

نظرية الانطقة للمواد الصلبة

المقدمة

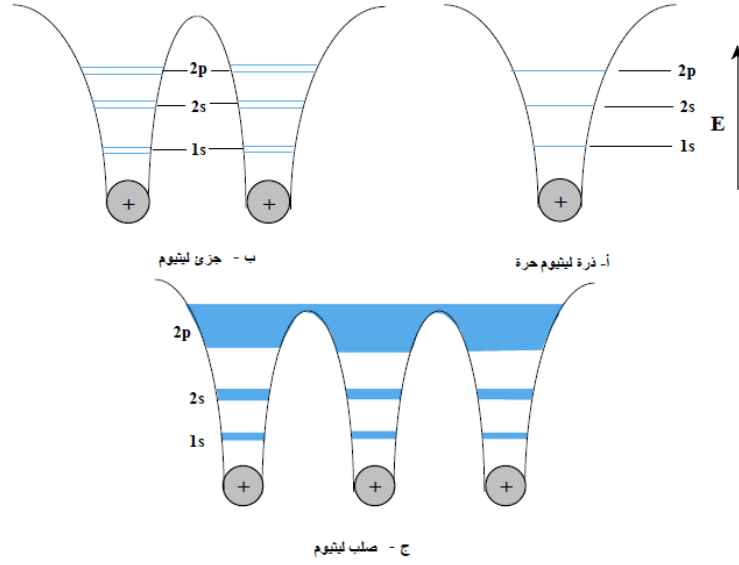
رأينا مدى النجاح الذي حققه نموذج الإلكترون الحر في تفسير العديد من الخصائص الطبيعية للمواد الصلبة مثل التوصيل الكهربائي والتوصيل الحراري وبعض الخصائص الأخرى وبالرغم من ذلك لم يتمكن هذا النموذج من تفسير الفروق في الخصائص الكهربائية بين المعادن والمواد العازلة وأشباه الموصلات . بالإضافة إلى هذا لم يتمكن نموذج الإلكترون الحر من تفسير ظهور قيم موجبة لمعامل هول والعلاقة بين الكثرونات التوصيل في الفلز والكثرونات التكافؤ في الذرات الحرة إلى آخره . أيضا ، تكلمنا عن حركة الإلكترون في الصلب مستخدمين نموذج الإلكترون الحر والذي يعتبر نموذج مبسط جدا نظرا لإهمال جهد البلورة . ولكن لا يمكن غض النظر عن هذا الجهد عند شرح النتائج العملية بطريقة كمية أو عند الحديث عن بعض الخصائص الإلكترونية للصلب . لذلك باتت الحاجة ملحة إلى نموذج جديد أو نظرية جديدة تأخذ تأثير جهد البلورة في الاعتبار فكانت نظرية حزم الطاقة للمواد الصلبة . سنرى أن طيف الطاقة الإلكتروني في البلورة يتكون من حزم متصلة (شرائط أو انطقة) على خلاف حالة الذرة والتي فيها يكون على هيئة مجموعة من مستويات طاقة محددة . كما سنناقش الخصائص والدوال الموجية المقابلة لهذه الحزم حتى يمكننا بواسطة نظرية حزم الطاقة تصنيف المواد الصلبة إلى موصلات وأشباه موصلات ومواد عازلة . هذا بالإضافة إلى امكانية شرح خصائص هذه المواد استناداً إلى معرفة تركيب حزم الطاقة الذي يعين اوضاع حزم الطاقة المختلفة لكل عنصر أو مركب .

منشأ حزم الطاقة (اصل فجوة الطاقة)

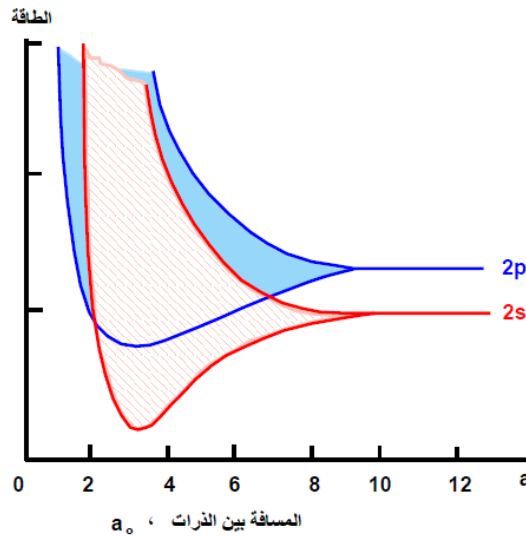
لفهم منشأ حزم الطاقة في المواد الصلبة نجد أنه من المفيد أن نستعرض طيف الطاقة للإلكترون في الذرة الحرة وسنرى كيف أن هذا الطيف يتعدل بالتدريج عند اضافة الذرات بعضها إلى بعض لتكون جسم صلب . لبيان ذلك ، سنعتبر الليثيوم كمثالا محددا . في ذرة الليثيوم الحرة يدور الإلكترون في بئر جهد ، كما هو مبين بالشكل (1 - أ) عند حل معادلة شرودينجر نحصل على سلسلة من مستويات الطاقة المتفردة يرمز لها $1s$ ، $2s$ ، $2p$ ، ... حيث تحتوي ذرة الليثيوم على 3 الكثرونات اثنين منهم يشغلا الغلاف $1s$ (وبذلك يعتبر ممتلئ تماما) ويشغل الإلكترون الثالث الغلاف الفرعي $2s$. والآن نعتبر حالة ذرتي ليثيوم يكونان جزيئة ليثيوم ، Li_2 وفي هذه الحالة فإن الجهد الذي يرى بواسطة الإلكترون يكون عبارة عن بئر جهد مزدوج ، كما يبين الشكل (1 - ب) نلاحظ ان طيف الطاقة الجديد يتكون من مجموعة من الثنائيات ، حيث أن كل مستوى ذري من المستويات $1s$ ، $2s$ ، $2p$ قد إنشطر إلى مستويين متقاربين . والآن يمكننا الحديث عن مستويات $1s$ ، $2s$ ، $2p$ في الجزيئة بنفس الطريقة ولكن آخذين في الاعتبار أن كل مستوي من هذه المستويات يتكون من مستويين فرعيين .

يعتمد مقدار الانشطار بقوة على مسافة التفاعل بين نويات الذرات في الجزيئة ، حيث يكون الانشطار أكبر كلما اقتربت المسافة بين النويات والعكس صحيح . كما يعتمد الانشطار أيضا على نوع المدار الذري ، حيث يكون الانشقاق في المستوي $2p$ أكبر منه في حالة المستوي $2s$ والذي بدوره يكون أكبر منه في حالة المستوي $1s$. والسبب في ذلك أن نصف قطر المدار $1s$ يكون صغيراً جداً ويكون المدار مرتبط بإحكام بنواة الذرة التابع لها وبذلك لا يتأثر بشكل كبير بالاضطراب الناتج عن وجود نواة قريبة . ولكن تكون المدارات $2s$ ، $2p$ على غير ذلك حيث أن لهما انصاف أقطار أكبر ويكونا مرتبطين بالنواة ربطا ضعيفا وبالتالي يكون الانشقاق الناتج فيهما كبير . ويمكن تعميم المفاهيم السابقة لتشمل جزيئة الليثيوم المتعدد الذرات والذي يحتوي على أى عدد اختيار من الذرات . وبناء على ذلك فإن الجزيئة الذي يتكون من 3 ذرات فإن كل مستوي ينشق إلى ثلاثة وفي الجزيئة التي تتكون من 4 ذرات ينشق مستوي

الطاقة إلى أربعة وهكذا . وبالتالي يمكن النظر إلى الليثيوم الصلب كما لو كانت جزيئة ليثيوم ضخمة تحتوي على عدد كبير جدا من الذرات . ولمعرفة شكل طيف الطاقة في الحالة الصلبة نتخيل أن كل مستوى طاقة في الذرة انشق إلى عدد N من المدارات الفرعية المتقاربة ، حيث N هو عدد الذرات في الصلب . وحيث أن N عدد كبير جداً ($\sim 10^{23}$) ، فإن المستويات الفرعية المنبثقة تكون متناهية القرب من بعضها البعض لدرجة الاندماج وتكوين حزمة من الطاقة (شريط أو نطاق طاقة energy band) . وهكذا فإن المستويات $1s$ ، $2s$ ، $2p$ ، ... تؤول إلى الحزم $1s$ ، $2s$ ، $2p$ ، ... على وجه الترتيب ، كما هو موضح بالشكل (1 - ج) .



