كلية العلوم

القسم : الفيزياء

السنة : الرابعة

المادة : حالة صلبة٢

المحاضرة : الرابعة/نظري/

{{ A to Z مكتبة }}

Facebook Group : A to Zمكتبة

كلية العلوم ، كلية الصيدلة ، الهندسة التقنية

٤

2026

يمكنكم طلب المحاضرات برسالة نصية (SMS) أو عبر(What's app-Telegram)على الرقم 0931497960

6-5 نموذج الارتباط الشديد Tight-Binding Model

لقد بدأنا هذا الفصل بمناقشة نموذج وصفي للبنية الإلكترونية لأجسام صلبة تتجمّع فيها مستويات الطاقة الذرية لعدد كبير جداً من الذرات التي كوَّنت هذه الأجسام **لتشكيل عصابة مستمرة من الحالات**؛ إلاَّ أننا تخليّنا عن هذا التوصيف وتعاملنا مع الإلكترونات على أنها **حرة– تماماً** *Free Electrons* أولاً ثمَّ **شبه– حرةٍ** *Nearly Free Electrons* ثانياً. فعلياً، أدى ذلك إلى **توزعٍ شبه مستمرٍ** *Quasi-continuous* لمستويات الطاقة بفجوات طاقية تفصل فيما بينها. نعود الآن إلى التوصيف الذي يبدأ بالحالات الذرية من خلال تصميم **تابع موجة بلوخ** مؤلفٍ من **تركيبٍ خطّيٍ لمدارات ذرية** (LCAO) *Linear Combination of Atomic Orbitals*؛ تُعرف هذه الطريقة **بتقريب الرابطة الشديدة** *Tight-Binding*.

- يُعدُّ تقريب الإلكترون شبه– الحر الذي قمنا بدراسته في الفقرة الأخيرة أكثر من نقطة انطلاق طبيعية لوصف المعادن،
- في حين يُعدُّ تقريب الرابطة الشديدة نقطة الانطلاق الأساسية من أجل البلّورات المترابطة تساهمياً أو من أجل الإلكترونات الأكثر تموضعاً في المعادن، كالإلكترونات d في المعادن الانتقالية.
- وفي نهاية المطاف، كلا التقريبين جيدان وصقلهما يؤدي إلى نتائج مُرضية بعض الشيء. إلاَّ أن دراسة تقريب الرابطة الشديدة هنا تسمح لنا بالحصول على نظرةٍ أكثر عمقاً لمعنى بنية العصابات الطاقية للأجسام الصلبة.

ندرس تقريب الرابطة الشديدة بأبسط أشكاله، إذْ **نبدأ** من هاملتون الذرات التي تؤلِّف الجسم الصلب (بدراسة نوع واحد فقط من الذرات بغرض التبسيط)، والذي يُعطى بالشكل الآتي:

$$H_{\text{at}} = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_e} + V_{\text{at}}(\vec{r}), \qquad (48\text{-}6)$$

حيث V_{at} الكمون الذري– أحادي الإلكترون.

تمتلك الذرات سويات طاقة مختلفة، E_n، وتوابع موجية موافقة لها. عندما نجمع الذرات مع بعضها بعضاً ككل، لتشكِّل جسماً صلباً، نتوقع أن تتحوَّل كل سوية طاقية إلى عصابة طاقية في الجسم الصلب. يمكننا على سبيل المثال العودة إلى ذرات الـ Na التي تعرَّفنا عليها في بداية هذا الفصل ودراسة العصابة الطاقية الحاصلة من الحالة 3s ذات الطاقة E_{3s} والتابع الموجي $\phi_{3s}(\vec{r})$.

