



كلية العلوم

القسم : الفيزياء

السنة : الرابعة

المادة : انصاف نواقل

المحاضرة : الاولى/نظري/د. حسن سليمان

{{ مكتبة A to Z }}

مكتبة A to Z : Facebook Group

كلية العلوم

11

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

الفصل الأول

الخصائص العامة للجسيمات الدقيقة

General Properties of Micro-particles

سندرس في هذا الفصل مجموعة من المفاهيم والعلاقات الضرورية لفهم حقيقة الظواهر الفيزيائية في أنصاف النواقل والعوازل. والموضوعات المستخدمة هنا تُدرس بتفصيل أكبر في مقررات الفيزياء العامة، والميكانيك الكوانتي، والفيزياء الإحصائية، وفيزياء الحالة الصلبة، الخ.

1-1 الغاز الإلكتروني الحر Free Electron Gas:

لقد أُدخل مفهوم الغاز الإلكتروني الحر في القرن التاسع عشر بهدف وصف الناقلية الكهربائية للفلزات؛ ووفقاً للنظرية الإلكترونية التقليدية للمعادن التي طوّرها درودي Drude و لورانتس Lorentz، تُسهم كل ذرة فلز في "الحالة العامة" بالإلكترون تكافؤ واحد، وهذه الإلكترونات الحرة تُشكّل ما يسمّى بالغاز الإلكتروني الحر.

يُدرس الغاز الإلكتروني الحر بشكلٍ مشابهٍ لدراسة الغاز المثالي في الفيزياء الجزيئية، حيث **اعتبر الفيزيائيون أن الإلكترونات لا تتأثر** (أي لا تتبادل التأثير) مع بعضها بعضاً **ولا تمتلك حجماً خاصاً** بها؛ في الواقع، كل إلكترون يتنافر مع جميع إلكترونات الفلز الأخرى، ولكنه يجذب، وبأنٍ معاً، إلى نوى الذرات (الأيونات). فهذه التأثيرات تُعدّل بعضها بعضاً (تتساوى قوى التنافر مع قوى التجاذب). تشترك الإلكترونات الحرة في الحركة العشوائية (الحرارية) وتتصادم مع أيونات الشبكة البلورية.

يؤدي تصادم الإلكترونات مع أيونات الشبكة البلورية **إلى إقرار التوازن الحراري** بين الغاز الإلكتروني والشبكة البلورية؛ وفي حالة التوازن لا يحدث انتقال للطاقة لا من الغاز الإلكتروني إلى الشبكة ولا من الشبكة إلى الغاز، وعندها تكون درجة حرارة الغاز الإلكتروني مساويةً لدرجة حرارة الشبكة البلورية.

يمكن تمثيل **السرعة الوسطية للحركة الحرارية للإلكترونات** وكأنها السرعة الوسطية للحركة الحرارية لجزيئات الغاز المثالي. فمثلاً يمكن حساب السرعة الوسطية الحسابية من العلاقة الآتية:

$$v_T = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}}. \quad (1-1)$$

يمكن تقدير قيمة v_T بالشكل الآتي:

بفرض أن $T = 300 \text{ K}$ ، ووضع $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/}^\circ\text{C}$ ، و $m = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$ ، نحصل على القيمة $v_T \approx 10^5 \text{ m/s}$.

- **لقد سمحت النظرية الإلكترونية التقليدية للفلزات بالحصول على القوانين الأساسية للتيار المستمر؛ كقانون أوم، وقانون جول، وقانون جول-لينز، وأيضاً قانون وايدمان-فرانتس.**
- **غير أنها بدت متعارضة مع التجربة في موضوع السعة الحرارية للفلزات.**

→ فتبعاً للمبدأ الأساس للإحصاء التقليدي الذي تأسست عليه نظرية درودي-لورانتس، تساوي طاقة كل إلكترون حر $\frac{3}{2} k_B T$.

→ ولذلك **الطاقة الوسطية للإلكترونات الحرة** في ذرة غرامية واحدة من الفلز تساوي $E_T = \frac{3}{2} k_B T N_A$ ، حيث N_A عدد أفوغادرو.

→ وفي هذه الحالة، **تساوي السعة الحرارية للغاز الإلكتروني** عند ثبات الحجم، C_V ، من أجل ذرة غرامية واحدة من الفلز:

$$C_V = \frac{dE_T}{dT} = \frac{3}{2} k_B N_A = \frac{3}{2} R, \quad (2-1)$$

حيث R ثابت الغازات.

وبدورها **السعة الحرارية الذرية للشبكة البلورية للبلورات أحادية-الذرة** يجب أن تساوي $3R$.

→ إذن، وتبعاً للنظرية الإلكترونية التقليدية، السعة الحرارية الغرامية-الذرية العامة من أجل فلز يجب أن تساوي $\frac{9}{2} R$ ، ومن أجل **عازل** $3R$. غير أن التجربة، تؤكد قانون ديلونج وبتي الذي ينص على أن السعة الحرارية الذرية تساوي $3R$ من أجل العوازل

ومن أجل الفلزات على حدٍ سواء. ومن ثمَّ لا يؤثر وجود إلكترونات الناقلية، عملياً على السعة الحرارية للفلزات.