الشكل (1) مخطط يبين تحول شكل طيف الطاقة من ذرة إلى جزيئة الليثيوم ثم إلى المادة الصلبة



الشكل (2) مخطط حزم الطاقة في بلورة الليثيوم .

ليبيان مدى تقارب المستويات الفرعية المتكونة نفترض أن عرض الحزمة 4.5eV وعلى ذلك تكون فترة الطاقة بين مستويين فرعيين متجاورين في حدود $4.5 \times 10^{-23}\text{eV}$. وحيث أن هذه القيمة متناهية

الصغر لذا لا يمكن تمييز المستويات الفرعية المنفصلة وبالتالي يمكن اعتبار أن المستويات تنتشر على شكل حزمة متصلة من الطاقة . مما سبق يمكن استخلاص أن طيف الطاقة في الحالة الصلبة يتكون من مجموعة من حزم الطاقة بفصل فيما بينها ما يسمى بفجوات طاقة (energy gaps) . فجوات الطاقة هذه هي مناطق (حزم) طاقة ممنوعة ، أى لا يمكن أن تشغل بالالكترونات ، تماما مثل المناطق التي تفصل بين مستويات الطاقة المنفردة في الذرة الحرة والتي تعتبر مناطق محرمة على الالكترونات . يعتبر اتساع مستويات الطاقة المنفردة (نتيجة الانشقاق) لتعطي حزم طاقة من اهم الخصائص الاساسية للجسم الصلب . يتغير اتساع الحزمة من حزمة إلى أخرى وبشكل عام يمكن القول أن حزمة الطاقة الأعلى تكون أكبر اتساعا وذلك مرجعه أن مستوى الطاقة الأعلى (الذي كون هذه الحزمة) يكون ذو نصف قطر أكبر وبالتالي يتأثر (يضطرب) بقوة . على النقيض ، فإن مستويات الطاقة السفلى المقابلة لمدارات تكون مرتبطة بقوة ، الأمر الذي يجعلها تتأثر بشكل أقل . يبين الشكل (2) حزم الطاقة $2p$ ، $2s$ لفلز الليثيوم مرسومة كدالة لثابت الشبيكة a .

نلاحظ من الرسم أن اتساع الحزمة يزداد مع تناقص a ، كما هو متوقع ، حيث أن المسافة الأصغر بين الذرات تؤدي إلى اضطراب أكبر . كما نلاحظ أيضا أنه عند $a < 6a_0$ ، حيث a_0 هو نصف قطر بوهـر ، فإن الحزم $2p$ ، $2s$ تتسع لدرجة التداخل وبالتالي تتلاشى فجوة الطاقة بينهما .

نظرية بلوخ لحزم الطاقة (دالة بلوخ)

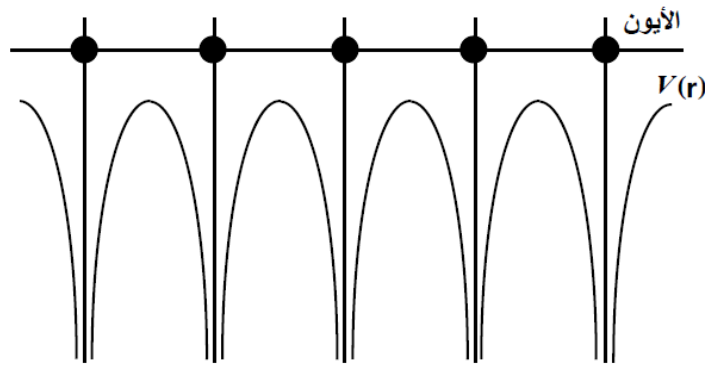
افترض العالم بلوخ أن الالكترونات تتحرك في المواد المتبلورة تحت تأثير بئر جهد دورى ناتج عن تفاعل الالكترون مع كل الذرات الموجودة في الصلب وتفاعل الالكترون مع باقى الالكترونات الأخرى . لذلك يمكن تعيين سلوك الالكترون في البلورة من دراسة معادلة شرودينغر على الصورة الآتية :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r) = E\psi(r) \quad (1)$$

حيث $V(r)$ هو جهد البلورة الذي يُرى بواسطة الالكترون و $\psi(r)$ هي دالة الحالة و E طاقة الالكترون . إن $V(r)$ هو بئر جهد دورى يتضمن تفاعل الالكترون مع كل الذرات الموجودة في الصلب بالإضافة إلى تفاعله مع باقى الالكترونات الأخرى . للجهد نفس التماثل الانتقالي للبلورة ، أى أن :

$$V(r) = V(r + R) \quad (2)$$

حيث R هو متجه الشبيكة الانتقالي . يبين الشكل (3) مخطط توضيحي لشكل هذا الجهد .



الشكل (3) مخطط لجهد البلورة كما يُرى بواسطة الالكترون

يكون حل المعادلة (1) طبقا لنظرية بلوخ للجهد الدوري $V(r)$ على الصورة الآتية :

$$\psi(r) = e^{ik.r} u_k(r) \quad (3)$$

حيث يكون للدالة $u_k(r)$ نفس الثمائل الانتقالي للشبيكة وبالتالي فإن :

$$u_k(r) = u_k(r + R) \quad (4)$$

المتجه k هو كمية يرتبط بزخم (كمية حركة) الجسيم ، كما سنرى فيما بعد .

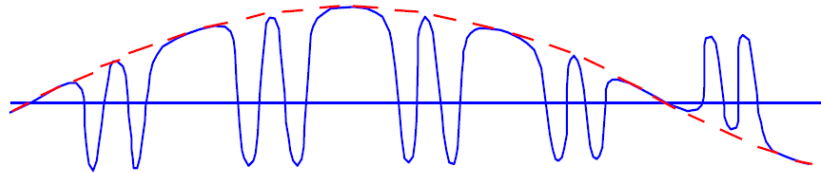
وفيما يلي نقدم برهان لنظرية بلوخ بالشكل الذي يظهر المفاهيم الفيزيائية . يمكن كتابة حل المعادلة (1) بالشكل :

$$\psi(r) = f(r)u(r)$$

حيث $u(r)$ دالة دورية كما هي مبينة بالشكل (4) والذي فيه يمكن تعيين الدالة $f(r)$. وحيث أن الجهد $V(r)$ هو جهد دوري فإن ذلك يتطلب أن تكون جميع الكميات الملحوظة المصاحبة للإلكترون دورية أيضا . على وجه الخصوص ، فإن الكمية $|\psi(r)|^2$ ، والتي تعطي احتمالية الإلكترون ، يجب أن تكون كمية دورية أيضا وهذا يفرض الشرط الآتي على الدالة $f(r)$:

$$|f(r)|^2 = |f(r + R)|^2$$

والدالة الوحيدة التي تحقق هذا المطلب لكل قيم R هو أحد الصور الأسية $e^{ik.r}$ وهذا يبين أن حل معادلة شرودينجر يكون على صورة بلوخ (المعادلة 3) كما قررنا الإثبات . تعرف دالة الحالة على شكل المعادلة (3) بدالة بلوخ وهي دالة لها العديد من الخصائص :



الشكل (4) دالة بلوخ . يمثل الخط المتقطع الموجة $e^{ik.r}$ التي تم تعديلها بواسطة $u_k(r)$ كدالة ذرية .

أولا : لهذه الدالة شكل موجة مستوية متحركة ، كما هو ممثل بالعامل $e^{ik.r}$ ، مما يعنى أن الإلكترون ينتشر خلال البلورة مثل الجسيم الحر . يكون تأثير الدالة $u_k(r)$ هو تعديل هذه الموجة لكي تتذبذب السعة بشكل دوري من خلية إلى أخرى ، كما هو مبين بالشكل (4) ومع ذلك فإن السلوك الأساسي لدالة الحالة لا يتأثر ، كما هو الحال في الموجة المتحركة .

إذا كان الإلكترون حرا تماما حقا فإن دالة الحالة ψ_k سوف تعطى بالمقدار $(1/V^{1/2})e^{ik.r}$ مما يعنى أن الدالة $u_k(r)$ ثابت ، ولكن في الحقيقة الإلكترون غير حر نظرا لتفاعله مع الشبيكة وهذا التفاعل يحدد الطابع الخاص للدالة الدورية u_k .

ثانيا : نظرا لأن الإلكترون يتصرف كموجة لها المتجه k فإن له طول موجة دى برولى $\lambda = 2\pi/k$ وبالتالي زخم ، طبقا لمعادلة دى برولى ، يعطى بالشكل :

$$p = \hbar k \quad (5)$$

يطلق على هذا المتجه زخم البلورة للإلكترون (كمية حركة الإلكترون) .

