة على ان حاملات التيار هي الفجوات الموجبة (كما في اشباه المواصلات) حيث يمكن كتابه معامل ها للفجوات التي تركيزها P كمايلي:

$$R_H = \frac{1}{P\,e}$$

| المعدن | ثابت هول | المعدن | ثابت هول |
|---|---|---|---|
| Na | $-2.50$ | Au | $-0.72$ |
| Li | $-1.7\times10^{-10}$ | Cd | $+0.60$ |
| Cu | $-0.55$ | Zn | $+0.30$ |
| Ag | $-0.84$ | Al | $-0.30$ |

$R_e = -\frac{1}{n_e e}$ $n_e$ = تركيز الالكترونات

والأشارة السالبة نتيجة الشحنة السالبة للالكترون

$R_h = \frac{1}{n_h e}$ $n_h$ = تركيز الفجوات

في هذه الحالة مقدار موجب بسبب شحنة الفجوة الموجبة
في المعادن لا توجد الفجوات فقط ولكن دائما توجد بعض الالكترونات، وبالتالي عندما تتداخل حزمتين معا فإن الالكترون توجد في الحزمة العليا بينما توجد الفجوات في السفلى. في هذه الحالة، يمكن كتابة ثابت هول لكل من الالكترونات والفجوات على الصورة،

$$R = -\frac{R_e\sigma_e^2 + R_h\sigma_h^2}{(R_e + R_h)^2}$$

حيث $\sigma_e$ و $\sigma_h$ هي التوصيلية الكهربائية للإلكترونات والفجوات على الترتيب

$$\sigma_e = \frac{n_e e^2 \tau_m}{m} \qquad \sigma_h = \frac{n_h e^2 \tau_m}{m}$$

أن إشارة ثابت هول تكون سالبة أو موجبة طبقا للمشاركة السائدة من الالكترونات أم من الفجوات.
وبفرض أن $n_e = n_h$ كما في حالة المعادن فان $R_e=R_h$ .

## المعادن، العوازل، اشباه الموصلات:

بصورة عامة **يعتمد تحديد خواص المادة الصلبة** ذات تركيب معين اهو موصل ام شبه موصل ام عازل **على معرفة عدد الالكترونات الحرة لكل خلية أولية.** اذ من هذا العدد يمكن الاستدلال على نطاق الطاقة اهو مملوء تماماً ام فارغ تماماً ام مملوء جزئياً. وعلى هذا الأساس يمكن تحديد هوية المواد الصلبة في الطبيعة كالاتي:

**اولاً: يكون الصلب موصل دائماً** عندما يمتلك الكتروناً حراً واحداً لكل خلية أولية مثل المعادن الأحادية التكافؤ **كالمعادن القلوية مثل Li, Na, K, Cs, Rb والمعادن الكريمة مثل Ag, Au, Cu** ففي حالة النحاس يكون نصف نطاق التكافؤ (النطاق 4s ) مملوءاً لان كل خلية أولية في تركيبه fcc تُسهم بالكترون واحد فقط. أي ان كل صلب من المعادن القلوية والكريمة يمتلك نطاق تكافؤ نصف مملوء ( او منطقة برليون نصف مملوءة).

**ثانياً: يكون الصلب دائما موصلاً** عندما يمتلك عدداً فردياً من الالكترونات الحرة لكل خلية أولية. ففي كل من Al, Ga, In, Tl توجد ثلاث الكترونات حرة في كل ذرة تستطيع ان تملئ تماماً نطاقاً واحداً فضلا عن ملئها للنطاق التالي الى حد النصف لذلك تُعد عناصر موصلة.

اما **العناصر Bi, Sb, As** التي تتبلور بتركيب ذي ذرتين لكل خلية أولية وان كل ذرة تمتلك خمسة الكترونات حرة **فلا تُعد معادن بل شبه معادن** لان العشرة الالكترونات التي تضمها الخلية الأولية تملا خمسة انطقة ولكن النطاق الخامس يكون في الغالب غير مملوء تماما.

**ثالثاً: ان امتلاك صلب لعدد زوجي من الالكترونات الحرة لكل خلية أولية لا يعني انه مادة عازلة بل قد تكون مادة موصلة.** ويتوقف ذلك على كون الانطقة متفاوتة او متراكبة. فمثلاً فلزات او معادن الاتربة القلوية كالعناصر Ca, Sr, Ba, Ra الثنائية التكافؤ يمتلك كل منها الكترون لكل خلية أولية لذلك يجب ان يكون كل منها مادة عازلة وبسبب تراكب الانطقة تتصرف هذه العناصر كانها معادن ولكنها ليست معادن جيدة جداً.