→ تم التخلص من التعارض المذكور أعلاه في **الميكانيك الكوانتي**، حيث **طُبِقَ** عوضاً عن إحصاء ماكسويل- بولتزمان التقليدي، **إحصاء فيرمي- ديراك** الكوانتي. وكما سنرى لاحقاً، يمكن الحصول على القانون التقليدي لتوزع ماكسويل- بولتزمان على الطاقات من قانون توزع فيرمي، شريطة أن يكون عدد الحالات الطاقية أكبر بكثير من عدد الإلكترونات. سندرس في هذه الفقرة الخصائص الأساسية للإلكترونات الحرة على فرض أن كل إلكترون منها يمتلك كتلة ثابتة، m .

2-1-1 التابعية التربيعية للطاقة الحركية للإلكترون الحر للمتجه الموجي:

The Square Wave Vector-Dependency of Kinetic Energy of the Free Electron
إذا تحركَ الإلكترون بسرعة v ، فإن زخمه (**كثية حركته**) يساوي $p = mv$ ؛ ثم إن طول موجة دوبروي لهذا الإلكترون يساوي:

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p}, \quad (3-1)$$

حيث $h = 6.6 \times 10^{-34}$ J/s ثابت بلانك.

وعلى أساس علاقة دوبروي (3-1) نكتب علاقة **الطاقة الحركية للإلكترون** الآتية:

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{h^2}{2m\lambda^2}, \quad (4-1)$$

وبإدخال العدد الموجي

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (5-1)$$

إلى العلاقة الأخيرة، نجد:

$$E(k) = \frac{h^2 k^2}{8\pi^2 m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (6-1)$$

حيث $\hbar = h/2\pi = 1.05 \times 10^{-34}$ J/s ثابت بلانك المختزل.

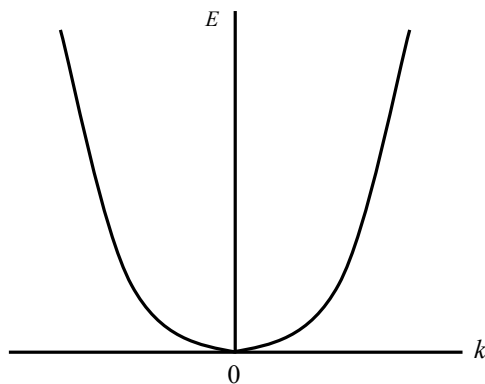
تعبّر العلاقة (6-1) عن تابعة الطاقة الحركية للإلكترون الحر للعدد الموجي، أي إنها تُعيّن **قانون التبدد** $Dispersion$ ؛ وفي الحالة الراهنة، يُعدُّ هذا القانون قطعاً مكافئاً، يوضح **الشكل (1-1)** مظهراً عاماً له. وتبعاً للعلاقتين (3-1) و (5-1) يمكن الحصول على علاقة بين القيمة المطلقة **للزخم**، p ، والعدد الموجي، k :

$$p = \hbar k . \quad (7-1)$$

وعندما تكون طويلة المتجه الموجي، \vec{k} ، مساويةً $2\pi/\lambda$ ، ويتعيّن اتجاهه ناظماً على الموجة، فإننا نحصل على المساواة:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} ,$$

مما يعني أن العلاقة (7-1) المعبّرة عن طويلتي الزخم، p ، والعدد الموجي، k ، تؤول إلى مساواة بين مقدارين متجهين. في قانون التبدد (6-1)، توافق القيم الموجبة والسالبة للعدد الموجي، k ، قيمتين لمسقط سرعة حركة الإلكترون على محور اختياري.



الشكل (1-1): تابعة طاقة الإلكترون الحر E للعدد الموجي k

3-1-1 كثافة الحالات :Density of States

كما هو معلوم من الميكانيك الكوانتي تصف علاقة عدم التعيين (الارتياب) لهيزنبرغ مجال التموضع الفراغي لجسيمة دقيقة عند معرفة مجال مساقط زخماتها. فمن أجل الاتجاه x ، تُكتب علاقة الشك بالشكل الآتي:

$$dx dp_x \geq h, \quad (8-1)$$

أي إن حاصل ضرب الارتياب في الإحداثية، x ، في الارتياب في مسقط الزخم، dp_x على الإحداثية المعطاة، من أجل أي جسيمة دقيقة يساوي أو أكبر من ثابت بلانك.

■ يمكن كتابة العلاقة (8-1) من أجل كل الإحداثيات الفراغية الثلاث بالشكل الآتي:

$$dx dp_x \geq h \quad ; \quad dy dp_y \geq h \quad ; \quad dz dp_z \geq h.$$

■ وبضرب الأطراف اليمنى والأطراف اليسرى للعلاقات الأخيرة في بعضها البعض

نحصل على المساواة الآتية:

$$dx dy dz dp_x dp_y dp_z \geq h^3. \quad (9-1)$$

■ وبغرض تسهيل المناقشات اللاحقة للارتيابات الموافقة، التي **تعطي** عند إجراء عمليات

الضرب **القيمة الدقيقة** h^3 نرفق المقادير الأخيرة بأدلة صفرية علوية:

$$\boxed{dx^0 dy^0 dz^0 dp_x^0 dp_y^0 dp_z^0 = h^3}. \quad (10-1)$$

■ **تصف** العلاقة (10-1) ما يسمى **الخلية الطورية الأصغرية** *Minimal Phase*

Space في فضاء (الإحداثيات- الزخم) **السداسي البعد** للجسيمة المسموح تواجدها

في هذه الخلية الطورية (باختصار **الجسيمة "المسموحة" "Allowed" Particle**).