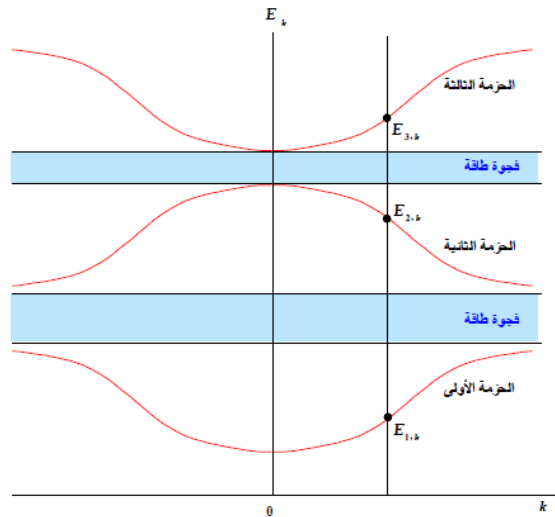
ثالثا : تمثل دالة بلوخ ψ_k مدار بلوري وتكون دالة غير متمركزة (delocalized) خلال الصلب كله وغير متمركزة حول أي ذرة معينة . وهكذا يكون الإلكترون مشارك بواسطة البلورة ككل . وهذا يتفق مع البند أولا الذي وصفنا فيه أن الإلكترون يسلك مسلك الموجة المتحركة .

الآن، نعيد كتابة معادلة شرودينغر بدلالة الطاقة وذلك بالتعويض في المعادلة (1) عن الدالة ψ_k بدالة بلوخ (المعادلة 3) وحذف العامل $e^{ik.r}$ وبعد إجراء العمليات اللازمة نحصل على :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla + ik)^2 + V(r) \right] u_k(r) = E_k u_k(r) \quad (6)$$

وهذه المعادلة في الحقيقة تمثل معادلة الموجة للدالة الدورية $u_k(r)$. وبحل هذه المعادلة نحصل على القيم الذاتية للطاقة . لاحظ أن المؤثر داخل الأقواس المربعة يكون دالة صريحة في k وبالتالي فإن كلا الدالتين الذاتيتين والقيم الذاتية تعتمد على k . لا تؤدي معادلة القيمة الذاتية إلى حل واحد ولكن تؤدي إلى حلول عديدة ، حيث يوجد لكل قيمة من قيم k العديد من الحلول التي تمثل مجموعة من الطاقات المنفردة $E_{1,k}$ ، $E_{2,k}$ ، ، كما يبين الشكل (5) . وحيث أن هذه الطاقات تعتمد على k فإنها تتغير بشكل متواصل عند تغير k على مدى قيمها . وينتج عن كل مستوى طاقة حزمة طاقة ، كما هو مبين بالشكل . سنشير من الآن فصاعداً إلى القيمة الذاتية للطاقة بالرمز $E_n(k)$ ، حيث يشير الدليل n إلى رقم الحزمة .

لاحظ أن عدد حزم الطاقة يكون كبير (عادة ما لانهاية) ولكن نجد أن الحزم السفلية فقط تكون مشغولة بالإلكترونات وتغطي كل حزمة مدى معين من الطاقة يمتد من أقل قيمة تأخذها إلى أعلى قيمة عند رسمها في فضاء k . تكون الفترات المحصورة بين الحزم فجوات الطاقة وهي مناطق طاقة ممنوع شغلها بالإلكترونات . لاحظ أيضاً أن أهمية رسم طيف الطاقة في فضاء k تكمن في أنه يمكن تصنيف حالات الإلكترون خلال الحزمة طبقاً للزخم الذي يكون دالة في k .



الشكل (5) حزم وفجوات الطاقة .

الآن ، نتحول بالدراسة إلى الجهد البلوري $V(r)$ وتأثيره على الإلكترون . يتكون هذا الجهد من جزئين : الأول ، هو تفاعل الإلكترون مع القلوب الأيونية المكونة للشبيكة والجزء الثاني هو تفاعله مع الإلكترونات الأخرى التي تتحرك خلال الشبيكة . فعلى سبيل المثال ، في معدن الصوديوم يتفاعل الإلكترون

الموجود في الحزمة $3s$ مع ايونات الصوديوم (Na^+) المكونة للتركيب المكعبى المتمركز الجسم ويتفاعل أيضا مع الالكترونات الأخرى في هذه الحزمة ، وبالتالي يمكن كتابة الجهد $V(r)$ على هيئة مجموع جهدين كما يلي :

$$V(r) = V_i(r) + V_e(r) \quad (7)$$

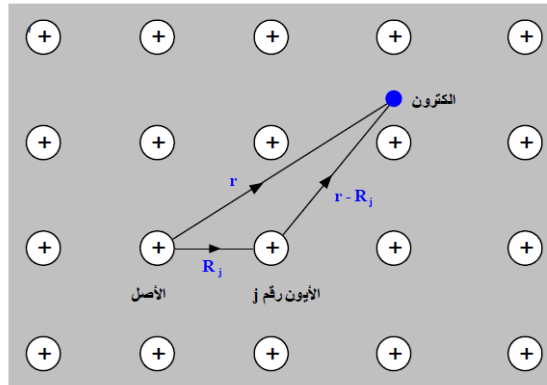
حيث يمثل الحد الاول تفاعل الالكترون مع القلوب الأيونية ويمثل الحد الثانى التفاعل مع الالكترونات . يمكن كتابة الحد الأيونى على الصورة :

$$V_i(r) = \sum_j v_i(r - R_j) \quad (8)$$

حيث أن $v_i(r - R_j)$ هو جهد الايون الموضوع عند متجة الشبكة R_j ، كما هو مبين بالشكل (6) والمجموع على كل الايونات . من الواضح أن للجهد $V_i(r)$ نفس دورية الشبكة .

يسمى الجهد $V_e(r)$ بتفاعل الالكترونون - الالكترونون ويسبب العديد من العقبات ويجعل المعالجة النظرية صعبة جدا . أولا ، يمكننا حساب هذا الحد فقط إذا علمنا كل حالات الالكترونات الأخرى مع العلم أن هذه الحالات غير معلومة بشكل جلي . ثانيا ، لا يكون الجهد عندما $V_e(r)$ على شكل دوري تماما وذلك لأن الالكترونات لا تكون في حركة ثابتة في الشبكة . ثالثا ، في المعالجة الصحيحة يجب بشكل فعلى إعتبار

ديناميكية كل الالكترونات في نفس الوقت وليس الكترون واحد في زمن معين ، وهذا أمر صعب اعتباره في الوقت الحالي . في ضوء هذه الصعوبات ، ومن حسن الحظ أن تفاعل الالكترونون - الالكترونات هو تفاعل ضعيف للأسباب إلى ذلك نراها في الباب السابق . التأثير السائد لهذا التفاعل هو أن الالكترونات تنشر نفسها حول الايونات بالشكل الذي يحجب هذه الايونات عن الالكترونات الأخرى في المقام الأول ولهذا تأثير اضافى لجعل تفاعل الالكترونون - ايون تفاعلا ضعيفا حتى على المدى الطويل وهذا يجعلنا محظوظين مرة أخرى .



الشكل (6) تفاعل الالكترون مع القلوب الأيونية .

والآن ، يمكننا كتابة تعبير مقرب للجهد على النحو التالي :

$$V(r) = \sum_j v_s(r - R_j) \quad (9)$$

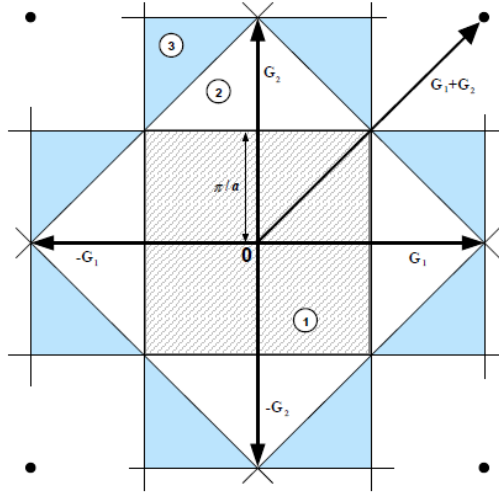
حيث $v_s(r - R_j)$ هو جهد الأيون المحجوب المتمركز عند نقطة الشبكة R_j . ونظرا لأن هذا الجهد يكون دوري فإنه يحقق متطلبات نظرية بلوخ.

