كلية العلوم

القسم : الفيزياء

السنة : الرابعة

المادة : حالة صلبة٢

المحاضرة : الخلمسة/نظري/

{{ مكتبة A to Z }}

Facebook Group : مكتبة A to Z

2026

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

6-6 العُصابات الطاقية في الأجسام الصلبة الحقيقية Energy Bands in Real solids

أصبح بمقدورنا الآن فهم بنية العصابات الطاقية الإلكترونية في المواد الصلبة الحقيقة وبالأبعاد الثلاثة، وصفياً على الأقل. لقد عرضنا في نماذج البعد– الواحد التي قمنا بدراستها طريقتين مختلفتيين لإدخال الكمون الدوريّ بدوريّة الشبيكة البلّورية. في البداية، انطلقنا من **الإلكترونات الحرة** وأدخلنا الكمون كاضطرابٍ ضعيفٍ، مؤكدين أن وجهة النظر هذه مناسبة، على وجه الخصوص، من أجل الإلكترونات شبه– الحرة في الفلزات. ثمَّ حصلنا على بنية عصابة طاقة مشابهة جداً من خلال بناء توابع بلوخ الموجية من مدارات ذريّة متوضّعة (**نموذج الربط المحكم**)، وهي طريقة تبيَّن أنها أكثر من طبيعية من أجل الأجسام الصلبة المترابطة تساهمياً والتي تكون فيها الحالات الطاقية أكثر تموضعاً؛ ولكن يجب أن نتذكر دوماً أن كلتا الطريقتين مجرد نموذجين مبسطين جداً يسمحان لنا بفهم أصل **بنية عُصابات الطاقة** *Band Structure*، وبشكلاهما المُحسَّن والدقيق، يجب أن يوافقا التوقعات ذاتها بالنسبة لبنية عُصابات الطاقة في نهاية المطاف.

لقد رأينا في كلا **الوصفين** أن للكمون الدوريّ بدوريّة الشبيكة البلّورية **تأثيران رئيسان**؛

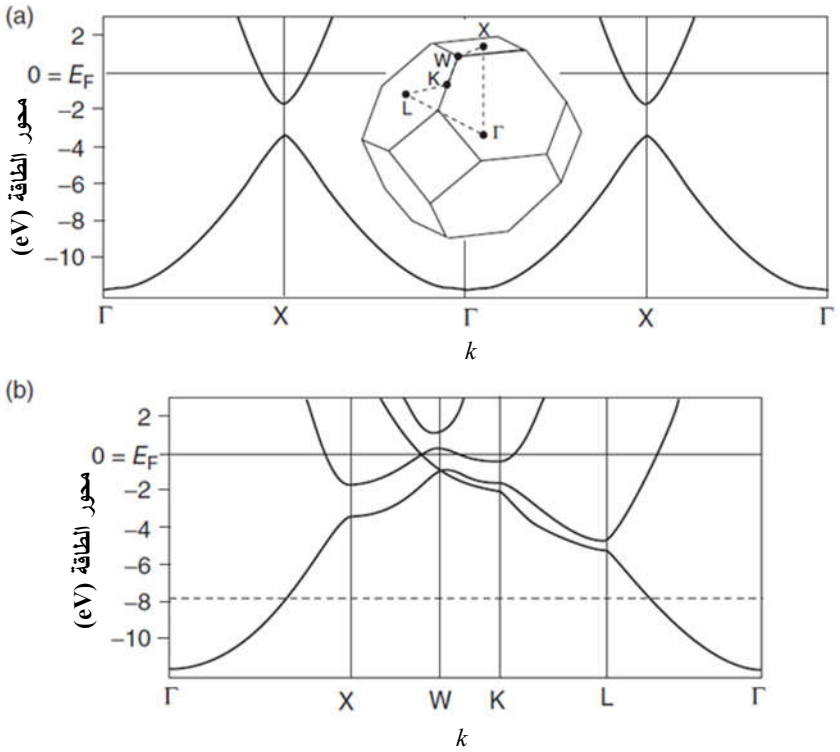
- **يكمن التأثير الأول في التناظر** الحاصل في عُصابات الطاقة (6-41)، $E(\vec{k}+\vec{G}')=E(\vec{k})$ ، الذي يسمح بجعل دراستنا **للتبدد** تقتصر على منطقة بريلوان الأولى **فقط** بفضل **تطابقه** حول النقاط الأخرى في الشبيكة المقلوبة. كما أن هذا التناظر **يُسبب انعكاساً** لعصابات الطاقة عند حدّود منطقة بريلوان.
- **والتأثير الثاني يكمن** في **اتساعات** الفجوات الطاقية بين العصابات المنطبقة في نموذج الإلكترون الحر.

يوضح الشكل (6-12) عصابات الطاقة للألمينيوم الذي يُعدُّ فلزاً بسيطاً بالإلكترونات **s** والإلكترونات **p** فقط. إذْ تبقى الحالة هنا مشابهة جداً لحالة الإلكترون الحر:

لندرس في البداية التبدد **في اتجاه واحد فقط**، كما في الشكل (6-12a)، حيث يظهر التبدد **من النقطة** Γ **(مركز منطقة بريلوان الأولى) إلى النقطة** X عند حدّ منطقة بريلوان ويدخل إلى المنطقة اللاحقة (الثانية)، بالغاً النقطة Γ مرةً أخرى، وهكذا دواليك.

- ✓ هناك فجوة طاقة تفتح عند النقطة X
- ✓ وفوق الفجوة ثمة **عصابة** طاقة أخرى **تتبدد– عكسياً** في اتجاه النقطة Γ.
- ✓ يمكن بسهولة الإقرار بأن هذه **العصابة** هي بمثابة عصابة نشأت من مركز منطقة بريلوان **التالية**، كما في النموذج أحادي– البعد، في الشكل (6-9).
- ✓ يكمن الفارق بين الشكلين بالتدريج الطاقي فقط؛ فقد اخترنا الطاقة الصفرية في النموذج أحادي– البعد لتكون قاعاً للعصابة الطاقية. ويبدو أن هذا الاختيار يُعدُّ طبيعياً، لأنه يوافق الطاقة الحركية الصفرية للإلكترونات. ولكن لنا كامل الحرية في اختيار مبدأ تدريج الطاقة: في الفلزات، وفي معظم الأحيان يجري اختيار طاقة فيرمي؛ كمبدأ لحساب الطاقة، $E=0$ ، وهذا الخيار تمّ اعتماده في الشكل (6-12).