نرمز **لعدد الخلايا الطورية (الأولية)** في حجم ما لفراغ (الإحداثيات- الزخم) السداسي

البعد، $dx dy dz dp_x dp_y dp_z$ ، **بالرمز** dZ . وعندها يتضح أن:

$$dZ = \frac{dx dy dz dp_x dp_y dp_z}{dx^0 dy^0 dz^0 dp_x^0 dp_y^0 dp_z^0},$$

أو

$$dZ = \frac{dV dp_x dp_y dp_z}{h^3}, \quad (11-1)$$

حيث $dV = dx dy dz$.

■ ستجري كل الحسابات اللاحقة من أجل وحدة الحجم العادي للفضاء الثلاثي البعد

3D أي سنفرض أننا نتعامل مع وحدة حجم المعدن، ونصف الناقل، والعازل، الخ.

■ ومن ثمّ نعيّن عدد الخلايا الطّورية الأولى، dz ، من أجل وحدة هذا الحجم العادي

في حجم ما لفضاء الزخم الثلاثي البعد:

$$dz = \frac{dZ}{dV} = \frac{dp_x dp_y dp_z}{h^3}. \quad (12-1)$$

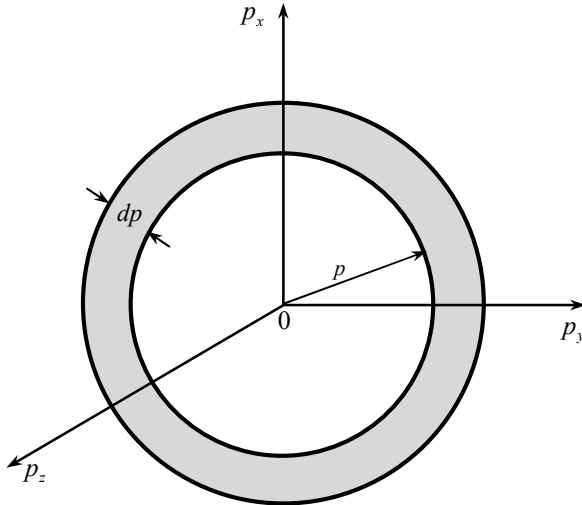
→ لنوجد الآن الكميّة dz في طبقة (قشرة) كروية لفضاء الزخم، **المحدود بكرتين** نصفية

قطريهما p و $p + dp$ ، كما يوضح الشكل (2-1). في هذه الحالة، نجد:

$$dp_x dp_y dp_z = 4\pi p^2 dp. \quad (13-1)$$

أضف إلى ذلك، نحصل من العلاقتين (6-1) و (7-1) على العلاقة الآتية:

$$p^2 = 2mE_k = 2mE. \quad (14-1)$$



الشكل (2-1): قشرة كروية بسماكة dp في فراغات الزخمات

→ تم في العلاقة الأخيرة عدّ الطاقة الحركية للجسيمة هي الطاقة الكليّة، لأن الطاقة الكامنة من أجل جسيمة حرة تساوي الصفر.

ونحصل من العلاقة (14-1) على المساواة الآتية:

$$2 p dp = 2 m dE \quad \Rightarrow \quad 2 \sqrt{2mE} dp = 2 m dE$$

$$\therefore dp = \sqrt{\frac{m}{2E}} dE . \quad (15-1)$$

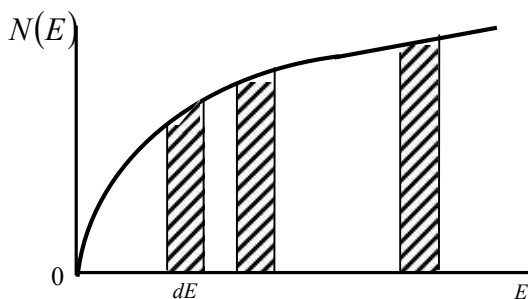
وبالتعويض عن العلاقة (15-1) في العلاقتين (12-1) و (13-1) نجد:

$$dz = \frac{2\pi (2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2} dE . \quad (16-1)$$

→ والآن نعيّن عدد الخلايا الطّورية الأولى الموافقة لواحدة مجال الطاقة أي نوجد ما

يسمى كثافة الحالات *Density of States*:

$$N(E) = \frac{dz}{dE} = \frac{2\pi (2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2} . \quad (17-1)$$



الشكل (3-1): تابعة كثافة الحالات N للطاقة E من أجل الإلكترونات الحرة

- تُعدّ كثافة الحالات، N ، وفقاً للعلاقة (17-1) تابعاً للجذر التربيعي للطاقة، E ، كما يوضح الشكل (3-1). فإذا اخترنا مجالاً محدداً للطاقة، dE ، وعيننا حاصل الضرب $N dE = dz$ ، فمن الواضح أنه بازدياد الطاقة E يزداد dz (أي تزداد مساحة الأشرطة المخططة في الشكل (3-1))، طالما يزداد حجم الطبقة الكروية بالسماكة

المعطاء، dp ، بازدياد الزخم p ، ومن ثمَّ يزداد عدد الخلايا الطَّورية الأولى في هذا الحجم.