خصائص تماثل حزم الطاقة في فضاء متجه الموجة

عند رسم حزم الطاقة في فضاء متجه الموجة (k - space) يظهر العديد من خصائص التماثل المفيدة لقيم الطاقة الذاتية $E_n(k)$. وقبل الخوض في هذا الموضوع دعنا نذكر بعض المعلومات المفيدة عن مناطق بريليون (Brillouin zones).

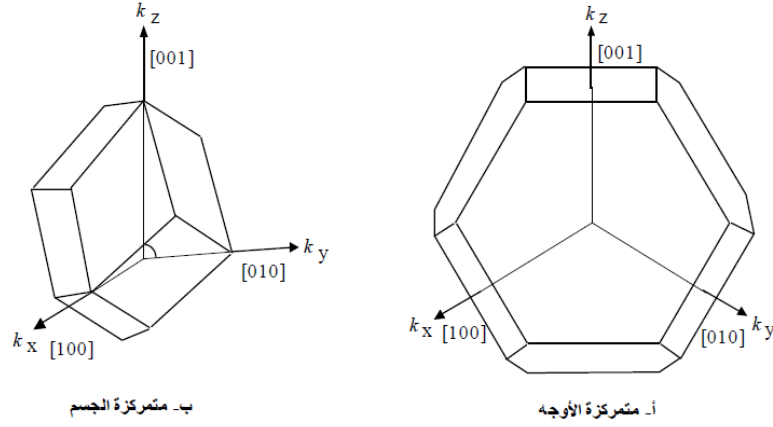
مناطق بريليون (Brillouin zones)

عند رسم المستويات العمودية المنصفة لمتجهات الشبكة المقلوبة التي تصل الذرة مع الجاورة فإن المناطق المحصورة بين المستويات تكون مناطق بريليون. فعلى سبيل المثال نعتبر شبكة مربعة كالمبينة بالشكل (7)



الشكل (7) مخطط يبين مناطق بريليون الثلاثة الاولى في شبكة مربعة .

لاحظ أن الشبكة المقلوبة للشبكة المذكورة تكون مربعة أيضا ولها طول ضلع يساوي $2\pi/a$. يبين الشكل أن المتجهات المقلوبة للشبكة هي $G_1, -G_1, G_2, -G_2, \dots$ الخ. تكون أصغر منطقة مغلقة متمركزة حول نقطة الاصل هي منطقة بريليون الأولى، كما هو موضح بالشكل (المنطقة المخططة). يبين الشكل أيضا كل من منطقة بريليون الثانية (الأربع أنصاف المربعات الغير مظلة) ومنطقة بريليون الثالثة (الثماني أنصاف المربعات الملونة) لاحظ أن جميع مناطق بريليون متساوية في المساحة $(2\pi/a)^2$ وإن أصبحت أكثر تعقيدا. تتحقق خاصية تساوى المساحة لمناطق بريليون لجميع الشبكات المستوية وليس للشبكات المربعة فقط. في الأبعاد الثلاثة تكون المناطق عبارة عن حجوم ثلاثية الأبعاد. يبين الشكل (8) منطقة بريليون الاولى لشبكة مكعبة متمركزة الوجه واخرى متمركزة الجسم. المناطق الأعلى في هذه الشبكات تكون أكثر تعقيدا ويصعب إظهارها. لاحقا سنناقش العلاقة بين مناطق بريليون وتركيب حزم الطاقة.



الشكل (8) منطقة بريليون الاولى فى الشبيكة المكعبة متمركزة الأوجه والمتمركزة الجسم

خصائص التماثل

يمكننا أن نرى أن كل حزمة من حزم الطاقة $E_n(k)$ تحقق خصائص التماثل الآتية :

(أ)

$$E_n(k + G) = E_n(k) \quad (10)$$

وتبين هذه الخاصية أن الدالة $E_n(k)$ تكون دالة دورية ولها زمن الدورة يساوي متجه الشبيكة الانقلابية،

(ب)

$$E_n(-k) = E_n(k) \quad (11)$$

وهذه المعادلة تمثل خاصية التماثل الانعكاسى وتبين أن حزمة الطاقة تكون متماثلة بالنسبة إلى الانعكاس حول نقطة الأصل ($k = 0$) .

تعتبر خصائص التماثل من الخصائص المهمة لأنه يمكن استخدامها لإختزال المجهود المبذول لحساب حزم الطاقة . فعلى سبيل المثال ، بواسطة التماثل الانعكاسى نحتاج فقط معرفة الطاقة في نصف المنطقة الأولى . هذا بالإضافة إلى أن التماثل الدوراني عادة يمكننا من إختزال هذا المجهود أيضا ، فمثلا ، في حالة الشبيكة المربعة ، نحتاج فقط تعيين $\frac{1}{8}$ المنطقة بشكل منفصل ويمكن استكمال باقي المنطقة بواسطة التماثل.

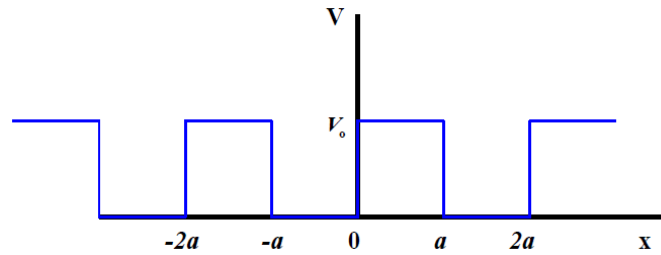
نموذج كرونج وبينى لحساب حزم الطاقة

لبيان تأثير دورية توزيع الأيونات على حركة الإلكترونات وبيان حزم الطاقة المسموحة للإلكترونات وفجوات الطاقة (الحزم الممنوعة) طرح العالمان كرونك وبينى نموذج دوريا في بعد واحد يماثل دورية الشبيكة البلورية . أعتبر هذا النموذج شبيكة بلورية ذات ثابت شبيكة مقداره $2a$ وجهد دوري مقداره V_0 وبناء على هذا التصور فإن جهد الشبيكة يبدو على شكل سلسلة من الآبار والمرتفعات تمثل الذرات وتأثيرها . بفرض أن إتساع بئر الجهد الذي يتحرك فيه الإلكترون هو a وبفرض أن المسافة التى تفصل بين بئرين هي a وهي تمثل سمك الجهد الحاجز (المسافة بين الذرتين) فإن المسافة بين أى ذرتين متتاليتين (دورة التركيب) تكون $a + a$ ، كما يبين الشكل (9) .

بإستخدام نظرية بلوخ نحصل على ،

$$\left. \begin{aligned} \psi_k(x+2a) &= e^{2iak} \psi_k(x) \\ \frac{d}{dx} \psi_k(x+2a) &= e^{2iak} \frac{d}{dx} \psi_k(x) \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

وحسب الميكانيك التقليدي فإن الإلكترون يظل محصورا داخل جدار بئر الجهد إذا كانت طاقته أقل من V_0 ، أما إذا كانت طاقته أكبر من V_0 فإن سرعة الإلكترون داخل البئر تساوي $\left(\frac{E}{m}\right)^{1/2}$ وسرعته عند جدار البئر تساوي $\left(2\frac{E-V_0}{m}\right)^{1/2}$ ولكن حسب النظرية الكمية فإن الإلكترون يكون موجودا خارج الجدران بالرغم من أن طاقته تكون أقل من V_0 . وبناء على ذلك يكون حل هذه المعادلة السابقة عبارة عن دالتين : الدالة الاولى هي ψ_1 وهي دالة الحالة التي تصف حركة الإلكترون داخل بئر الجهد ($-a \leq x \leq 0$) والدالة الثانية هي ψ_2 وتصف حالة الإلكترون خارج بئر الجهد ($0 \leq x \leq a$) .



الشكل (9) مخطط لبئر الجهد الدوري في البلورة في بعد واحد .

بحل معادلة شرودينجر في المدى ($-a \leq x \leq 0$) نحصل على :

$$\psi_1 = A \cos q_0 x + B \sin q_0 x \quad (13)$$

حيث $q_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ و A و B ثوابت يمكن تعيين قيمتها بتطبيق الشروط الحدية .

بالمثل بحل معادلة شرودينجر في المدى ($0 \leq x \leq a$) نحصل على :

$$\psi_2 = C \cos qx + D \sin qx \quad (14)$$

حيث $q^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$ ويكون مقدار q كمية تخيلية عندما $E < V_0$ و C و D ثوابت يمكن تعيين قيمتها بتطبيق الشروط الحدية أيضا .