إذا كان لدينا ذرة في كل نقطة من النقاط $\vec{R}$ الواقعة **على طول شبكة براڤيه**، فيمكننا كتابة الهاملتون من أجل الجسم الصلب بالشكل الآتي:

$$H_{\text{sol}} = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_e} + \sum_{\vec{R}} V_{\text{at}}(\vec{r}-\vec{R}) = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_e} + V_{\text{at}}(\vec{r}) + \sum_{\vec{R}\neq 0} V_{\text{at}}(\vec{r}-\vec{R}). \qquad \mathbf{(49\text{-}6)}$$

- الحد الأول هو الطاقة الحركية للإلكترون **المفرد** الذي ندرسه؛
- الحد الثاني هو مجموع الكمونات الذرية لجميع الذرات في الجسم الصلب. وللكمون في هذا الهاملتون دوريّة الشبيكة البلّورية، كما يجب.

- يُظهر الطرف الأيمن من المعادلة أنه يمكننا تقسيم هذه الكمون، بأي طريقة نريدها، فعلى سبيل المثال: إلى **كمون الذرة الواقعة في المبدأ**، $V_{\text{at}}(\vec{r})$، **وكمون باقي الجسم الصلب**.
- يمكن التعبير عن ذلك أيضاً بالكتابة الآتية:

$$H_{\text{sol}} = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_e} + V_{\text{at}}(\vec{r}) + v(\vec{r}) = H_{\text{at}} + v(\vec{r}), \tag{50-6}$$

حيث

$$\boxed{v(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}\neq 0} V_{\text{at}}(\vec{r}-\vec{R}).} \tag{51-6}$$

يمكن أن تظهر المعادلة (6-50) بمثابة هاملتون من أجل ذرة تقع في المبدأ مضاف إليه كمون تصحيح ما ناتج من كل الذرات الأخرى.

لندرس الحالة التي تكون فيها الذرات بعيدة جداً عن بعضها البعض. في هذه الحالة، يمكننا محاولة استخدام التوابع الموجية، $\phi_n(\vec{r})$، العائدة لسويات الطاقة الذرية، E_n، لحساب **القيم الخاصة الطاقية للجسم الصلب**. نحصل عندها على المعادلة الآتية:

$$\begin{aligned}
&\int \phi_n^*(\vec{r})\, H_{\text{sol}}\, \phi_n(\vec{r})\, d\vec{r} = \int \phi_n^*(\vec{r})\left(H_{\text{at}} + v(\vec{r})\right)\phi_n(\vec{r})\, d\vec{r} = \\
&= \int \phi_n^*(\vec{r})\, H_{\text{at}}\, \phi_n(\vec{r})\, d\vec{r} + \int \phi_n^*(\vec{r})\, v(\vec{r})\, \phi_n(\vec{r})\, d\vec{r} = \\
&= E_n + \int \phi_n^*(\vec{r})\, v(\vec{r})\, \phi_n(\vec{r})\, d\vec{r} = E_n - \beta\,,
\end{aligned} \tag{52-6}$$

حيث β مقدار **انزياح** صغير للسوية الطاقية الذرية **ينتج** من وجود كمونات الذرات الأخرى.

- إذا كانت الذرات بعيدة عن بعضها البعض كفايةً، فإن $\beta = 0$، لأن التابع الموجي $\phi_n(\vec{r})$ سيتناقص حتى الصفر قبل أن يُصبح الكمون الناتج عن الذرات المجاورة عند الموقع $\vec{R}\neq 0$ أكبر من الصفر بشكلٍ ملحوظٍ.
- نرى بسهولة أن التابع الموجي الذري المتمركِز في أي موقع آخر، $\vec{R}$، سيكون حلاً لمعادلة شرودنغر أيضاً من أجل الهاملتون (6-49):

لفعل ذلك، علينا فقط إعادة كتابة هاملتون بحيث يكون متمركِزاً على الذرة في الموقع $\vec{R}$ مُضافاً إليه الكمون الناتج من كل الذرات الأخرى. وهكذا نجد أن نتيجة هذه المعالجة تكمن في الآتي:

من أجل جسم صلب مؤلف من N ذرة، نحصل على **N حلاً منطبقاً** *Degenerate Solution* من أجل **كل قيمة طاقية خاصة للهاملتون الذّري**. بالطبع، هذا ما كان متوقعاً، طالما أن الذرات تكون بعيدة جداً عن بعضها البعض بحيث لا تتآثر فيما بينها. و"بنية عُصابات الطاقة" الناتجة ستتألف من رزم ("عُصابات") عند الطاقة E_n من دون أي تبدد.