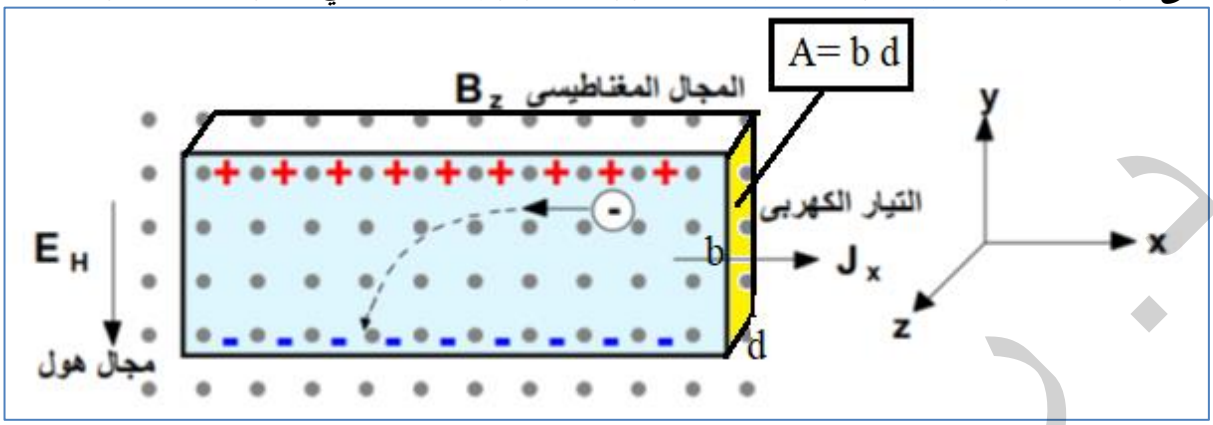
**رابعاً: تكون العناصر الرباعية التكافؤ موصلات او شبه موصلات او عوازل.** فمثلا يتبلور كل من الماس والسيليكون والجرمانيوم بتركيب ذي ذرتين لكل خلية أولية وكل ذرة تمتلك أربعة الكترونات تكافؤ أي تضم الخلية الأولية ثمانية الكترونات تكافؤ. ويكون الماس النقي والسيليكون والجرمانيوم مادة عازلة عند 0K . بينما يُعد السيليكون والجرمانيوم مادة شبه موصلة عند درجة حرارة الغرفة. كما ان الماس ينتقل للحالة المعدنية تحت ضغط عالي حوالي 1.5 ميكابار. اما عنصر القصدير Sn فيكون موصل في طور وشبه موصل في طور اخر حيث ان التركيب البلوري يغير شكل منطقة برليون الأولى ومن ثم تغير فسحة الطاقة.

**خامساً: اما العناصر الانتقالية او التحويلية** ومنها عناصر زمرة الحديد مثل Ni, Co, Fe, Mn, Cr فتتميز بقشرتها الداخلية 3d الناقصة (غير المملوءة تماماً) ففي ذرة الحديد حيث تتوزع الالكترونات كالاتي: Fe: $[1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^6]\ 4s^2$

تكون ستة حالات الكترونية مشغولة فقط من اصل عشر حالات ممكنة للقشرة 3d على الرغم من قيام الكترونين أخريين باشغال القشرة الخارجية 4s . ولذلك يعاني النطاق d تقاطعا وتهجينا مع النطاق s وان أي منها لا يكون مملوءاً تماما ولذلك تعد عناصر زمرة الحديد في حالتها الصلبة موصلات. وبصورة عامة تتراكب الانطقة 4s, 4p, 3d في زمرة الحديد حيث يكون عدد الالكترونات المتوفرة غير كاف لملء هذه الانطقة.

اما في معادن الاتربة النادرة مثل Ce, Pr, Nd, Sm, Eu فتكون قشرتها الداخلية 4f مملوءة جزئياً ولذلك يمكن ان يحدث تراكب يشمل الانطقة 6p, 6s, 5d, 4f وبموجب ذلك تعد الاتربة النادرة في حالتها الصلبة موصلات مثل بلورات زمرة الحديد.

**مثال(تاثير هول): شريط من النحاس عرضه b=1 cm وسمكه d=0.1 cm يمر خلاله تيار كهربائي شدته 20 Amp كما في الشكل. عند تسليط مجال مغناطيسي منتظم كثافة فيضه 1.2 Tesla بصورة عمودية على سطحه ظهر فرق جهد مقداره 18 $\mu v$ بين نقطتين متقابلتين واقعتين على عرض الشريط. جد سرعة انسياب الالكترونات؟ واوجد عددها في المتر المكعب الواحد؟**




$$E_H = E_y = v_x B_z = \frac{V}{b}$$

$$v_x * (1.2) = \frac{18*10^{-6}}{1*10^{-2}}$$

$$v_x = \frac{18*10^{-4}}{(1.2)} = 1.5 * 10^{-3}\ m/s$$ = **سرعة انسياب الالكترونات**

$$J_x = \frac{I}{A} = \frac{20}{1 * 10^{-2} * 0.1 * 10^{-2}} = 20 * 10^5\ A$$

$$E_H = \frac{-1}{Ne} J_x B_z$$

$$\frac{E_H}{J_x B_z} = \frac{1}{Ne}$$

$$E_H = \frac{V}{b} = \frac{18 * 10^{-6}}{1 * 10^{-2}} = 18 * 10^{-4}\ \frac{V}{m}$$

$$\frac{18 * 10^{-4}}{20 * 10^5 * 1.2} = \frac{1}{N * 1.6 * 10^{-19}}$$

$$N = \frac{20 * 10^5 * 1.2}{18 * 10^{-4} * 1.6 * 10^{-19}}$$

$$N = 8.3 * 10^{27} = 0.83 * 10^{28}\ \text{electron/m}^3$$

وتساوي عدد الالكترونات في المتر المكعب الواحد