يمكن تعيين بنية عصابات الطاقة للأجسام الصلبة تجريبياً باستخدام **مطيافية الإصدار– الفوتوني بمقدرة فاصلة زاوية** (ARPS) *Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy*:



الشكل (6-12): (a) عصابات الطاقة الإلكترونية في الألمنيوم على طول الاتجاه Γ-X فقط. يُظهر الشكل المُدرج في الرسم منطقة بريلوان الأولى؛ Al: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$

(b) عصابات الطاقة في الاتجاهات المختلفة وفق المسار المتقطع بين النقاط العالية التناظر لمنطقة بريلوان.

يُمثِّل المستقيم الأفقي المتقطع طاقة فيرمي الصورية من أجل الألمنيوم بذات البنية ولكن بإلكترون واحد فقط وليس ثلاثة.

تتعرّض العيّنة في هذه التجربة لفوتونات **أحادية اللون– فوق بنفسجية**، فتصدر إلكترونات وفقاً **للمفعول الكهرضوئي** *Photoelectric Effect*. **تُصنَّف** الإلكترونات **الصادرة** تبعاً لمتجهاتها الموجية– $\vec{k}$ وطاقاتها، ومن هنا، يمكن العودة للتعامل مع $\vec{k}$ والطاقة داخل العيّنة، أي العودة إلى بنية عصابات الطاقة.

يُظهر الشكل (6-12b) العصابات الطاقية للألمينيوم Al في **اتجاهات تناظر– عالية** مختلفة في منطقة بريلوان الأولى؛ لا تُعرض عادةً الاستمرارية في مناطق بريلوان اللاحقة، كما في (6-12a)، تفادياً للحشو. **يمكننا إدراك الانحناء العكسي** لعصابات الطاقة من المناطق المجاورة واتساع الفجوات الطاقية عند حدود مناطق بريلوان. في الواقع، يمكن وصف بنية عصابات الطاقة للألمينيوم في نموذج الإلكترونات شبه– الحرة بشكل جيد جداً، إلاَّ أنها تبدو معقدةً بسبب العصابات التي تظهر من المناطق المجاورة في الأبعاد الثلاثة:

- العصابات **ممتلئة** حتى طاقة فيرمي،
- ويوجد الكثير من عصابات الطاقة **التي تتقاطع** مع طاقة فيرمي، مما يعني أن الإلكترونات في الحالات المشغولة والواقعة تحت طاقة فيرمي تماماً بمقدورها التهيّج إلى حالات ضمن العصابة نفسها، وتقع فوق طاقة فيرمي تماماً. وبهذه الطريقة، تستطيع هذه الإلكترونات **المشاركة في نقل** التيارين الكهربائي والحراري.

- **عندما يمتلك الألمنيوم ثلاثة إلكترونات في كل وحدة خلية**، فإنَّ هذه الإلكترونات تملأ عصابات الطاقة، مما يؤدي إلى فصل طاقة فيرمي عن قاع عصابة الطاقة بنحو 12 eV؛
- والآن، **ماذا سيحدث إذا حوَت** كل وحدة خلية **إلكترون واحد فقط**؟. الجواب، تُصبح طاقة فيرمي في موقع أخفض بكثير من الموقع السابق، عند الخط المتقطع تقريباً في الشكل (12b-6). وفي هذه الحالة، يُصبح الوضع مشابهاً أكثر للوضع في نموذج الإلكترون– الحر: إذْ تتقاطع العصابات مع طاقة فيرمي عند نفس المسافة-k عن النقطة Γ في الاتجاهات كافة، ومن ثمَّ ستكوِّن الحالات الإلكترونية عند طاقة فيرمي كرةً في الفراغ-k. وهذا ما يحصل تماماً في حالة نموذج الإلكترونات– الحرة.

نستطيع العودة الآن إلى السؤال الأولي الذي طُرح في مستهل هذا الفصل: ما الشيء الذي يصف الفلز ولا يصف نصف الناقل؟. **يمكننا تعريف الفلز**، استناداً إلى ما ذُكر أعلاه، **كجسم صلب تتقاطع عصابات الطاقة فيه مع طاقة فيرمي، بحيث يمكن لطاقة الإلكترونات أن تزداد في هذه العصابات بمقدار صغير جداً وتُصبح إلكترونات ناقلية**. هل يوافق هذا التعريف بنية عصابات الطاقة لأنصاف النواقل والعوازل النموذجية؟.

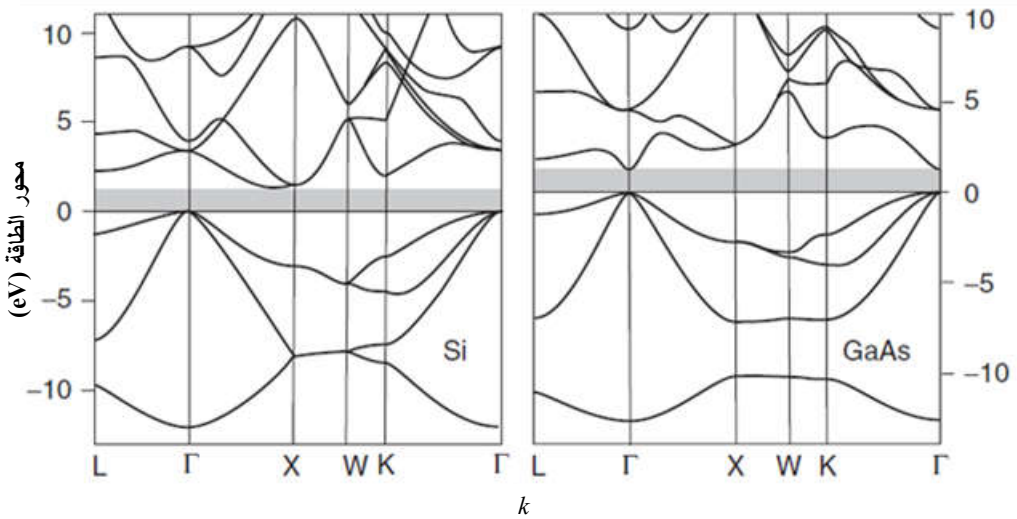
لمعرفة الجواب، نناقش بنية عصابات الطاقة لبلّورتي السيلكون **Si** وزرنيخيد الغاليوم **GaAs** في الشكل (13-6): كلتا البنيتين تمتلكان ذات الشكل لمنطقة بريلوان، كما في Al حيث تبدو عصابات الطاقة لمثل هذه المواد أكثر تعقيداً من تلك من أجل الإلكترونات شبه– الحرة أو الألمنيوم، ولكن ما زِلنا نُدرك ونُميِّز بعض السمات المميزة.