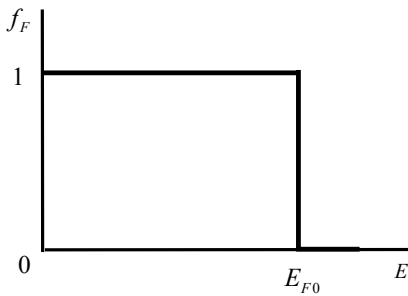
4-1-1 تابع فيرمي Fermi Function:

يمكن أن يوجد في الخلية الطَّورية الأولى، وفقاً لمبدأ الاستبعاد لباولي *Pauli Exclusion Principle*، ليس أكثر من إلكترونين يمتلكان سبينين متعاكسين. وفي هذه الحالة، علاقة عدم التعيين لهيزنبرغ إلى جانب مبدأ باولي للاستبعاد تسمحان بتعيين الحجم الطَّوري الأولي الذي يمكن أن يقع فيه إلكترونان على الأكثر وعندها تكون الخلية مشغولة بالكامل؛ ولكن ثمة حالة يمكن أن تكون فيها الخلية إما مشغولة جزئياً وإما فارغة تماماً. تُفيدنا الفيزياء الإحصائية في أن احتمال انشغال الخلية الطَّورية الأولى، أي الخلية الموافقة للطاقة E ، بالإلكترونات يتعین بتابع توزع فيرمي:

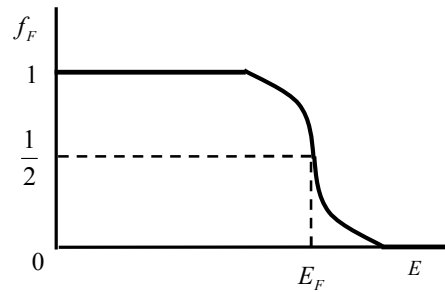
$$f_F = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} \quad (18-1)$$

حيث E_F طاقة أو مستوى فيرمي.

- ليس صعباً أن نلاحظ أنه في درجة الصفر المطلق يأخذ تابع فيرمي، f_F ، فقط قيمتين، كما يوضح الشكل (4-1): عندما $E < E_F = E_{F0}$ يكون لدينا $f_F = 1$ ؛ وعندما $E > E_{F0}$ يكون لدينا $f_F = 0$ ، بهذا الشكل، نجد أنه عندما $E = E_{F0}$ تُلاحظ قفزة مقدارها $\Delta f_F = 1$.



الشكل (4-1): تابع فرمي f_F في الدرجة $T = 0$



الشكل (5-1): تابع فرمي f_F في الدرجة $T \neq 0$

- أما إذا كانت $T \neq 0$ ، فيمكن بسهولة التحقق من أن أكبر تغيّر يطرأ على تابع فيرمي، f_F ، يكون بجوار طاقة فيرمي، E_F ، (الشكل (5-1)) وعندما $E = E_F$ نجد $f_F = \frac{1}{2}$.

- عندما تتحقق المساواة $E - E_F = n_1 k_B T$ ، حيث n_1 يُمثّل عدد الوحدات، فإن مقام الأس يفوق الواحد بكثير، أي أن $e^{n_1} \gg 1$ ، وعندها تكون قيمة f_F قريبة من الصفر.
- وعلى العكس من ذلك، عندما تتحقق المساواة $E_F - E = n_1 k_B T$ ، فإن $e^{-n_1} \ll 1$ ، وتابع فيرمي، f_F ، قريب من الواحد:

→ فعلياً، مجال تغيّر تابع توزّع فيرمي، f_F ، من الواحد حتى الصفر، يُقابل بتغيّر الطاقة على المحور الأفقي في حدود بضع $k_B T$ من على يسار E_F وبضع $k_B T$ من على يمين E_F ؛ من غير الممكن الإشارة إلى القيم الدقيقة لهذا المجال، ولكن من المهم الإشارة إلى أن كلا القطاعتين يتطابقان من حيث رتبة القيمة مع قيم $k_B T$ ويمكن أن نعتبر، بشكل ليس دقيقاً كفايةً، أن $f_F = 1$ في المجال الواقع من الصفر حتى $E_F - k_B T$ ، و $f_F = 0$ عندما $E > E_F + k_B T$.

- تجدر الإشارة إلى أن **مستوى فيرمي**، E_F ، تُمثّل الكمون الكيميائي، μ .
- يسمح التفسير الترموديناميكي **لمستوى فيرمي** بالحصول على استنتاج غاية في الأهمية حول **شرط التوازن الترموديناميكي** لجملة مؤلفة من تماس جسمين مثلاً (نصف ناقل وفلز، أو نصف الناقل مع نصف الناقل، أو نصف الناقل مع عازل، الخ):

→ نرسم **للطاقة الحرة لجسمين متماسين** مع بعضهما البعض بالرمزين F_1 و F_2 ، **ولعدد الإلكترونات** في كل منهما بالرمزين N_1 و N_2 ، **وللكمون الكيميائي** لهما بالرمزين μ_1 و μ_2 ، على الترتيب. تساوي الطاقة الحرة للجملة، F ،

$$F = F_1 + F_2 .$$

→ وفي حالة التوازن تكون **الطاقة الحرة** لجملة الجسمين المتماسين في **حدّها الأدنى** .Minimum

→ وعندها **يجب يتساوى الكمونان** الكيميائيان لهذين الجسمين. وفعلاً، ينتج من شرط

القيمة الأصغرية للطاقة الحرة، F ، الموافقة لشرط التوازن أن:

$$dF = 0 = \mu_1 dN_1 + \mu_2 dN_2 .$$

غير أنه **عندما يحصل تبادل بالإلكترونات** بين جسمي الجملة المعطاة، يكون $dN_1 = -dN_2$ (فالزيادة في أحد الجسمين تعادل التناقص الحاصل في الجسم الآخر)، ومن ثم $\mu_1 = \mu_2$.