بتطبيق الشروط الحدية والدورية نلاحظ أن :

الدالة ψ ومشتقتها $\frac{d\psi}{dx}$ تكونا مستمرتان عندما ($x = 0$) . ان الحل النهائي وباخذ الجزء الحقيقي فقط نحصل على :

$$\cos(2ka) = \cos(qa)\cos(q_0a) - \frac{q^2 + q_0^2}{2qq_0} \sin(qa)\sin(q_0a) \quad (15)$$

ولما كانت q و q_0 تتضمنان الطاقة E فإن المعادلة (15) تمثل علاقة الانتشار التي تربط بين كل من الطاقة والعدد الموجي . ويوجد للمعادلة السابقة حولا مقبولة فيزيائيا فقط إذا لم تتجاوز القيمة للطرف الأيمن الواحد (لان $|\cos 2ka| \leq 1$) ، ومن هذا الشرط تنشأ حزم وفجوات الطاقة .

ولكي نرى كيف تنشأ حزم الطاقة نفترض أن طاقة الإلكترون أقل من عمق بئر الجهد ($E < V_0$) فى هذه الحالة نجد أن q مقدار خيالي يكتب على الصورة $q = ip$ وبالتالي تصبح المعادلة (15) بالشكل :

$$\cos(2ka) = \cosh(pa)\cos(q_0a) - \frac{q_0^2 - p^2}{2pq_0} \sinh(pa)\sin(q_0a) \quad (16)$$

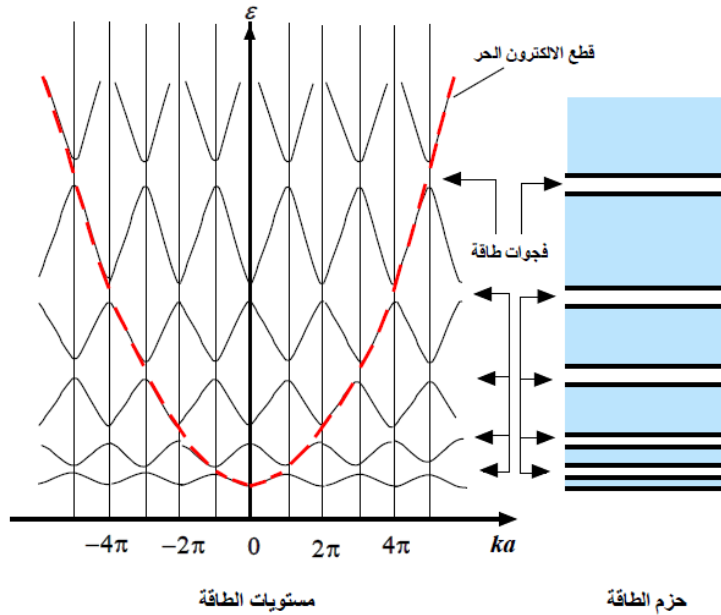
وللحصول على حل مبسط نفترض أن عمق البئر الجهدى كبير جدا ($\mathcal{E} \ll V_0$) وسمك البئر صغير جدا مقارنة بالمسافة a وبالتالي فإن الدوال القطعية ستتساوى ($\sinh(pa) \approx \cosh(pa)$) وسيهمل q_0 مقارنة مع p وتصبح المعادلة السابقة بالشكل :

$$\cos(2ka) = \cosh(pa) \left\{ \cos(q_0a) + \frac{p}{2q_0} \sin(q_0a) \right\} \quad (17)$$

وهذه المعادلة لا تتحقق إلا فى مجال ضيق من الطاقات المقابلة لقيم صغيرة للمقدار $\sin(q_0a)$ إذ أن هذا الحد مضروب بعدد كبير $\frac{p}{2q_0}$ فيعطى هذا الشرط تقريبا ، $\sin(q_0a) \approx 0$ ، أى أن $q_0a = n\pi$ وباستخدام العلاقة $q_0^2 = \frac{2m\mathcal{E}_n}{\hbar^2}$ نجد أن :

$$\mathcal{E}_n = n \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (18)$$

وتمثل هذه العلاقة قيم الطاقة المسموحة فى بئر الجهد للذرة والذي لايتسع كثيرا فى حالة البلورة . ومن هنا يتضح وجود مناطق مسموح بها وأخرى غير مسموح بها ، كما يبين الشكل (10) وهكذا نجد الجهد الدورى لذرات الشبكة قد أملى وجود مناطق ممنوعة من الطاقة الالكترونية (تسمى فجوات طاقة) وكلما إزداد ارتفاع بئر الجهد يقل اتساع هذه الفجوات . برسم العلاقة بين طاقة الإلكترون ومقلوب طول الموجة المصاحب نحصل على الشكل السابق والتي تظهر فيه حزم الطاقة والمناطق الممنوعة . من الشكل السابق يتبين أنه :



الشكل (10) حزم وفجوات الطاقة فى الشبكة البلورية

1 - في مدى المتجه الموجي $0 < k < \frac{\pi}{a}$ أو من $-\frac{\pi}{a} < k < 0$ تتزايد طاقة الالكترون بإستمرار. وعند $k = \pm \frac{\pi}{a}$ يحدث الانقطاع الأول .

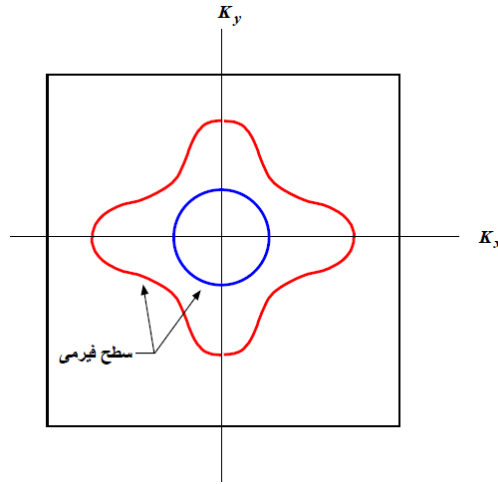
2 - مدى المتجه الموجي $\frac{\pi}{a} < k < \frac{2\pi}{a}$ أو من $-\frac{2\pi}{a} < k < -\frac{\pi}{a}$ تتزايد طاقة الالكترون بإستمرار. وعند $k = \pm \frac{2\pi}{a}$ يحدث الانقطاع الثاني .

3 - مدى المتجه الموجي $\frac{2\pi}{a} < k < \frac{3\pi}{a}$ أو من $-\frac{3\pi}{a} < k < -\frac{2\pi}{a}$ تتزايد طاقة الالكترون بإستمرار. وعند $k = \pm \frac{3\pi}{a}$ يحدث الانقطاع الثالث . وهكذا

وتوضح الإنقطاعات وجود حزم ممنوعة على الالكترونات عند $k = \pm \frac{n\pi}{a}$ حيث n أى عدد صحيح. وبالتعويض عن k بدلالة الطول الموجي ، $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ نحصل على $\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n\pi}{a}$ وبالتالي $n\lambda = 2a$ وهي نفس علاقة براغ فى حالة السقوط العمودي وهذا يعني أنه إذا كان للالكترون طاقة تسمح له بدخول الحزمة الممنوعة فإنه لا يلبث أن يستطار ليخرج من هذه الحزمة وبالتالي لا يمكن أن يتواجد فيها .

سطح فيرمي

تأتى أهمية سطح فيرمي في فيزياء الحالة الصلبة من حقيقة أن الالكترونات التي تقع قريبا من هذا السطح هي فقط التي تشارك التهييج الحراري أو في العمليات الإنتقالية . في هذا البند سوف ندرس سطح فيرمي آخذين في الإعتبار تأثيرات جهد البلورة على شكل هذا السطح .

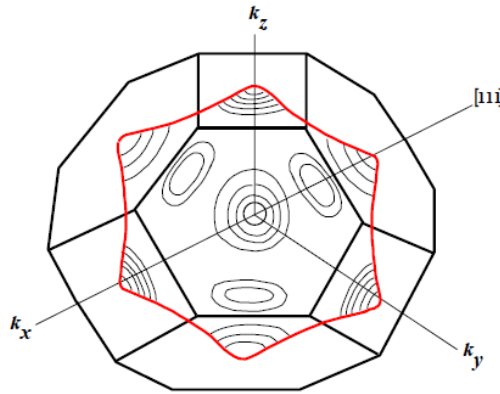


الشكل (11) تحول شكل سطح فيرمي مع زيادة تركيز الالكترونات التكافؤ أو الالكترونات التوصيل .