→ فمن أجل الطاقات المنخفضة جداً **تبقى** عصابات الطاقة **تأخذ** شكلاً **مشابهاً** للقطوع المكافئة؛

→ كما **يمكن توصيف اتساعات** الفجوات الطاقية عند حدود مناطق بريلوان **والعصابات** ذات الانحناء العكسي.

→ غير أن **البنية الإلكترونية لكلتا المادتين**، تختلف عن البنية الإلكترونية لـ Al **بنقطتين مهمتين**:

✓ تكمن الأولى في وجود **فجوة طاقة مُطْلقة**، تُميِّزها الساحة الرمادية في الشكل. تعني كلمة **مُطْلقة**



الشكل (13-6): (a) عصابات الطاقة الإلكترونية من أجل Si و GaAs. تمتلك هاتان المادتان نفس منطقة بريلوان التي يمتلكها Al (راجع الشكل 12-6). عصابات الطاقة أسفل الشريط الرمادي ممتلئة تماماً والعصابات الواقعة فوقه فارغة تماماً في درجة الصفر المطلق. تُمثِّل المنطقة الرمادية فجوة طاقةٍ مطلقة في البنية الإلكترونية.

"*Absolute*" أن الفجوة ليست مجرد فاصل طاقة يظهر عند حدّ منطقة بريلوان وحسب، بل فجوة طاقة (**المنطقة المحظورة**) تظهر **في كامل** منطقة بريلوان. إذْ لا توجد حالات طاقية في المناطق الرمادية أياً يكن المتجه الموجي، $\vec{k}$.

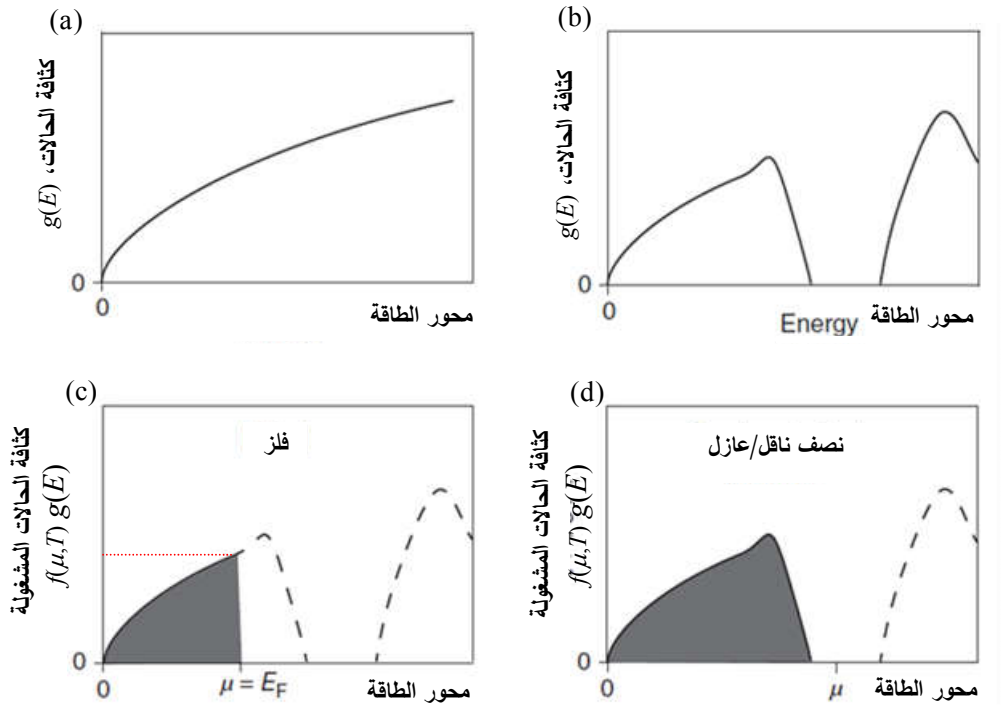
- ✓ والاختلاف المميز الثاني عن للألمنيوم Al يظهر عند ملء الحالات بالإلكترونات المتاحة: **فعند انشغال الحالات** وفقاً لمبدأ باولي، تمتلئ العصابات الواقعة تحت المنطقة المحظورة الرمادية بشكلٍ كاملٍ، **ولا يتبقى إلكترونات** من أجل العصابات الواقعة **فوق** المنطقة المحظورة.
- ✓ **ويبقى موقع طاقة فيرمي** أو بدقة أكثر للكمون الكيميائي، مثار بحثٍ؛ وفي كل الأحوال، يمكننا الآن القول إن ذلك سيكون **في مكان ما داخل المنطقة المحظورة**.
- ✓ يمكن وضع صفر تدريج الطاقة بطريقة اختيارية، ومن أجل أنصاف النواقل يوضع عادةً عند سقف الحالات المشغولة بالإلكترونات.
- ✓ يمكننا أن نؤكد وبثقة أن **هذه المواد لا تُعدُّ فلزاتٍ** في سياق التعريف المذكور أعلاه: فهناك **لا توجد** عصابات طاقة **تقطع** طاقة فيرمي ولا توجد إلكترونات يمكن لطاقاتها أن تزداد بكمية ليست كبيرة لكي تشارك في الناقلية الكهربائية.
- ✓ في الواقع، إذا وجب أن تزداد طاقة إلكترون، فيجب أن تزداد، على الأقل، بكمية توافق عرض فجوة الطاقة.

ثمة تصوّر أكثر بساطة للفارق بين الفلزات والعوازل/ أنصاف النواقل، يبرز عند النظر في **كثافة حالاتها** *Density of states*، كما في الشكل (14a-6)؛ أي الفارق بينها من وجهة نظر $g(E)$:

- فمن أجل **الإلكترونات الحرة** قمنا بحساب كثافة الحالات ووجدنا أنها تتناسب **طردياً مع الجذر التربيعي لطاقتها**، $g(E)\sim\sqrt{E}$، كما يوضح الشكل (14a-6)؛
- أمَّا من أجل نموذج **الإلكترونات شبه– الحرة** أو نموذج **الربط المُحكم** للإلكترونات (شديدة الارتباط)، فيجب أن تكون كثافة الحالات أكثر تعقيداً مما هي عليه في الشكل (14a-6). **إذْ تبرز فجوات طاقة** في بنية عصابات الطاقة عند حدود منطقة بريلوان، يمكن أن تؤدي (ولكن ليس بالضرورة) إلى فجوات مطلقة في عصابات الطاقة في الحالة المثالية الخالية من العيوب.
- والشكل (14b-6) يوضح كثافة حالات أكثر تعقيداً من سابقاتها بفجوة طاقة مطلقة.