بهذه الطريقة نجد أنه **في شروط التوازن الترموديناميكي** (في شروط تساوي درجة الحرارة) يبدو **الكمون الكيميائي (مستوى فيرمي) ثابتاً في أي جملة جسيمات متماسة مع بعضها البعض؛ ولذلك، يمكن وبشكلٍ معاكسٍ اعتبار ثبات مستوى فيرمي شرطاً لتوازن الجملة المعطاة.** من المهم أيضاً التأكيد على أن مستوى فيرمي لا يتعلق بحجم الأجسام المتماسة في الجملة.

تجدر الإشارة في الختام إلى أن الغاز الإلكتروني، الذي خصائصه توصف بتابع توزع فيرمي يسمى **غازاً متحللاً Degenerated** أو **كوانتياً Quantized**. وفي شروط محددة، يمكن تحويل تابع توزع فيرمي إلى تابع توزع يوافق إحصاء مكسويل-بولتزمان، وعندها يُقال أن التحلل قد أُزيل، أي أن الغاز يُصبح تقليدياً ("كلاسيكياً") أو غير متحللٍ *Non-degenerated*. وهذا ممكن إذا كان عدد الحالات الطاقية المسموحة أكبر بكثير من عدد الإلكترونات: "يُحجب" الاستبعاد الكوانتي ويبدو ممكناً استعمال إحصاء مكسويل-بولتزمان. أمّا إذا كان عدد الإلكترونات من رتبة عدد الحالات الطاقية، فلا بد من تطبيق إحصاء فيرمي.

→ يمكن عدّ الغاز الإلكتروني غير متحللٍ إذا تحقق الشرط الآتي:

$$e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} \gg 1 \quad (19-1)$$

وفي هذه الحالة، تبعاً للعلاقة (18-1)، وإهمال الواحد في المقام، يكون لدينا:

$$f_F \rightarrow f_{M-B} = A e^{-\frac{E}{k_B T}}, \quad (20-1)$$

حيث أن

$$A = e^{\frac{E_F}{k_B T}} . \quad (21-1)$$

→ يتحقق الشرط (19-1) إذا كان؛ $\frac{E - E_F}{k_B T} \geq (2-3)$ ، أي يتحقق عند "ذيل" المنحني

في الشكل (5-1) فوق مستوى فيرمي، E_F . ومن ثمَّ هذا "الذيل" يوافق توزع مكسويل- بولتزمان .

وعلى عكس ما سبق، إذا تحقق الشرط

$$\boxed{e^{\frac{E - E_F}{k_B T}} \ll 1} \quad (22-1)$$

فالغاز يُعدُّ متحللاً. يمكن إعادة التعبير عن شرط التحلل (22-1) بالشكل الآتي:

$$\frac{e^{E/k_B T}}{e^{E_F/k_B T}} \ll 1 . \quad (23-1)$$

وإذا كانت الطاقة، E ، تساوي أو أكبر من الصفر، $E \geq 0$ ، كما هو عليه الحال من أجل الإلكترونات الحرة مثلاً، ومن ثمَّ بسط العلاقة (23-1) ليس أقل من الواحد ($e^{E/k_B T} \geq 1$)، فإنه تبعاً للعلاقة (23-1) نجد

$$e^{E_F/k_B T} \gg 1 . \quad (24-1)$$

يسمى الشرط (24-1) **معياري تحلل**.

تُعيَّن **عتبة التحلل** من الشرط

$$e^{E_F/k_B T} = 1 , \quad (25-1)$$

ومن ثمَّ من الممكن أن يكون الغاز غير متحلل إذا تحقق الشرط (عند حصول الانتقال (20-1)

ينتقل مبدأ حساب الطاقة، $E = 0$ ، بحيث يقع فوق مستوى فيرمي ($E_F < 0$)

$$e^{E_F/k_B T} \ll 1 . \quad (26-1)$$

5-1-1 تركيز الغاز الإلكتروني Concentration of Electron Gas:

تمّ تعيين كثافة الحالات، $N(E)$ ، في الفقرة 1-1-3؛ **كعدد للخلايا الطّورية الأولى الموافق لوحدّة مجال الطاقة والمحسوب من أجل وحدّة الحجم العادي**. أضف إلى ذلك، أصبح احتمال إيجاد إلكترون في حالة طاققتها E معلوماً على شكل تابع فيرمي. ومن ثمّ يمكن تعيين عدد الإلكترونات الحرة، dn_0 ، التي طاقتها محصورة في المجال من E إلى $E + dE$ **بالعلاقة:**

$$dn_0 = dz \cdot 2 f_F , \quad (27-1)$$

أو بالعلاقة:

$$dn_0 = N(E) \cdot 2 f_F dE = \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2} \cdot 2 f_F dE . \quad (28-1)$$

يرتبط وجود المعامل 2 بمبدأ باولي للاستبعاد. وهكذا يكون لدينا:

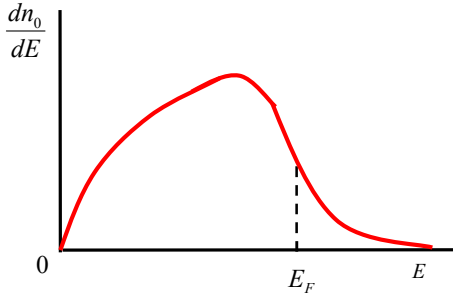
$$dn_0 = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2} f_F dE . \quad (29-1)$$

ومنه

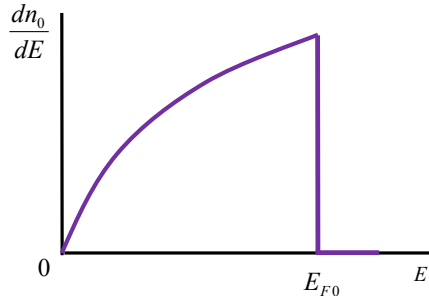
$$\boxed{\frac{dn_0}{dE} = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2} f_F .} \quad (30-1)$$

يوضح الشكلان (6-1) و (7-1):

- في الحالة الأولى، عندما $T = 0$ ، في المجال من الصفر حتى مستوى فيرمي الموافقة، E_{F0} ، لدينا $f_F = 1$ ، ومن ثمّ يكون المنحني dn_0 / dE مكافئاً كما يوضح الشكل (6-1)؛
- وفي الحالة الثانية، عندما $T \neq 0$ ، يكون للمنحني dn_0 / dE شكل أكثر تعقيداً منه في الحالة الأولى، كما يوضح الشكل (7-1).
- في كلتا الحالتين، **تزداد كثافة الحالات بازدياد الطاقة E** : غير انه في الوقت الذي يزداد فيه المقدار dn_0 / dE ، في الحالة الأولى، فقط في المجال من الصفر حتى E_{F0} ، ثمّ يهبط فجأةً على شكل قفزة حادة حتى الصفر (الشكل (6-1))،



الشكل (7-1): تابع فرمي $dn_0/dE = f(E)$ في الدرجة $T \neq 0$



الشكل (6-1): تابع فرمي $dn_0/dE = f(E)$ في الدرجة $T = 0$

■ وفي الحالة الثانية يزداد المقدار dn_0/dE في مجال ما من الصفر حتى $E < E_F$ ، ثم ينخفض تدريجياً حتى الصفر (الشكل (7-1)).

وبهدف حساب تركيز الغاز الحر المتحلل تكامل العلاقة (29-1) بالنسبة للطاقة، E .

فمن أجل الحالة الموافقة لدرجة الصفر المطلق، $T = 0$ ، نحصل على العلاقة الآتية:

$$n_0 = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{E_{F0}} E^{1/2} dE, \quad (31-1)$$

أو

$$n_0 = \frac{8\pi(2m)^{3/2}}{3h^3} E_{F0}^{3/2}. \quad (32-1)$$

وكما نرى من العلاقة (32-1)، تتعین طاقة فيرمي في درجة حرارة الصفر المطلق، E_{F0} ،

بتركيز الإلكترونات. فإذا وضعنا $n_0 \approx 10^{28} \text{ m}^{-3}$ مثلاً، وهو ما يوافق المعادن، فإن

$$E_{F0} \approx 5 \text{ eV}$$

■ إذن، في درجة الصفر المطلق يمكن أن تمتلك الإلكترونات المتحللة **طاقات مختلفة** تقع

بين الصفر و E_{F0} ، في حين من أجل الغاز التقليدي، عند تخفيض درجة الحرارة حتى

0 K، يجب أن تتوقف الحركة الحرارية، وتنخفض الطاقة الحركية (والكتلية) للجسيمات

إلى الصفر.

■ إذا حسبنا الطاقة الوسطية للإلكترونات المتحللة، E_{mean} ، عندما $T = 0 \text{ K}$ ، نحصل على المساواة الآتية:

$$E_{mean} = \frac{3}{5} E_{E_{F0}} . \quad (33-1)$$

نوجد الآن تركيز الغاز الإلكتروني اللامتحلل في درجة حرارة مختلفة عن الصفر المطلق، $T \neq 0 \text{ K}$. يكون لدينا في هذه الحالة وفقاً للعلاقتين (20-1) و (29-1) ما يأتي:

$$dn_0 = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2} f_F dE ;$$

$$f_F \rightarrow f_{M-B} = e^{-\frac{E_F}{k_B T}} e^{-\frac{E}{k_B T}} ,$$

ومن ثمَّ

$$n_0 = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} e^{-\frac{E_F}{k_B T}} \int_0^\infty e^{-\frac{E}{k_B T}} E^{1/2} dE . \quad (34-1)$$

نُجري استبدال لبعض المتغيرات بهدف تبسيط حل المعادلة الأخيرة؛ كأن نضع

$$dE / k_B T = dx \quad \text{و} \quad E / k_B T = x$$

وعندها نجد:

$$n_0 = \frac{4\pi(2mk_B T)^{3/2}}{h^3} e^{-\frac{E_F}{k_B T}} \int_0^\infty e^{-x} x^{1/2} dx . \quad (35-1)$$

التكامل في العلاقة (35-1) معروف ويساوي $\sqrt{\pi}/2$ ، ومن ثمَّ نجد أن تركيز الإلكترونات اللامتحللة في درجة الحرارة T يساوي:

$$n_0 = \frac{2(2\pi mk_B T)^{3/2}}{h^3} e^{-\frac{E_F}{k_B T}} . \quad (36-1)$$

تعبّر المساواة (36-1) عن علاقة تابعة تربط بين تركيز الغاز اللامتحلل، n_0 ، ومستوى فيرمي، E_F . وتدخل في هذه العلاقة درجة الحرارة المطلقة، T ؛ كوسيط متغيّر، والكميات الأخرى المتبقية تُعدُّ ثوابت.