ندرس الآن حالةً أكثر أهميةً، تمتاز بوجود بعض التآثر بين الذرات المتجاورة. ومن أجل ذلك، نكتب التابع الموجي للجسم الصلب؛ **كتركيب خطّيّ للتوابع الموجية الذّرية** في كل موقع، $\vec{R}$، من مواقع الشبكة البلّورية:

$$\boxed{\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} c_{\vec{k},\vec{R}}\, \phi_n(\vec{r}-\vec{R}).} \tag{53-6}$$

حيث $1/\sqrt{N}$ عامل التنظيم

- ✓ ستتضح فائدة عامل التنظيم لاحقاً ثمَّ أن المعاملات $c_{\vec{k},\vec{R}}$ لم تُعيَّن بعد؛ فهي ستتعلق بالمتجه الموجي، $\vec{k}$.
- ✓ واستخدام التوابع الموجية الذّرية، $\phi_n\left(\vec{r}-\vec{R}\right)$، هنا قد لا يكون صحيحاً تماماً، لأن وجود ذرات أخرى يمكنه أن يُعدِّل هذه التوابع الموجية قليلاً.

ولكن في الحالة الراهنة نُفضِّل صرف النظر عن ذلك بغرض التبسيط.

وعليه، تُعيَّن المعاملات $c_{\vec{k},\vec{R}}$ الآن من الشرط (6-53) **الذي يشترط أن يسلك التابع الموجي للجسم الصلب،** $\psi_{\vec{k}}\left(\vec{r}\right)$، **سلوك موجة بلوخ، إذا كانت حلاً للمعادلة** (6-49). يمكن الحصول على ذلك باختيار المعاملات بحيث تتحوَّل المعادلة (6-53) إلى الشكل الآتي:

$$\psi_{\vec{k}}\left(\vec{r}\right)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{R}}\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\;\phi_n\left(\vec{r}-\vec{R}\right), \qquad (54\text{-}6)$$

حيث يأخذ $\vec{k}$ القيم التي تسمح بها الشروط الحدّيَّة الدوريّة (6-5).

يُحقق التابع الموجي (6-54) شروط بلوخ بالشكل المنصوص عليه في المعادلة (6-28)، لأن:

$$\begin{aligned}\psi_{\vec{k}}\left(\vec{r}+\vec{R}'\right)&=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{R}}\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\;\phi_n\left(\vec{r}-\vec{R}+\vec{R}'\right)\\&=\frac{1}{\sqrt{N}}\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{R}'}\;\sum_{\vec{R}}\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\left(\vec{R}-\vec{R}'\right)}\;\phi_n\left(\vec{r}-\left(\vec{R}-\vec{R}'\right)\right)\\&=\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{R}'}\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{R}}\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{R}''}\;\phi_n\left(\vec{r}-\vec{R}''\right)=\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{R}'}\;\psi_{\vec{k}}\left(\vec{r}\right),\end{aligned} \qquad (55\text{-}6)$$

حيث $\vec{R}''=\vec{R}-\vec{R}'$.

نستخدم الآن التابع الموجي (6-55) لحساب بنية عصابة الطاقة المطلوبة، $E\left(\vec{k}\right)$، باستخدام الطريقة ذاتها التي تُستخدم من أجل **جزيء الهيدروجين**.