والآن إنَّ الفارق بين **فلزٍ** و**نصف الناقلٍ/عازلٍ** يتعلق بكمية الإلكترونات الموجودة لدينا **لتملأ** هذه الحالات.

- ✓ فإذا وقعت السوية الطاقية الأعلى التي **نملؤها** بالإلكترونات عند كثافة حالات محدودة القيمة، فإن الجسم الصلب يُعدُّ **فلزاً**، كما في الشكل (14c-6)؛
- ✓ وإذا تمكَّنا فقط من **ملء** الحالات حتى الفجوة الطاقية، فالجسم الصلب كان **عازلاً/نصف ناقلٍ**، كما يوضح الشكل (14d-6).
- ✓ لنلاحظ أنه إلى الآن لم نتمكن من تحديد الفارق بين نصف الناقل والعازل؛ وهذا ما سندرسه لاحقاً.



الشكل (6-14): يوضح الاختلافات بين الفلزات وأنصاف النواقل/عوازل. (a) كثافة الحالات في نموذج الإلكترون الحر؛ (b) كثافة حالات كيفية في نموذج الإلكترون شبه الحر حيث تظهر فجوة طاقة مطلقة. (c) كثافة حالات مشغولة (الساحة الرمادية) من أجل فلزٍ في درجة الصفر المطلق: يوافق الكمون الكيميائي (أو طاقة فيرمي) كثافة حالات محدودة. (d) ذات المشهد في (c) من أجل نصف ناقل/عازل حيث يقع الكمون الكيميائي في منطقة تلاشي كثافة الحالات.

هل بمقدورنا التنبؤ فيما إذا كانت المادة فلزاً، أمّ نصف ناقلٍ، أمّ عازلاً انطلاقاً من معرفتنا ببنيتها البلّورية *Crystalline Structure*؟. يجب أن تكون المادة وفقاً للتصوّر الذي درسناه هنا فلزاً إذا امتلأت عصابة الطاقة بالإلكترونات جزئياً فقط؛ والآن **ما هي كمية العُصابات** الطاقية التي بمقدورنا **ملؤها** من أجل عدد مُعطى لإلكترونات التكافؤ **في كل وحدة خليّة**؟. يبدو أنه يمكننا أن نضع في عصابة الطاقة الواحدة إلكترونين في كل وحدة خليّة؛ إلكترون واحد من أجل كل اتجاه دوران (اتجاه سبين). نلاحظ، أن هذه النتيجة تتفق تماماً مع التصوّر البسيط جداً للترابط الذي درسناه من أجل عنقودٍ Cluster من ذرات الـ Na في الفقرة 6-1: يوجد الكثير من الحالات في العصابة الطاقية بقدر ما يوجد في وحدات الخلايا (أو الذرات في العنقود) وكل حالة يمكن أن تتسع لإلكترونين؛ ومن ثمَّ نتوقع أن يكون لدينا مادة **بعدد فردي** من الإلكترونات في كل وحدة خليّة (مثل Na) لكي تكون فلزاً. هناك مثال آخر هو **Al الذي يتبلّور وفق البنية المكعبة متمركزة الوجوه FCC**:

- تمتلك البنية هنا ذرة واحدة في كل وحدة خلية والـ Al يمتلك ثلاث إلكترونات تكافؤ في كل ذرة،
- ومن ثمَّ يوجد ثلاث إلكترونات تكافؤ في كل وحدة خلية؛ بمقدور إلكترونان منهما **ملء** عصابة واحدة بشكلٍ كاملٍ، والإلكترون المتبقي **يملأ** عصابة طاقة أخرى حتى منتصفها.
- وهكذا نتوقع أن يكون الـ Al فلزاً، وبالطبع هذا صحيح ويتفق مع الشكل (6-12) أيضاً.

- يُظهر الشكل (6-12) أيضاً موضع طاقة فيرمي من أجل الحالة الصورية للألمينيوم Al المشغولة بإلكترون تكافؤ واحد فقط، وتبعاً للخلاصة ذاتها المذكورة أعلاه، يجب أن يكون هذا النوع من الألمنيوم فلزاً أيضاً.
- ولكن، لا بد من الإشارة إلى أن العكس ليس صحيحاً: فالعدد الزوجي من إلكترونات التكافؤ في كل وحدة خلية لا يستوجب أن تكون المادة نصف ناقلة/عازلة. وسبب ذلك، يكمن في إمكانية توزّع الإلكترونات في عصابات مختلفة في البنية العصابية– **ثلاثية البعد**.

→ فمثلاً يمكن لإلكترونين في كل وحدة خلية أن يقعا إمَّا في عُصابة واحدة ممتلئة تماماً، مما يؤدي إلى الحصول على نصف ناقل/ عازل،

→ وإمَّا في عُصابتين مختلفتين، متراكبتين طاقياً؛ ومن شأن الحالة الأخيرة أن تؤدي إلى عُصابتين ممتلئتين جزئياً، ومن ثمَّ الحصول على فلزٍ، بصرف النظر عن العدد الزوجي للإلكترونات.

يمكننا استخدام حالة **الغرافين** *Graphene* لتوضيح هذه الأفكار لاحقاً، وسنرى أيضاً أن **الغرافين** يمتلك بعض الخصائص الإلكترونية الخاصة جداً، واضعةً **إياه** حداً فاصلاً ما بين الفلز والعازل.

فالشكل (6-15) **يوضح البنية الترابطية والإلكترونية للغرافين:**

- يمتلك الكربون **أربعة إلكترونات تكافؤ** (اثنان 2s واثنان 2p)، ويمكن بلوغ الترابط في بنية "قرص العسل" Honeycomb للغرافين (راجع الشكل (7a-1)) بصورة رئيسة بعملية تهجينٍ sp^2 بين الحالات s و $p_{x,y}$ لتشكيل روابط σ (سيغما) قوية، والمدارات p_z المتبقية، تخرج من المستوي وتُشكِّلُ روابط π.
- يوضح الشكلان (6-15a) و (6-15b) الروابط σ و π على الترتيب، فضلاً عن أن الشكل (6-15c) يوضح العُصابات الطاقة الموافقة لها.