تذكر مرة أخرى بأن سطح فيرمي يعرف بأنه السطح (في فضاء متجه الموجة) الذي بداخله تكون كل حالات الطاقة ممتلئة بالالكترونات تكافؤ ، بينما تكون الحالات التي تقع خارجة شاغرة وذلك صحيح بشكل صارم فقط عند درجة حرارة الصفر المطلق ، ويكون تأثير درجة الحرارة طفيف جدا ويبقى هذا السطح عند درجة حرارة الغرفة وحتى عند درجات الحرارة الأعلى . وحيث أن سطح فيرمي هو محيط طاقة في حد ذاته ، فإن شكله يتحدد بهندسة محيطات الطاقة في الحزمة ، حيث $E(k) = E_F$ و E_F هي طاقة فيرمي ، وبسبب ذلك فإن سطح فيرمي يجب أن يظهر نفس التماثل الدوراني للشبيكة . يوضح الشكل (11) تغير شكل سطح فيرمي مع زيادة تركيز الالكترونات التكافؤ . عندما يكون تركيز الالكترونات

(التكافؤ أو التوصيل) ، n ، صغيرا ، فإن تلك الحالات التي تقع بالقرب من قاع الحزمة عند مركز المنطقة هي التي فقط تكون مأهولة بالالكترونات ، ولهذا يكون الحجم المأهول في فضاء متجه الموجة محاطا بسطح فيرمي ومع زيادة n وإشغال المزيد من الحالات فإن حجم فيرمي يتمدد ويبدأ شكل سطح فيرمي (الذي هو عبارة عن كرة عند نقطة الاصل) يتغير بالتدريج و ظهور التشوه في المحيط عند الطاقات الكبيرة ، كما يتبين في الشكل (11) .

إن المعادن القلوية (Li ، Na و K) تتبلور على شكل مكعب متمركز الجسم وفيها تكون منطقة بريليون على شكل ثماني أسطح مشذب . أن حزمة التكافؤ تكون نصف ممتلئة ويترتب على ذلك أن سطح فيرمي مايزال بعيدا عن حدود المنطقة وأن علاقة الإنتشار تتحقق بشكل جيد خلال معظم المنطقة ، فإن سطح فيرمي في هذه المواد يكون أساسا كروي الشكل . وقد أكدت التجارب هذا الاستنتاج مبينة أن التشوه في كروية سطح فيرمي في Na و K يكون صغيراً جداً وفي حدود 10^{-3} .

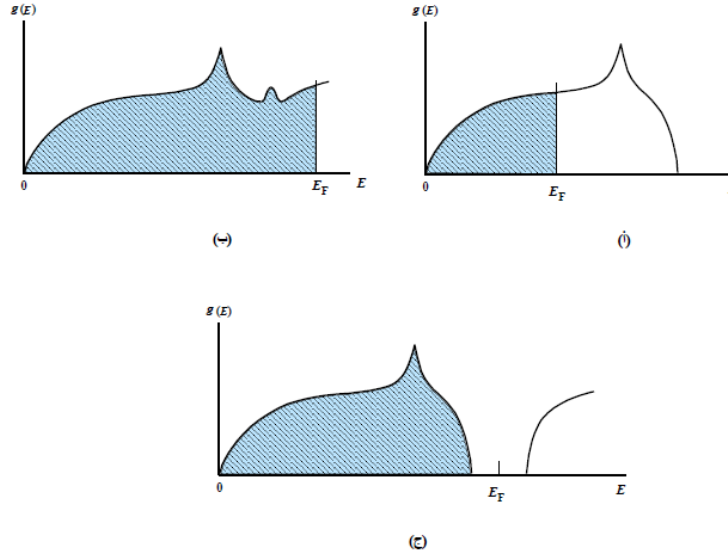


الشكل (12) شكل سطح فيرمي في المعادن النبيلة وفيه يبرز السطح في اتجاه أوجه المنطقة في الإتجاهات [111] .

تتبلور المعادن النبيلة مثل Cu ، Ag و Au على هيئة تركيب مكعب متمركز الأوجه ويكون شكل منطقة بريليون ثماني الأوجه مشذب ، كما هو مبين بالشكل (12) . ومرة أخرى ، تكون حزمة التكافؤ نصف ممتلئة وبالتالي يكون سطح فيرمي بعيدا عن حدود المنطقة ويجب أن يكون كرويا بشكل أساسي . ومع ذلك ، نجد أن سطح فيرمي على إمتداد [111] يقترب من حدود المنطقة وذلك بسبب شكل المنطقة وكنتيجة لأن السطح يعاني من تشوه شديد في الحيز . وكما هو مبين بالشكل اعلاه نجد أن سطح فيرمي يبتأ بشكل كبير في الإتجاهات [111] لدرجة أن يلامس أوجه المنطقة ، وكنتيجة لذلك ، فإن حدود المنطقة يجذب سطح فيرمي ويعطيه الشكل المبين وهو عبارة عن كرة لها 8 أطراف منتوعة في الإتجاهات [111] . وهكذا نرى أن شكل سطح فيرمي في المعادن النبيلة يختلف عنه في المعادن القلوية .

يبين الشكل (13) موقع مستوى فيرمي لمختلف أصناف المواد الصلبة . يوضح الشكل (13 - أ) كثافة الحالات وموقع مستوى فيرمي للمعادن أحادية التكافؤ وفيه يتضح أن نصف الحزمة فقط مشغول بالالكترونات وبالتالي تسلك المادة سلوك الموصلات .

يبين الشكل (13 - ب) حالة المعادن ثنائية التكافؤ، حيث يتضح أن الحزم تتداخل إلى حد ما ويكون عدد الكتر ونات التكافؤ كبير جدا ، الأمر الذي معه يمتد مستوى فيرمي ويسقط على الحزمة الأعلى (حزمة التوصيل) . أما في المواد العازلة تكون حزمة التكافؤ ممتلئة بالكامل ويقع مستوى فيرمي في مكان ما في فجوة الطاقة ، كما يبين الشكل (13 - ج) .



الشكل (13) اعتماد كثافة الحالة على الطاقة وموقع طاقة فيرمي في كل من (أ) المعادن الأحادية التكافؤ ، (ب) المعادن ثنائية التكافؤ و (ج) المواد العازلة .

أن طاقة فيرمي تعطى بالمعادلة الآتية

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n)^{2/3} \quad (16)$$

وهي نفس النتيجة في حالة نموذج الإلكترون الحر .

بالنسبة للمواد العديدة التكافؤ يكون سطح فيرمي أكر تعقيدا . بفرض أن عدد الكترونات التكافؤ يكون كبير بالشكل الذي يجعل مستوى فيرمي يتقاطع مع حدود المنطقة .

ديناميكية حركة الإلكترونات

لتعيين سرعة الكترون بلوخ نفترض أن دالة الحالة التي تصف حركته في البلورة هي ψ_k وأن هذه الدالة ترتبط مباشرة مع طاقة الكترون في هذه الحالة . نعتبر أولا حالة الجسيم الحر .

تعطى سرعة الجسيم الحر بالعلاقة $v = p/m$ ، حيث p هو الزخم . وحيث أن $p = \hbar k$ فإن سرعة الكترون الحر تعطى بالمعادلة ،

$$v = \frac{\hbar k}{m} \quad (17)$$

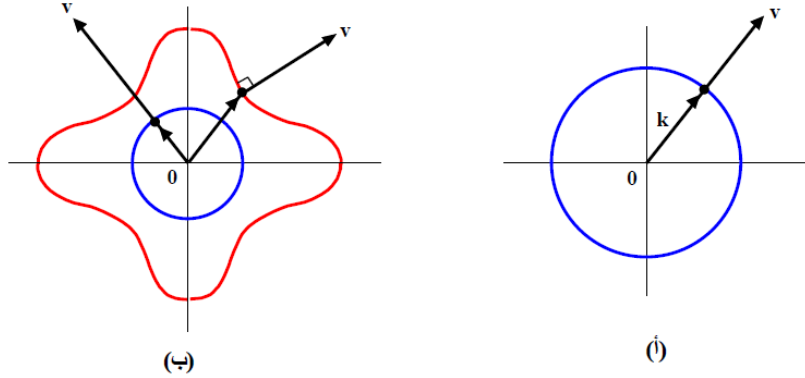
وهذا يعنى أن سرعة الكترون تتناسب مع متجه الموجة وتوازيه ، كما هو مبين بالشكل (14 - أ) .