نفرض في الوقت الراهن، أن التوابع الموجية **مستنظمة** بحيث أن:

$$E\left(\vec{k}\right)=\int\psi_{\vec{k}}^{*}\left(\vec{r}\right)H_{\mathrm{sol}}\;\psi_{\vec{k}}\left(\vec{r}\right)d\vec{r}=\frac{1}{N}\sum_{\vec{R},\vec{R}'}\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\left(\vec{R}-\vec{R}'\right)}\int\phi_n^{*}\left(\vec{r}-\vec{R}'\right)H_{\mathrm{sol}}\;\phi_n\left(\vec{r}-\vec{R}\right)d\vec{r}, \qquad (56\text{-}6)$$

- حيث يجري كلا المجموعين على كل المواقع (العُقَد) البلّورية،
- وعلى الرغم من أن الجسم الصلب الذي نقصده هو جسم محدود، فيجب أن يبقى جسماً صلباً في سياق الشروط الحدّيَّة الدوريّة؛ بمعنى، حتى وإن اقتربنا من "سطح" من سطوحه، يجب أن يستمر الجسم الصلب دورياً من الجهة المقابلة لهذا السطح.
- ولذلك كل المجاميع من أجل اختيار معيّن لـ $\vec{R}'$ تبقى نفسها ويمكننا التخلص من عملية الجمع المضاعف بالإقرار بأنه لدينا N جمعاً من هذه المجاميع.

فإذا وضعنا اختيارياً $\vec{R}'=0$، نحصل على المعادلة الآتية:

$$\begin{aligned}E\left(\vec{k}\right)&=\sum_{\vec{R}}\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\int\phi_n^{*}\left(\vec{r}\right)H_{\mathrm{sol}}\;\phi_n\left(\vec{r}-\vec{R}\right)d\vec{r}\\&=\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot 0}\int\phi_n^{*}\left(\vec{r}\right)H_{\mathrm{sol}}\;\phi_n\left(\vec{r}\right)d\vec{r}+\sum_{\vec{R}\neq 0}\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\int\phi_n^{*}\left(\vec{r}\right)H_{\mathrm{sol}}\;\phi_n\left(\vec{r}-\vec{R}\right)d\vec{r}\,.\end{aligned} \qquad (57\text{-}6)$$

وباستخدام المعادلة (6-52) نستطيع كتابة العلاقة الأخيرة بالشكل الآتي:

$$E\left(\vec{k}\right)=E_n-\beta+\sum_{\vec{R}\neq 0}\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\int \phi_n^*\left(\vec{r}\right)H_{\text{sol}}\,\phi_n\left(\vec{r}-\vec{R}\right)d\vec{r}\,. \qquad \textbf{(58-6)}$$

يمكن الآن تجزئة التكامل في المعادلة (58-6) مع الأخذ بالحسبان المعادلة (50-6) إلى الشكل الآتي:

$$\int \phi_n^*\left(\vec{r}\right)H_{\text{sol}}\,\phi_n\left(\vec{r}-\vec{R}\right)d\vec{r} = E_n\int \phi_n^*\left(\vec{r}\right)\phi_n\left(\vec{r}-\vec{R}\right)d\vec{r}+\int \phi_n^*\left(\vec{r}\right)v\left(\vec{r}\right)\phi_n\left(\vec{r}-\vec{R}\right)d\vec{r}\,. \qquad (59\text{-}6)$$

- وعادةً يُهمل هنا التكامل الأول في الطرف الأيمن من المعادلة الأخيرة، لأنه يحوي تابعين موجيين في عقدتين بلوريتين مختلفتين وهما يتراكبان بشكلٍ ضعيف؛
- والتكامل الثاني في الطرف الأيمن صغير أيضاً ولنفس السبب، ولكنه عادةً **ليس صغيراً جداً**، لأن الكمون $v\left(\vec{r}\right)$ يتناقص إلى الصفر بسرعة أقل عندما يبتعد عن $\vec{R}$، **ولهذا السبب، يتزايد** $v\left(\vec{r}\right)\phi_n\left(\vec{r}-\vec{R}\right)$ **في منطقة تراكبه مع** $\phi_n^*\left(\vec{r}\right)$.