لنرى فيما إذا كانت بنية عُصابات الطاقة هذه متوافقة مع مبادئ العد الإلكتروني المذكورة أعلاه:

→ **كل ذرة كربون** تُسهم في الروابط σ **بثلاث إلكترونات** وفي الرابطة π بإلكترون واحد.

→ يمتلك الغرافين ذرتين **في كل وحدة خلية**، أي يمتلك ما مجموعه **ستة إلكترونات** σ **وإلكترونين** π.

→ بمقدور الإلكترونات σ **الستة** أن تملأ **ثلاث** عصابات بشكلٍ كاملٍ (إلكترونان في كل عصابة) **والإلكترونان** π **عصابة واحدة**؛ يمكن رؤية ذلك في بنية عصابات الطاقة أيضاً.

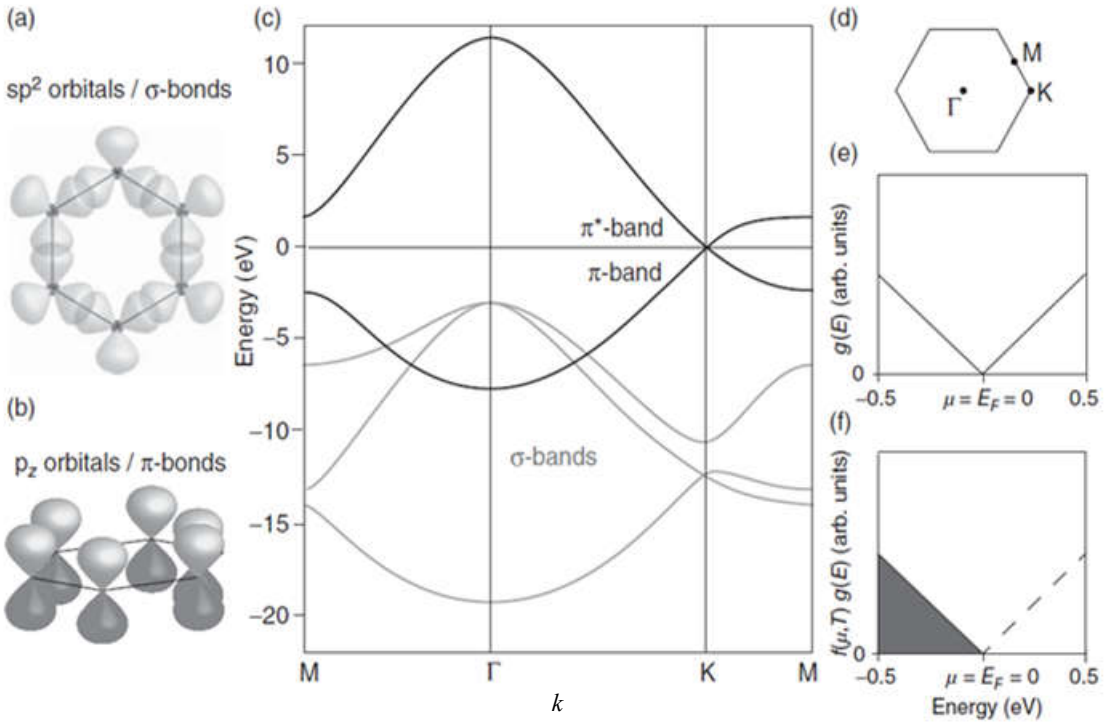
→ وبالنتيجة لدينا أربع **عصابات مشغولة تماماً**، ومن ثمَّ يمكن للغرافين أن يكون إمَّا عازلاً وإمَّا نصف ناقلٍ.

→ ولكن الشيء الغريب والملفت للانتباه فيما خصَّ الغرافين يكمن في **عدم امتلاكه لفجوة طاقية** بين العصابة π المشغولة والعصابة π^* الشاغرة.

→ **تُصادف** هذه العصابات في **ركن المضَّلع– السداسي** تماماً، منطقة بريلوان ثنائية– البعد، حيث يسمى هذا الركن النقطة K (كَبّا)، راجع الشكل (6-15d).

→ يوضح الشكلان (6-15e) و (6-15f) كثافة الحالات وكثافة الحالات المشغولة بجوار طاقة فيرمي، E_F، على الترتيب:

❖ فمن أجل الطاقات القريبة كفايةً من E_F، **يكون التبدد** لكل من العُصابات π و π^* **خطّياً**، وإلى جانب حقيقة أن الغرافين ثنائي– البعد، نحصل على كثافة حالات تُعدُّ خطّيّةً كتابعٍ للطاقة.



الشكل (6-15): منشأ عصابات الطاقة الإلكترونية من أجل الغرافين. (a) تؤدي المدارات الهجينة sp^2 إلى تشكل الروابط σ. (b) تؤدي المدارات p_z إلى تشكل الروابط π. (c) بنية عصابات الطاقة المأخوذة من Kogan و Nazarov (2012) (ليست كل العصابات الطاقية اللامشغولة موجودة هنا). (d) منطقة بريلوان الأولى ثنائية البعد. (e) كثافة الحالات في الجوار المباشر لطاقة فيرمي. (f) كثافة الحالات المشغولة في درجة الصفر المطلق (الساحة الرمادية).

- تؤول هنا كثافة الحالات عند طاقة فيرمي، E_F، إلى الصفر تماماً، غير أنه لا توجد فجوة طاقية.
- إذا عرَّفنا فلزاً بأنه مادة يقع الكمون الكيميائي (أو طاقة فيرمي) فيها عند طاقةٍ حيث تكون كثافة الحالات محدودةً، فإن **الغرافين ليس فلزاً**.
- ومن جهة أخرى، لا يمتلك الغرافين فجوة طاقية (منطقة محظورة) بين الحالات الطاقية الأعلى المشغولة والحالات الطاقية الأدنى الشاغرة، وهو ما يمكن إيجاده في حالة عازلٍ/ نصف ناقلٍ.
- ومن ثمَّ يسمى الغرافين عادةً إمَّا **نصف فلزٍ** وإمَّا نصف ناقلٍ بفجوة طاقية صفرية.