بالنسبة لإلكترون بلوخ تكون السرعة أيضا دالة في k . لإستنتاج العلاقة بين v و k فى هذه الحالة نستخدم العلاقة الشهيرة لإنتشار الموجات ، والتي فيها تعطى سرعة المجموعة لحزمة موجية بالعلاقة ،

$$v = \nabla_k \omega(k) \quad (18)$$

حيث ω هو التردد و k هو متجه الموجة للحزمة الموجية . بتطبيق هذه العلاقة على حالة الكترون الحر في البلورة واستخدام علاقة أينشتاين $\omega = E/\hbar$ يمكن كتابة سرعة الكترون بلوخ بالشكل :

$$v = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k) \quad (19)$$



الشكل (14) سرعة (أ) الالكترون الحر ، (ب) الكترون بلوخ .

وتفيد هذه المعادلة أن سرعة الالكترون في الحالة k يتناسب مع منحدر الطاقة في فضاء متجه الموجة . وحيث أن متجه منحدر الطاقة يكون عمودي على خطوط المحيط فإن السرعة عند كل نقطة في فضاء متجه الموجة تكون عمودية على محيط الطاقة المار بهذه النقطة ، كما هو مبين بالشكل (14 - ب) ، وذلك لأن هذه المحيطات لاتكون كروية بشكل عام ويترتب على ذلك أنه ليس بالضرورة أن تكون سرعة الالكترون موازية لمتجه الموجة k ، على خلاف حالة الالكترون الحر .

لاحظ بالقرب من مركز المنطقة (حيث من المتوقع أن تتحقق المعادلة القياسية $E = \hbar^2 k^2 / 2m$) نحصل على :

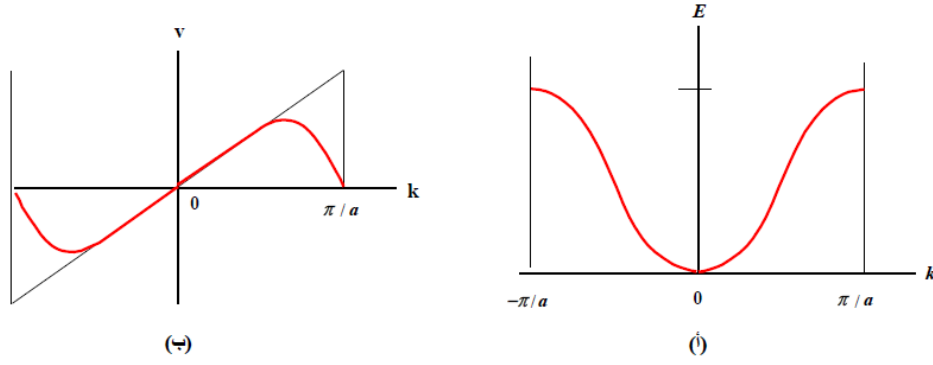
$$v = \frac{1}{\hbar} \nabla_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar k}{m} \quad (20)$$

والتي لها نفس شكل علاقة الالكترون الحر . لاحظ ايضا ، أن الالكترون الموجود في حالة معينة ψ_k ، فإنه يبقى في هذه الحالة للأبد وبالتالي تظل الشبيكة دورية . ومهما طالت هذه الحالة ، فإن الالكترون سوف يستمر في الحركة خلال البلورة بنفس السرعة لا يعوقه أي تشتت بواسطة الشبيكة ، أي أن سرعة الالكترون تكون ثابتة . أما الحيود عن الدورية في الشبيكة فإنه بالطبع يؤدي إلى تغير في سرعة الالكترون ، كما يبين الحالات التالية .

عندما يتحرك الكترن في شبيكة مهتزة فإنه سوف يعاني من تصادمات متتالية مع الفونونات وبالتالي تتأثر سرعته بشكل عميق . أيضا تؤدي المجالات الخارجية ، سواء كانت كهربائية أو مغناطيسية ، إلى حدوث تغير في سرعة الالكترون .

يبين الشكل (15 - أ) تركيب حزم الطاقة في بعد واحد ، كما يبين الشكل (15 - ب) منحنى السعة المقابل والذي يمكن اختزاله في الحالة الحالية بالشكل :

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} \quad (21)$$



الشكل (15) (أ) تركيب حزم الطاقة في بعد واحد ، (ب) سرعة الإلكترون المقلبة في الشبكة في بعد واحد .

وهذا يعني أن السرعة تتناسب مع ميل منحنى الطاقة . ويتضح من الشكل أن ، السرعة في البداية تزداد بشكل خطي (إبتداء من نقطة الأصل وفي إتجاه حافة المنطقة) حتى تصل إلى قيمة عظمى ثم تتناقص إلى الصفر عند الحافة . ويمكن تفسير هذا السلوك كما يلي :

بالقرب من مركز المنطقة ، يمكن تمثيل الإلكترون بموجة مستوية ، $\psi_k \approx e^{ikx}$ ، ومع ذلك ، يزداد تشتت الموجة الحرة بواسطة الشبكة بزيادة k وتولد موجة جديدة تتحرك إلى اليسار ويكون لها المتجه إلى الصفر عند الحافة . ويمكن تفسير هذا السلوك كما يلي :

$$\psi_k \cong e^{ikx} + be^{-i(2\pi/a-k)x} \quad (22)$$

حيث يوجد المعامل b من نظرية الإضطراب . وطبقا للميكانيك الكمي تكون سرعة هذه الموجة بالشكل :

$$v = \frac{\hbar k}{m} - |b|^2 \frac{\hbar}{m} \left(\frac{2\pi}{a} - k \right) \quad (23)$$

حيث يعود الحد الأول إلى الموجة التي تتحرك إلى اليمين والحد الثاني إلى الموجة التي تتحرك إلى اليسار . عند قيم k الصغيرة يكون المعامل b صغيرا وتعطى السرعة بشكل أساسي بالمقدار $\hbar k/m$. وعند زيادة k يزداد تأثير التشتت وهكذا يصبح الحد الثاني في المعادلة اعلاه ملموساً . وحيث أن الحد الثاني سالب فإن تأثيره يعمل على تلاشي قيمة الحد الأول . وبالقرب من حدود المنطقة ، تكون قيمة المعامل b كبيرة جدا ويكون التلاشي أكبر من الزيادة في الحد الأول ، ويؤدي ذلك محصلة تناقص في السرعة . عند حدود المنطقة ($k = \pi/a$) تكون شدة الموجة المشتتة مثل شدة الساقطة كنتيجة إنعكاس براك القوي ، أي ان $b = 1$ ومن المعادلة اعلاه تكون $v = 0$ وهذا يتفق مع الشكل (15 - ب) .

الكتلة الفعالة The Effective Mass

لدراسة الكتلة الفعالة للإلكترون نستعيد معالجة حركة الإلكترون في الصلب في وجود مجال كهربائي . يعجل الإلكترون في المجال الكهربائي طبقا للمعادلة ،

$$\ddot{a} = \frac{dv}{dt}$$

حيث اخترنا معالجة حالة البعد الواحد . وحيث أن السرعة دالة في متجه الموجة فإنه يمكن كتابة المعادلة السابقة على الصورة ،

$$\ddot{a} = \frac{dv}{dk} \frac{dk}{dt}$$

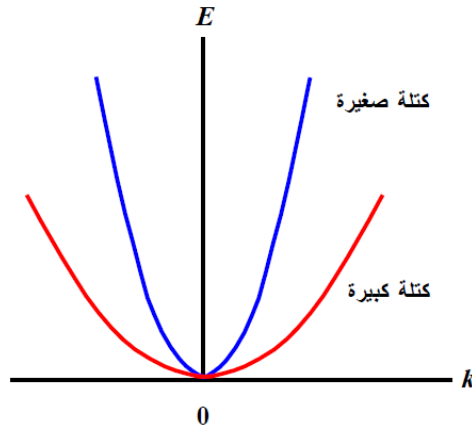
بالتعويض عن السرعة من المعادلة (21) وعن dk/dt من المعادلة $F = -eE = \frac{dp}{dt} = \hbar \frac{dk}{dt}$ في المعادلة السابقة نحصل على :

$$\ddot{a} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} F \quad (24)$$

ولهذه المعادلة شكل قانون نيوتن الثانى وبالتالى يمكن تعريف الكتلة الفعالة ، m^* ، بالعلاقة :