نُدخل الآن الرمز الآتي إلى المعادلة (59-6):

$$\gamma\left(\vec{R}\right)=-\int \phi_n^*\left(\vec{r}\right)v\left(\vec{r}\right)\phi_n\left(\vec{r}-\vec{R}\right)d\vec{r}\,, \qquad (60\text{-}6)$$

فنحصل على العلاقة النهائية الآتية من أجل بنية عصابة الطاقة استناداً إلى المعادلة (58-6):

$$E\left(\vec{k}\right)=E_n-\beta-\sum_{\vec{R}\neq 0}\gamma\left(\vec{R}\right)\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\,. \qquad (61\text{-}6)$$

تصف هذه المعادلة كيفية تحوّل السويات الذّريّة، E_n، إلى عُصابة طاقية عند انتظام الذرات في شبكة بلوريّة.

نُعيّن الآن **بنية عصابات الطاقة هذه لسلسلة ذرية أحادية – البعد، بثابت شبكة**، a، **على فرض أن العصابة الطاقية تنتج من المدارات الذّريّة-s ذات الطاقة** E_s:

- عملياً، تتطلب المعادلة (61-6) إجراء الجمع على كل المواقع (العقد) البلّورية، ولكن طالما أن التوابع الموجية **تتناقص بسرعة كبيرة جداً بعيداً** عن موقع، تمركزها، $\vec{R}$، **يكون كافياً** إهمال كل المساهمات في عملية الجمع– هذه المساهمات التي **تتضمن متجهات شبكة بلّورية أكبر من وحدة خلية واحدة** بعيداً عن المبدأ.
- بهذا الشكل، نجد أن عملية الجمع في المعادلة (61-6) **تقتصر فقط على أقرب المجاورات لذرةٍ**، عند $+a$ و $-a$.
- أضف إلى ذلك، بما أن **التوابع الموجية الذّريّة-s متناظرة كروياً**، فإن $\gamma_s=\gamma(-a)=\gamma(a)$، ومن ثمَّ نستطيع كتابة المعادلة الآتية:

$$E_s\left(\vec{k}\right)=E_s-\beta_s-\gamma_s\left(\mathrm{e}^{ika}+\mathrm{e}^{-ika}\right)=E_s-\beta_s-2\gamma_s\cos ka\,, \qquad (62\text{-}6)$$

حيث β_s هي قيمة β المحسوبة من أجل هذه العصابة-s.

هذه النتيجة الممثلة بالمعادلة (62-6) هي العصابة الطاقية الأدنى المرسومة في الشكل (11-6):

- فالعصابة-s تملك أدنى طاقة عند النقطة $k=0$ وأقصى طاقة عند النقطة $k=\pi/a$، أي أنها تقع في حدود منطقة بريلوان الأولى.

- نلاحظ أن **التبدد الطاقي** الذي يظهر في الشكل (6-11)، وبطبيعة الحال في المعادلة (6-62)، مشابهٌ جداً للعصابة الطاقية الأدنى المحسوبة في تقريب الإلكترون شبه– الحر، في الشكل (6-9d)، بصرف النظر عن طريقة حسابها المختلفة كلياً.
- مركز العصابة-s هنا منزاح عن الطاقة الذّريّة E_s بمقدار $-\beta_s$، وعادةً يكون هذا الانزياح صغيراً جداً.

يُعدُّ تعميم هذه النتجة لتشمل سويات طاقة ذريّة أخرى بسيطاً، والشكل (6-11) يوضح أيضاً نتيجة الحساب من أجل العصابة الطاقية التالية، الناتجة من **السوية الذّريّة-p**. ونرى مرةً أخرى، أن هذه العصابة مشابهة جداً لنتيجة تقريب الإلكترون شبه– الحر، التي يوضحها الشكل (6-9d).