7-6 خصائص الناقلية الكهربائية Transport Properties

وأخيراً وصلنا إلى فقرة وصف الناقلية الكهربائية في نموذج ميكانيك الكم، حيث سنقْصُر المناقشة على نقل الشحنة الكهربائية؛ يجري نقل الحرارة عن طريق الإلكترونات بطريقة مشابهة ولدينا بعض التصوّر عن علاقة الناقلية الكهربائية والحرارية من خلال قانون ويدمان– فرانس Wiedemann-Franz. إن خصائص النقل الكهربائي للأجسام الصلبة، تُعدُّ مسألة غايةً في التعقيد، وهنا سنقدِّم بعض الأفكار الأساسية فقط عما يحدث فيها. يمكن عرض هذه الأفكار من خلال دراسة جسم صلب أحادي– البعد.

نرى عند التدقيق في موجة بلوخ (6-26) أنها تصف موجةً مستويةً معدَّلةً تمتد على (تنتشر في) كامل البلّورة، بشكلٍ مشابهٍ جداً لحركة إلكترون حر. في الواقع، **إدخال الكمون الدوريّ للأيونات في معادلة شرودنغر لا يؤدي إلى أي تبعثرٍ، ما يُعدُّ نتيجةً غايةً في الأهميَّة:** عند مناقشة أوجه القصور في نموذج درودي تساءلنا، كيف يمكن للإلكترونات أن تمتلك طول مسارٍ حرٍ وسطيٍ طويلٍ جداً في **درجات الحرارة المنخفضة** والانسلال من بين كل الأيونات في خلافٍ صريحٍ لفرضيات درودي. والجواب يكمن في أنَّ **إلكترون بلوخ لا يتبعثّر** على أيونات الشبيكة البلّورية على الإطلاق، ومن ثمَّ يجب أن تكون الناقلية الكهربائية للفلزات البلّورية المثالية لانهائيةً[1].

من الواضح أن الواقع ليس كذلك، إذْ لا بد من آلية ما لتبعثّر إلكترونات بلوخ أيضاً. **لنفرض** ببساطة **وجود بعض التبعثـر** المؤدي لـزمن استرخاءٍ، τ، محدودٍ. نلاحظ أن الحالـة مشابهة جداً لانتقال الحرارة في بلورة توافقية: **فالفونونات** التي تُعدُّ رزماً من موجات توافقية، بمقدورها الانتشار بهدوءٍ من دون مُبعثرات في البلّورة وعلينا أن نتوسَّل توافر بعض المفاعيل؛ كالعيوب مثلاً، بغرض الحصول على ناقلية حرارية محدودة.

عند دراسة ارتحال إلكترونٍ في بلّورةٍ لم تكن موجات بلوخ تُعدُّ تصوّراً ملائماً لذلك، لأنها تمتد بالتحديد على كامل الجسم الصلب. ونستخدم التقريب ذاته لوصف جسيمٍ متوضّعٍ؛ كما في حالة اهتزازات الشبيكة البلّورية: ندرس إلكتروناً يرتحل في بلورة؛ كرزمة موجية، أي كتراكبٍ لموجات بلوخ في مجال محددٍ Δk قريبٍ من k المعني (قيد الدراسة)، تمتلك "جسيمة" كهذه سرعة مجموعة، υ_g، تُعطى بالعلاقة (6-47)، وعندها نصل إلى توصيفٍ شبه– تقليديٍ للناقلية الكهربائية.

لندرس جسيمةً شحنتها $-e$ تتحرك بسرعة مجموعة υ_g في حقل كهربائي، E. بعد فترة قصيرة من الزمن، dt، تزداد الطاقة الحركية (القوة في الانتقال) للجسيمة بمقدار:

$$dE = \left(-e\mathrm{E}\right)\left(\upsilon_g dt\right). \tag{63-6}$$

ومن جهة أخرى،

$$\frac{dE}{dt} = \frac{dE}{dk}\frac{dk}{dt} = \left(-e\mathrm{E}\right)\upsilon_g \equiv \left(-e\mathrm{E}\right)\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}. \tag{64-6}$$

حيث أخذنا بالحسبان العلاقة (6-47)، $\upsilon_g = dE(k)/\hbar\, dk$، ومن ثمَّ نجد:

$$\hbar\frac{dk}{dt} = -e\mathrm{E}. \tag{65-6}$$

وهذه المسألة موثوقة ومعقولة تماماً من أجل حالة الإلكترونات الحرة حيث تُمثِّل الكمية $p = \hbar k$ اندفاعاً، ولكن رأينا أنَّ $\hbar k$ ليس اندفاعاً لإلكترونات بلوخ، ومع ذلك تبقى المسألة صحيحة. وهذا يعني أن حقلاً كهربائياً يجعل

[1] فعلياً، هذا ليس صحيحاً تماماً؛ إذْ يمكن رصد ما يسمى **اهتزازات بلوخ** *Bloch Oscillations* في فلزٍ لا يحدث فيه تبعثر.

إلكترونات بلوخ تُغيّر متجهها الموجي، k، حيث يُعطى معدَّل تغيرها بدلالة شدة الحقل الكهربائي. ويوضح الشكلان (6-16a,b) هذه الحالة من أجل عصابة طاقية ممتلئة جزئياً.

- توزّع الإلكترونات يكون متناظراً عند عدم تطبيق حقل كهربائي،
- وعند وصله، ستُغيّر الإلكترونات عددها الموجي، k، بمقدار dk بعد فترة وجيزة من الزمن، dt، ما يجعل توزّعها أقل تناظرٍ، كما في الشكل (6-16b).
- وتفترض المعادلة (6-65) أن توزّع الإلكترونات سيُصبح لامتناظراً بصورة متزايدة مع الزمن. ولكن، في حقيقية الأمر، ثمة آلية تبعثرٍ غير مرنٍ ستحدث بزمن استرخاءٍ، τ، تمنع حدوث ذلك. تأتي مثل هذه العملية، التي يوضحها الشكل (6-16b)، بالإلكترونات المتسارعة القريبة من k_F إلى حالات شاغرة توافق طاقة أدنى، قريبة من $-k_F$.
- إن الجمع بين تسارع الإلكترونات تحت تأثير الحقل الكهربائي وتبعثرها غير المرن يؤدي إلى حالة مستقرة، تنزاح فيها كل الإلكترونات بمقدار بضع δk. وفي معظم الحالات سيكون التغيّر δk صغيراً بالمقارنة مع أبعاد منطقة بريلوان. فضلاً عن أن التبعثر اللامرن يؤدي إلى تبددٍ طاقيٍ، ومن ثمَّ إلى مقاومةٍ محدودةٍ.