■ إذا اعتبرنا العلاقة (36-1) محققة حتى حدّ التحلل، فإننا نحصل باستعمال علاقة عتبة

التحلل (25-1)، $e^{E_F/k_B T} = 1$ ، على المساواة الآتية:

$$n_0^{cr} = \frac{2(2\pi mk_B T)^{3/2}}{h^3}. \quad (37-1)$$

نحصل على سبيل المثال من العلاقة (37-1) في الدرجة $T = 300 \text{ K}$ على القيمة الآتية

$$\text{للتكيز الحرج للإلكترونات: } n_0^{cr} \approx 2 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}.$$

■ يكون الغاز الإلكتروني وفقاً للعلاقتين (26-1) و (36-1) عندما $n_0 < n_0^{cr}$ ، **غير**

متحلل، وعندما $n_0 > n_0^{cr}$ ، يكون **متحللاً**. وهذا يعني أنه في الشروط العادية (عندما

$T \approx 300 \text{ K}$)، الغاز الإلكتروني **ليس متحللاً**، إذا تحقق الشرط

$$n_0 < 2 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$$

■ يجدر بالذكر إلى أنه، إذا ثبتنا n_0 ، فمن الممكن تعيين درجة الحرارة، T_{cr} ، التي يجب

أن **ينتقل** عندها الغاز **غير المتحلل إلى غاز متحلل**؛ فعلى سبيل المثال، إذا فرضنا

$$n_0 = 10^{28} \text{ m}^{-3}$$

نجد من العلاقة (37-1) قيمة T_{cr} الآتية:

$$T_{cr} \approx 5 \times 10^4 \text{ K} \quad (38-1)$$

فوفقاً للعلاقة (38-1)، كان من الممكن للغاز الإلكتروني المتحلل في الفلز أن ينتقل إلى غاز

غير متحلل فقط عند بلوغه الدرجة $5 \times 10^4 \text{ K}$. وكان ذلك محققاً فيما لو اعتبرنا الحساب

الذي أجريناه صحيحاً في كامل مجال درجات الحرارة؛ في حقيقة الأمر، يتحوّل الفلز الصلب

إلى غاز قبل بلوغه درجة حرارة كهذه بوقت طويل.

■ بهذه الطريقة، نجد أن الغاز الإلكتروني في الفلزات الواقعة في الحالة الصلبة، يكون في

حالة متحللة.

وتجدر الإشارة في الختام إلى أنه، بما أن المنحنيات في الشكل (5-1) وغيره تُعدّ كيفية،

في الشروط العادية، عندما $E_F \gg k_B T$ ، فقد تم تمثيلها من دون مراعاة التدرجات الحقيقية

للكميّات المعطاة.

6-1-1 السعة الحرارية للغاز الإلكتروني Thermo-capacity of Electron Gas:

سندرس نموذجاً مبسطاً لمخطط عصابات الطاقة، يُستخدم عادةً في المراجع العلمية المختلفة:

- نفترض أن **عدد السويات الطاقية المتقطعة يساوي لنصف عدد الحالات** في العصابة الطاقية المسموحة.

→ في هذه الحالة، لا يمكن أن يتواجد في كل سوية أكثر من إلكترونين سديناهما متعاكسان. أضف إلى ذلك، نفرض أن **الفواصل الطاقية** بين السويات المتقطعة المسموحة **متساوية** وتساوي ΔE ؛ وعندها نحصل من أجل واحدة الحجم على المساواة

$$\Delta E = \frac{2E_F}{n_0}, \quad (39-1)$$

لأن عدد السويات في شروط الانشغال الكامل يساوي $\frac{1}{2}n_0$ و $E_F \gg k_B T$ ؛

→ فعلى سبيل المثال: إذا كان التركيز مساوياً $n_0 = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ و $E_F = 5 \text{ eV}$ ، فإن $\Delta E = 10^{-21} \text{ eV}$ من أجل مكعب حجمه 1 cm^{-3} . وعند ازدياد الحجم يزداد عدد

السويات باضطراد وتقل المسافة الطاقية، ΔE ، فيما بينها.

- نعتبر في مجالات الفواصل $k_B T$ **على جانبي طاقة فيرمي** E_F (راجع الشكل (5-1)) أن **كل سوية** فيها **تُشغل بالإلكترون** واحد فقط، بحيث يبدو عدد السويات الطاقية مساوياً لعدد الإلكترونات:

$$\Delta n_0 = \frac{k_B T}{\Delta E} = \frac{k_B T}{2E_F} n_0. \quad (40-1)$$

مثل **هذه الكمية من الإلكترونات الحرة** لواحدة الحجم **ستهجر** المجال $k_B T$ ، المتوضع تحت مستوى فيرمي، E_F ، بسبب الحركة الحرارية **وتنتقل إلى المجال** $k_B T$ المتوضع فوقه. ويمكن الحصول على **التغير النسبي لتركيز الإلكترونات** التي تشغل السويات تحت E_F عند تسخين الفلز من 0 K حتى درجة الحرارة T من العلاقة الآتية:

$$\frac{\Delta n_0}{n_0} = \frac{k_B T}{2E_F}. \quad (41-1)$$

→ فعندما $T = 300 \text{ K}$ ، يكون $k_B T \approx 0.02 \text{ eV}$ ، بحيث نجد من أجل $E_F = 5 \text{ eV}$ التركيز النسبي $\Delta n_0 / n_0 = 0.002$. فهذا الجزء فقط من الإلكترونات يُشارك في الحركة الحرارية، والإلكترونات المتبقية لا تستطيع أن تأخذ الطاقة الحرارية، لأنه إذا تقبّلت هذه الطاقة فإنها سترتقي إلى السويات الطاقية الموافقة الأعلى، ولكن هذه الأخيرة مشغولة بأكملها.