وجدنا هنا **أيضاً** فجوة عصابة طاقية عند النقطة $k=\pi/a$: **تُحدد أبعاد** هذه الفجوة:

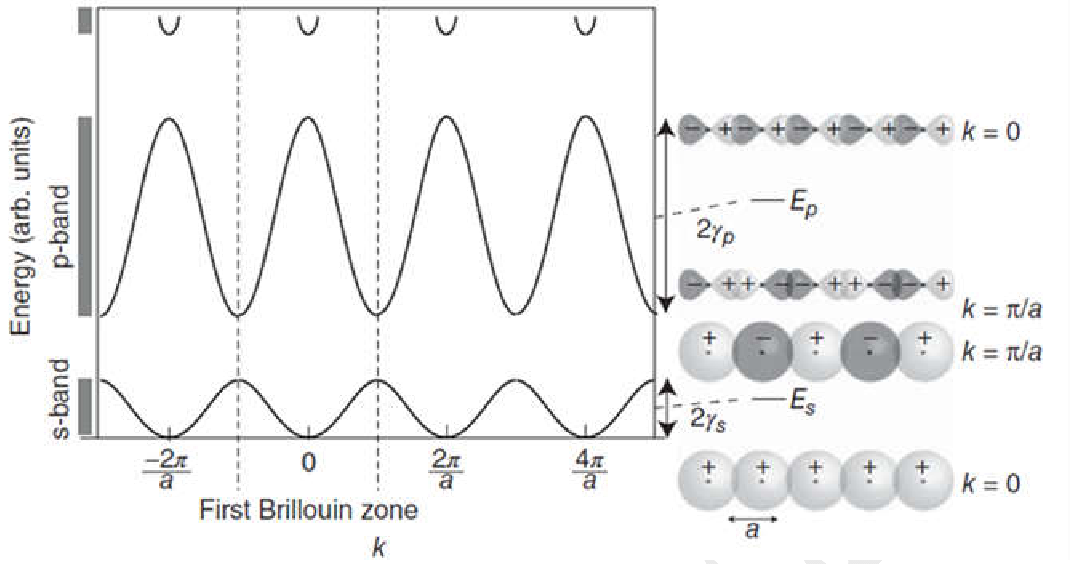
- بالفاصل الطاقي بين السويات-s والسويات-p،
- والفارق بين الانزياحين β_s و β_p، وعرض العصابتين الطاقيتين.

من المهم دراسة العوامل التي تؤثر في العرض الطاقي المطلق لعُصابةٍ من العُصابات الطاقية. يُعطى هذا العرض في نموذج البعد الواحد، الذي ندرسه في هذه الفقرة، بالكمية $2\gamma_s$، حيث

- ✓ ينشأ **العامل 2** من عدد المجاورات الأقرب للذرة المعطاة؛ **وينشأ الحدّ** γ_s من تراكب التوابع الموجية والكمون.
- ✓ فالعدد التساندي Coordination Number العالي للذرات، الذي يكون متوافراً عادةً في البنى المتراصة للمعادن، يُنتج عرض عصابة طاقة كبيراً.
- ✓ لقيمة γ_s أهمية أكبر عادةً في تحديد عرض العصابة الطاقية **بسبب التناقص الشديد جداً** للتوابع الموجية عند ابتعادها عن النواة.
- ✓ فمن أجل بنية ما معطاة، **سيؤدي** تابع موجي ذّريّ ما **متوضّع بشدة بجوار النواة** إلى عُصابة طاقة أضيق بشكل ملحوظ من عُصابة الطاقة التي يؤدي إليها تابع موجي أقل توضّعاً.
- ✓ فعلى سبيل المثال: تؤدي **سوية ذرية-3d** إلى عُصابة طاقة أضيق بكثير من تلك العُصابة التي تؤدي إليها **السوية-4s**، على الرغم من أن السويات الذّريّة متشابهة جداً بالطاقة.
- ✓ ثمة حالة **حدّية** (حرجة) لتابع موجي متوضّع، تتمثل في **السوية الداخلية** (1s) **لذرة ثقيلة**: فالتوابع الموجية 1s للذرات المتجاورة لا تتراكب على الإطلاق في الجسم الصلب **والعصابة-1s الناتجة**، تمتلك عرضاً قريباً من الصفر، أي أنها مستوية بالكامل؛ إذْ تحتفظ بسلوكها الذّريّ المتوضّع.