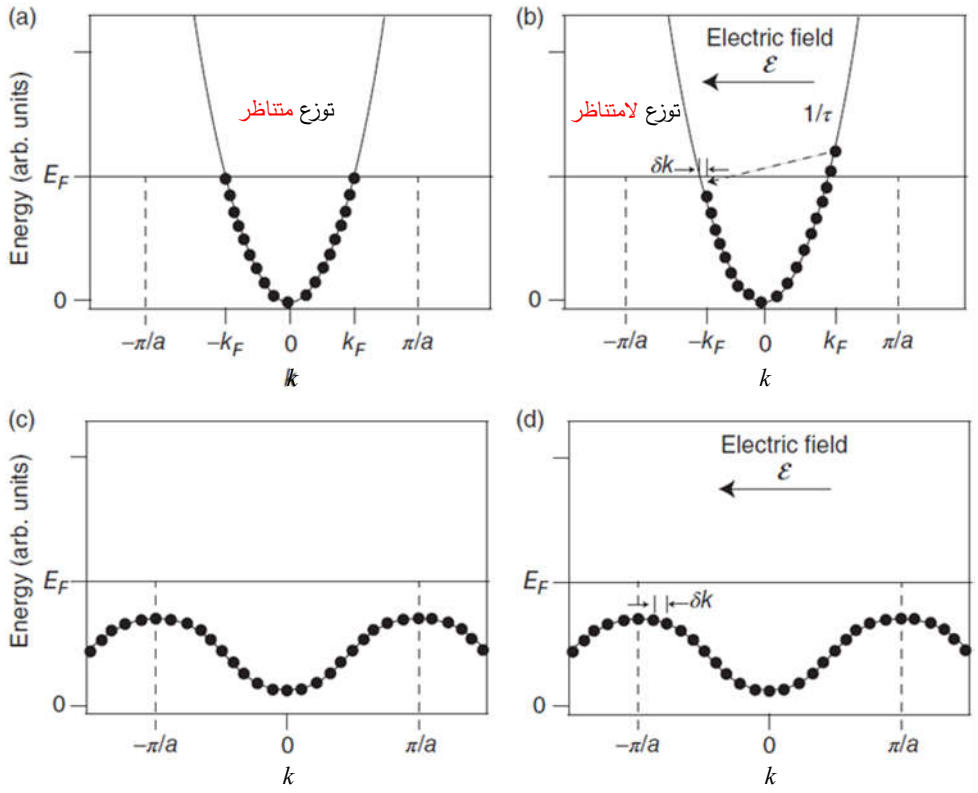
وتبعاً للعلاقة (6-47)، $\upsilon_g = dE(k)/\hbar\, dk$، **يوافق** التوزّع اللامتناظر في k توزّعاً لامتناظراً في سُرع المجموعة للإلكترونات أيضاً: طالما أن كامل التوزّع ينزاح بمقدار δk، فإن معظم الإلكترونات ينتهي بها المطاف في حالات كانت مشغولةً بإلكترونات أخرى من ذي قبل، ومن ثمَّ لا شيء يتغيّر.

- النقاط المهمة التي يحدث عندها التغيّر هي **فقط** تلك النقاط الواقعة بجوار طاقة فيرمي، المتقاطعة مع k_F و $-k_F$: إنَّ عدم تناظر التوزّع في الشكل (6-16b) يعني وجود إلكترونات بسرعة مجموعة من جهة اليمين أكثر منها من جهة اليسار، أي أنه يحدث جريان لتيارٍ كهربائيٍ. ومن الواضح، أن حجم التيار يتعلق بسرعة المجموعة للإلكترونات عند طاقة فيرمي.

يوضح الشكلان (6-16c) و (6-16d) حالة إلكترونات في عصابة طاقة ممتلئة:

- حالما يُطبَّق الحقل الكهربائي، تنزاح هذه الإلكترونات بمقدار δk أيضاً، ولكن لا يُغيّر ذلك من الحالة على الإطلاق، لأن كل الإلكترونات تنتقل إلى حالاتٍ كانت مشغولةً قبل تطبيق الحقل؛
- فالعصابة الممتلئة لا تُسهم في الناقلية. ونلاحظ أن هذا الوضع ينسجم تماماً مع حقيقة أنه يمكن تفسير الكمية $\hbar k$ على أنها اندفاع لإلكترونات بلوخ.
- لقد زدنا هنا، $\hbar k$ من أجل كل الإلكترونات، ولكن من الواضح، أن الاندفاع الوسطي يبقى صفراً. ويتفق هذا التصوّر أيضاً مع تعريفنا السابق للفلزات والعوازل؛
- فكل عصابات الطاقة في العازل ممتلئة تماماً، ومن ثمَّ لا يمكن للتيار أن يعبر من خلاله.
- **هناك استثناء عجيب لهذه القاعدة يتمثل بالغرافين.** فلقد رأينا في الشكل (6-15) أنَّ **الغرافين يمتلك أربع عصابات طاقية ممتلئة**، ومن المرجَّح أن نتوقع عدم مساهماتها في الناقلية، إلاَّ أنه تبيَّن تجريبياً أن **الغرافين يُعدُّ واحداً من أفضل النواقل في درجة حرارة الغرفة**، والسبب يكمن في غياب الفجوة الطاقية بين

العصابتين π و π^*؛ إذْ بمقدور الإلكترونات الانتقال مباشرةً من العصابة π إلى العصابة π^* **لدى اكتسابها تسارعاً**.



الشكل (6-16): شكل بسيط للناقلية في فلزٍ. ترمز الدوائر السوداء للحالات الإلكترونية الممتلئة عند النقاط المسموحة k. (a) حالة من أجل عصابة ممتلئة جزئياً بدون حقل كهربائي. (b) حالة من أجل عصابة ممتلئة جزئياً بوجود حقل كهربائي؛ خلال فترة من الزمن δt تنتقل جميع الإلكترونات بمقدار δk تحت تأثير قوة الحقل الكهربائي المطبّق. ومن ثمَّ يُسبب التوزّع اللامتناظر في سرعة المجموعة الإلكترونية تياراً كهربائياً. بمقدور الإلكترونات عند k_F أن تتبعثر عكسياً نحو الحالات الأخفض الواقعة عند $-k_F$ باحتمالٍ متناسبٍ مع مقلوب زمن الاسترخاء. (c) و (d) الحالة الموافقة لعصابة ممتلئة تماماً بدون حقل كهربائي وبوجوده. تنتقل الإلكترونات فقط إلى الحالات التي كانت مشغولةً في حالة عدم وجود حقلٍ.