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)} \quad (25)$$

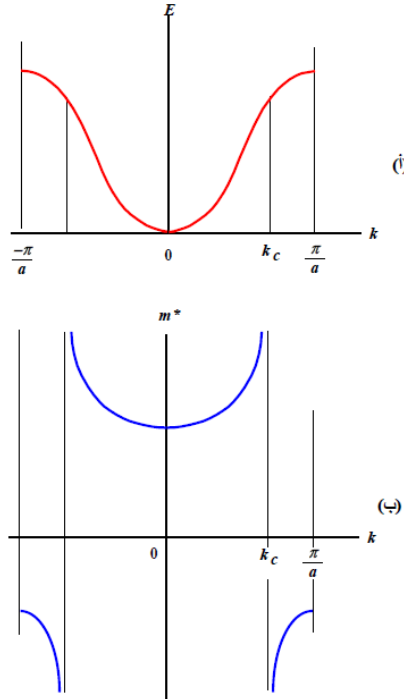
وهكذا ، فإن حركة الكترون بلوخ فى وجود المجال الكهربائي يكون شبيه بحركة الالكترتون الحر ولكن بكتلة فعالة تعطى بالمعادلة السابقة . يتضح من المعادلة (25) أن الكتلة الفعالة تتناسب عكسيا مع إنحناء حزمة الطاقة ، حيث يزيد الانحناء عندما تكون $d^2 E/dk^2$ كبيرة ، أي عندما تكون الكتلة صغيرة ، كما يبين الشكل (16)



الشكل (16) العلاقة العكسية بين الكتلة وإنحناء حزمة الطاقة .

يبين الشكل (17) تركيب الحزمة والكتلة الفعالة محسوبة طبقا للمعادلة (25) من هذا الشكل يتضح أنه ، بالقرب من قاع الحزمة يكون للكتلة m^* قيمة ثابتة تقريبا وموجبة بسبب أن العلاقة التربيعية $E = \alpha k^2$ تتحقق ، حيث $\alpha = \hbar^2/2m^*$. ولكن مع إزدياد متجه الموجة k فإن الكتلة لا تبقى ثابتة بسبب انتهاء تحقق العلاقة التربيعية وتصبح m^* دالة في k . لاحظ من الشكل أنه بعد نقطة الانعكاس k_c تصبح m^* سالبة ، حيث تكون بالقرب من قمة الحزمة وأن القيمة السالبة للكتلة الفعالة يكون متوقعا .

ويعتبر مفهوم الكتلة الفعالة من المفاهيم المهمة في فيزياء الحالة الصلبة حيث يمكن بواسطة معالجة الكترون بلوخ على غرار معالجة الالكترتون الحر ، ومع ذلك ، يظهر الكترون بلوخ العديد من الخصائص الغير عادية والتي تعتبر مخالفة لخصائص الالكترتون الحر .



الشكل (17) (أ) تركيب حزمة الطاقة ، (ب) اعتماد الكتلة الفعالة على k .

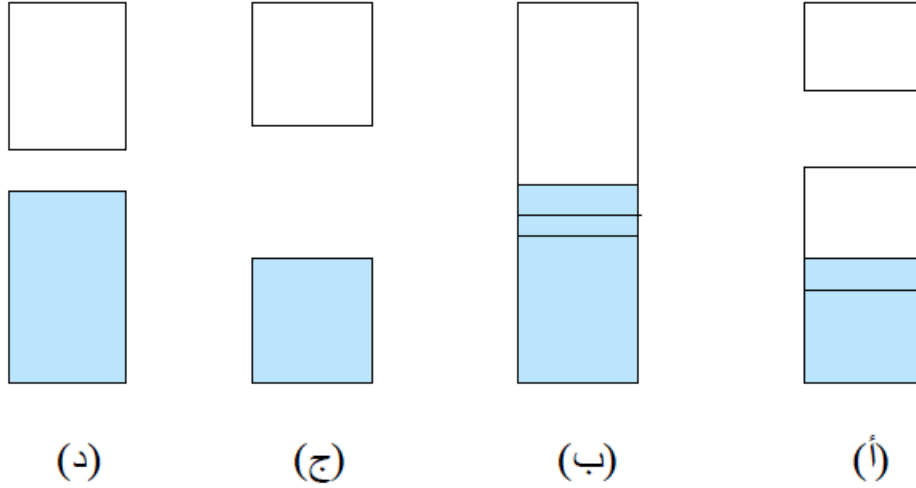
تصنيف المواد الصلبة (المعادن ، العوازل ، اشباه الموصلات)

إن الصفات الكهربائية للمواد الصلبة تتحدد بتركيب حزم طاقتها ومدى إشغالها بالالكترونات. تنقسم المواد الصلبة إلى صنفين رئيسيين هما المعادن (الموصلات) والمواد العازلة . المعدن هو صلب يسرى فيه التيار الكهربائي عند تطبيق مجال كهربائي عليه ، بينما المادة العازلة لا تمرر التيار . ويمكن التمييز بين الصنفين استناداً إلى مفهوم ودور حزم الطاقة في التوصيل الكهربائي . ينص هذا المفهوم على أن حزمة الطاقة الممتلئة تماماً لا تحمل التيار الكهربائي حتى في وجود المجال الكهربائي . وبناء على ذلك ، فإن الصلب يسلك سلوك المعدن عندما تكون بعض حزم الطاقة ممتلئة جزئياً . وحيث أن إشغال الالكترونات لحزم الطاقة يتم وفقاً لمبدأ " باولي " للإستبعاد فإن كل حزمة طاقة سوف تمتلئ بنفس كيفية امتلاء مستويات الطاقة في الذرة الحرة . فعلى سبيل المثال ، تمتلئ مناسيب الطاقة في ذرة الصوديوم (Na^{11}) حتى المستوي $3s$ ويكون التركيب الالكتروني لها على النحو ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$) . وحيث أن المستوي $3s$ يحتوي على الكترون واحد فإن هذا المستوي في ذرة الصوديوم يكون ممتلئ جزئياً (نصف ممتلئ أو نصف خال) . وعلى نفس الوتيرة تكون حزمة الطاقة الأخيرة في صلب الصوديوم ممتلئة جزئياً .

تسمى أعلى حزمة طاقة مشغولة بالالكترونات بنطاق التكافؤ (valance band) بينما تسمى الحزمة الخالية التالية بنطاق التوصيل (conduction band) ، كما هو مبين بالشكل (18 - أ) . إذا لم يكن نطاق التكافؤ ممتلئاً تماماً بالالكترونات يطلق عليه نطاق التوصيل أو أن نطاق التكافؤ يكون متداخلاً مع نطاق الأعلى (التوصيل) ، كما يبين الشكل (18 - ب) وفي هذه الحالة يكون من السهل رفع الالكترونات التكافؤ إلى النطاق الأعلى ومن ثم تقوم بالتوصيل عند تطبيق مجال كهربائي . تسمى المواد التي لها التركيب السابق لحزم الطاقة بالموصلات (conductors) مثل المعادن وبعض الفلزات مثل الليثيوم والصوديوم وغيرها.

في المواد العازلة يكون نطاق التكافؤ ممتلئاً تماماً ويكون نطاق التوصيل خال تماماً بالإضافة إلى وجود فجوة طاقة كبيرة تفصل بين النطاقين ، كما هو مبين بالشكل (18 - ج) ، الامر الذي معه يتعذر انتقال

الالكترونات من نطاق التكافؤ إلى نطاق التوصيل إلا عند تطبيق مجال كهربائي متناهي في الكبر، لذلك تسمى هذه المواد بالعازلة أو رديئة التوصيل (insulators). من أمثلة هذه المواد يوجد الماس وفيه يبلغ مقدار فجوة الطاقة حوالي 6eV . على كل حال تكون فجوة الطاقة في المواد العازلة أكبر بكثير من 4 الكترون فولت .



الشكل (18) تركيب حزم الطاقة في المادة الصلبة

توجد بعض المواد العازلة مثل السيليكون والجرمانيوم ، على سبيل المثال ، لها تركيب يشبه تركيب الماس مع وجود فجوة طاقة صغيرة نسبيا (حوالي 1eV) ، الشكل (3 - د) . لذلك تكون هذه المواد رديئة التوصيل عند درجات الحرارة المنخفضة . وعند درجة حرارة الغرفة فإن نسبة قليلة من الالكترونات تكتسب طاقة حركية نتيجة التهييج الحراري وتتمكن من القفز من نطاق التكافؤ عبر فجوة الطاقة إلى نطاق التوصيل عند تطبيق مجال كهربائي مسببة تيار كهربائي ملموس ، لذلك تسمى مثل هذه المواد بأشباه الموصلات (semiconductors) حيث تقع قيمة توصيليتها الكهربائية بين المواد الموصلة والمواد العازلة .