وأخيراً، من المهم بمكان تمثيل توابع بلوخ الموجية (6-54) في نموذج الترابط الشديد. يُظهر الشكل (6-11) موجات بلوخ هذه من أجل العصابتين-s و -p عند النقطة $k=0$ وحدّ منطقة بريلوان، $k=\pi/a$:

- ▪ **فمن أجل** $k=0$، كل تابع من التوابع الأُسيّة في المعادلة (6-54) **يساوي للواحد** وعندها يُمثِّل التابع الموجي $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ ببساطة مجموعاً، يجري على المدارات في جميع عقد الشبكة البلّورية. وهذا يؤدي، من أجل المدرارات-s إلى ازدياد الكثافة الاحتمالية بين الذرات، أي إلى نوع من "**المدار الجزيئي الرابط**".
- ▪ **أمّا من أجل** $k=\pi/a$، فتؤدي التوابع الأُسيّة في المعادلة (6-54) **إلى تغيّر الإشارة**، عند الانتقال بمقدار ثابت شبكة واحد، a، على طول السلسلة الذّريّة. وهذا ما تمّ الإشارة إليه في الشكل (6-11)



الشكل (6-11): عصابات طاقة من أجل جسم صلب وحيد البعد تمّ حسابها بوساطة تقريب الربط المحكم. تُظهر الجهة اليمنى توابع بلوخ الموجية من أجل العصابة-s والعصابة-p عند $k=0$ و $k=\pi/a$. ترمز النقط السوداء إلى موقع النوى واللون الرمادي المختلف التباين يرمز إلى إشارة التابع الموجي.

بتوابع موجية متوضِّعة (موجبة) بلون رمادي فاتح و(**سالبة**) بلون رمادي **غامق**. وهذا بدوره، **يؤدي لاستنفاد الكثافة الاحتمالية بين الذرات**، أي إلى "مدار جزيئي **ضعيف الترابط** *Anti-bonding*".

وهذا ما يتفق مع الطاقات في العصابة-s:

- ✓ فالطاقة من أجل الحالة الرابطة عند $k=0$ منخفضة؛
- ✓ والطاقة من أجل الحالة غير الرابطة عند $k=\pi/a$ عالية.

والعكس صحيح من أجل العصابة-p:

فإشارة التابع الموجي-p الذرّيّ تتغيّر عند الانقلاب المكاني (تملك قطبية فردية)، ولهذا السبب،

- ✓ تؤدي إضافة المدارات-p المتفقة في الطَّور من أجل $k=0$ إلى حالة عكسية الترابط،
- ✓ أمّا إضافتها مع تغيّر الإشارة في كل عقدة أخرى، من أجل $k=\pi/a$، فتؤدي إلى حالة رابطة.

وهذا ما يتفق مرةً أخرى مع التبدد المحسوب. يمكننا أيضاً ربط هذا التوصيف بتفسير التوابع الموجية، في نموذج الإلكترونات شبه– الحرة، بجوار حدّ منطقة بريلوان في الشكل (6-10).

- يوافق التابع الموجي $\psi(+)$ الذي يمتلك الطاقة الأخفض، عند النقطة $k=\pi/a$، التابع الموجي s، الذي يتفق هنا مع تراكم الكثافة الاحتمالية بالقرب من القلوب الأيونية.
- أمّا التابع الموجي $\psi(-)$ الذي يؤدي إلى الحالة الطاقية الأعلى عندما $k=\pi/a$، ذات عقدة الكثافة الاحتمالية عند القلوب الأيونية **فيوافق** التابع الموجي p، الذي يمتلك عقدةً هنا أيضاً.

- تجدر الإشارة إلى أن هذه المقارنة هي مقارنة وصفية أي أن الكثافات الاحتمالية الإجمالية في نموذج الإلكترونات شبه- الحرة، وفي نموذج الترابط الشديد ليست نفسها على الإطلاق، ومع ذلك، فإن هذه المقارنة توضح تناغم بعض التفاصيل في كلا التوصيفين.

محاضرات فيزياء الحالة الصلبة