من المفيد جداً الجمع بين العلاقتين (6-65) **و** (6-47)، $\upsilon_g = dE(k)/\hbar\, dk$، بالشكل الآتي: لندرس تسارع إلكترونٍ يرتحل في البداية بسرعة مجموعة υ_g:

$$a = \frac{d\upsilon_g}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{d}{dt}\frac{dE(k)}{dk} = \frac{1}{\hbar}\frac{d^2E(k)}{dk^2}\frac{dk}{dt}. \qquad (66\text{-}6)$$

إذا عوَّضنا عن dk/dt بقيمتها، من العلاقة (6-65)، $\hbar dk/dt = -e\mathrm{E}$، في الحد الأخير، نجد أن:

$$a = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E(k)}{dk^2}\left(-e\mathrm{E}\right). \qquad (67\text{-}6)$$

ويبدو أن هذه العلاقة تشابه معادلة الحركة التقليدية تماماً، إذا عرَّفنا الجسيمات المدروسة هنا بأنها جسيمات تمتلك ما يسمى **بالكتلة الفعّالة** *Effective Mass*:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2E(k)}{dk^2}}. \qquad (68\text{-}6)$$

يمكن أن يبدو مفهوم **الكتلة** الفعَّالة في البداية اصطناعياً نوعاً ما، إلاَّ أنه يسمح لنا بوصف الناقلية بمعادلة حركة تقليدية، كما في نموذج درودي. الفعل الوحيد للجسم الصلب يكمن في أنه يُغيِّر الكتلة الفعَّالة للإلكترونات، ويمكن أن يكون هذا الفعل دراماتيكياً:

إذْ يمكن أن تكون الكتلة الفعَّالة أقل بكثير أو أكبر بكثير من كتلة الإلكترون الحُرّ، ويمكا أن تكون أيضاً سالبةً. بالطبع، من أجل الإلكترونات الحرة، تساوي الكتلة الفعَّالة كتلة الإلكترون، m_e. ومرةً أخرى أخرى تبدو حالة الغرافين إلى حدٍ ما عجيبةً: فبنية عصابات الطاقة في الشكل (15c-6) تُظهر أن التبدد، $E(k)$، خطّيٌّ بجوار طاقة فيرمي. إذا كان الأمر كذلك، فإن $d^2E(k)/dk^2 = 0$ ويُؤدي تطبيق التعريف المُمثَّل بالعلاقة (68-6) إلى كتلة **فعَّالة متباعدة**، التي بدورها يمكن تفترض أن الغرافين يمتلك **مقاومةً عاليةً جداً**. وفي الحالة المعاكسة سيكون الوضع ملتبساً، ويكمن سبب هذا الإلتباس في التعريف (الشرط) (68-6).

إن مفهوم الكتلة الفعَّالة يعود بنا إلى علاقة درودي من أجل الناقلية الكهربائية، $\left(\sigma = ne^2\tau/m_e\right)$، أي العلاقة (9-5). إذا عالجنا الناقلية في نموذجٍ كمومي، بدءاً من علاقة مشابهة للعلاقة (67-6)، فإن علاقة الناقلية النهائية ستأخذ نفس شكل العلاقة (9-5). لقد رأينا سابقاً أن الإلكترونات في العصابات الممتلئة جزئياً التي يجب دراستها لحساب الناقلية، هي **تلك الإلكترونات الواقعة بالقرب من طاقة فيرمي فقط**، ولهذا السبب لا بد من:

- ❖ استبدال الكتلة في العلاقة (9-5) شبه– التقليدية بالكتلة الفعَّالة عند طاقة فيرمي؛
- ❖ وزمن الاسترخاء سيكون زمن استرخاءٍ من الإلكترونات الواقعة بالقرب من طاقة فيرمي،
- ❖ والكثافة الإلكترونية، n، ستبقى ظاهرةً كما هي، ولكن ليس لأن كل الإلكترونات تُسهم في التيار؛ إذْ سبب ظهور الكثافة الإلكترونية، n، في المعادلة، يكمن في أن عدد الإلكترونات عند طاقة فيرمي يتعلق بالكثافة الإلكترونية. وهذا واضح تماماً في نموذج الإلكترون الحر حيث بُعد k_F ومن ثمَّ بُعد "كرة فيرمي" يتعلق بتركيز الإلكترونات.

لقد رأينا أن موجات بلوخ تنتشر في البلّورة الكاملة **من دون أي تبعثرٍ على الأيونات**، خلافاً للإلكترونات في نموذج درودي. ولذلك، يجب الاستمرار بمناقشة منشأ زمن الاسترخاء، τ، أي من أين يأتي، ولماذا تمتلك الفلزات مقاومة نوعية محدودة.

لقد توصلت كل التفسيرات في نهاية المطاف إلى حقيقة أن الشبيكة البلّورية ليست مثالية؛ فأكثر النواقص أهمية في درجة الحرارة المرتفعة هي اهتزازات الشبيكة البلّورية **التي تُخرِّب التناظر** الانسحابي المثالي للشبيكة البلّورية **وتُسبب** تبعثر إلكترونات بلوخ. وهذا أيضاً يعني أن فرضيتنا الأولى لتقريب بورن– أوبّنهيمر **ليست صالحةً**، ولذلك يجب أن ندرس تبعثر الإلكترونات على اهتزازات الشبيكة البلّورية. يسمى التآثر بين إلكترونات بلوخ واهتزازات الشبيكة البلّورية **التآثر الإلكتروني– الفونوني** *The Electron-Phonon Interaction*. من المرجّح أن تكون هذه العملية مهمةً إذا لم تكن درجة الحرارة منخفضةً جداً بالمقارنة مع درجة حرارة ديباي للجسم الصلب. ولكن حتى في درجات الحرارة المنخفضة جداً تتبعثر إلكترونات بلوخ بسبب وجود النواقص الأخرى المتبقية في البلّورة. **تشمل هذه النواقص كل أنواع العيوب**؛ من عيوب نقطية، وانخلاعات، وذرات شائبة، الخ.

ومع ذلك، يمكن أن تزيد الناقلية النوعية في بلورة على درجة عالية من الكمال عند درجة حرارة منخفضة بضعة مراتب (عشرات المرات) ناقليتها النوعية في درجة حرارة الغرفة.

مكتبة A to Z