→ ومن ثمَّ **يبلغ تغير الطاقة الحرارية** على حساب انتقالات الجزء المشار إليه من الإلكترونات، Δn_0 ، **عبر مستوى فيرمي** القيمة

$$\Delta E_T = k_B T \Delta n_0 = \frac{(k_B T)^2}{2E_F} n_0. \quad (42-1)$$

وعندها تُعطى **السعة الحرارية النوعية** (الحرارة النوعية)، c ، **للغاز الإلكتروني** بالعلاقة الآتية:

$$c = \frac{d(\Delta E_T)}{dT} = \frac{k_B^2 T}{E_F} n_0, \quad (43-1)$$

والسعة **الحرارية المولية**، C ، تساوي

$$C = \frac{k_B^2 T}{E_F} N_A = \frac{k_B T}{E_F} R, \quad (44-1)$$

حيث N_A عدد أفوغادرو و R ثابت الغازات.

من الواضح أنه عند تغيير الحجم يتغير عدد الخلايا الطورية الأولية أيضاً (راجع العلاقة (11-1))، ولهذا السبب جرى **استبدال** n_0 **بعدد أفوغادرو**، N_A . يجدر بالذكر أن السعة

الحرارية المولية لغاز مثالي من الجزيئات عند ثبات الحجم يُعطى بالعلاقة الآتية:

$$C_V = \frac{3}{2} R. \quad (45-1)$$

ومن ثمَّ السعة الحرارية للغاز الإلكتروني (44-1) تُشكّل مثلاً، فقط أجزاءً ألفية من السعة الحرارية للغاز المثالي (45-1)، بسبب مساهمة كميات قليلة فقط من الإلكترونات الحرة في الحركة الحرارية. ولذلك، لا تختلف السعات الحرارية للبلورات الفلزية عن السعات الحرارية للبلورات اللافلزية إلا قليلاً.

ومن الواضح أيضاً أنه يمكن أن **تشارك في الناقلية الكهربائية للفلزات فقط الإلكترونات المتوضّعة بجوار مستوى فيرمي**؛ في الواقع، يمكن أن تتغيّر طاقة الإلكترون في حقل كهربائي بمقدار

$$\Delta E_E = eEl,$$

حيث E شدة الحقل الكهربائي، و l طول المسار الحر للإلكترون.
وقيمة المقدار ΔE_E ليست كبيرة عادةً؛ فمثلاً، عندما $E = 1 \text{ V/cm}$ ، و $l = 10^{-6} \text{ cm}$ ، و
 $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$ ، يكون لدينا $\Delta E_E = 1.6 \times 10^{-25} \text{ J} = 10^{-6} \text{ eV}$.

بهذا الشكل، نجد أن الإلكترونات المتوضّعة في السويات الأخفض من مستوى فيرمي بكثير لا تستطيع المساهمة في الناقلية الكهربائية، أي ليس لديها المقدرة على زيادة طاقتها بمقدار طاقة الانسياق، لأن كل السويات الطاقية القريبة منها تكون مشغولة بالإلكترونات أخرى.

3-1 التكمية في الذرات Quantization in Atoms

تُوصف حالات الإلكترونات في الذرات بأربعة أعداد كوانتية:

- i. العدد الكوانتي الرئيسي $n = 1, 2, 3, \dots$ ؛
- ii. العدد الكوانتي المداري $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$ ؛
- iii. العدد الكوانتي المغناطيسي $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ ؛
- iv. العدد الكوانتي السبيني $s = \pm \frac{1}{2}$ ؛

يُعيّن العدد الكوانتي الرئيسي، n ، الرقم الترتيبي للمدار الطاقية المسموح أو السوية الطاقية للإلكترون، والعدد الكوانتي المداري، l ، يرتبط بالعزم الميكانيكي المداري لكمية حركة (زخم) الإلكترون، p_l ، بالعلاقة:

$$p_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}. \quad (80-1)$$

أما العدد الكوانتي المغناطيسي، m ، فيُعبّر، بوحدات ثابت بلانك المختزل، \hbar ، عن العزم الميكانيكي الذاتي لكمية حركة الإلكترون، ويمكن لكمية حركة الإلكترون هذه، أن تكون متجهة باتجاه العزم المداري لكمية الحركة أو باتجاه معاكس له.

تُشكّل مجموعة الإلكترونات التي تمتلك نفس قيمة العدد الكوانتي الرئيسي، n ، طبقة ذرية *Atom Layer*؛ فعندما $n = 1$ ، يكون لدينا الطبقة- K ، وعندما $n = 2$ ، الطبقة- L ، وعندما $n = 3$ ، الطبقة- M ، الخ.

تُشكّل الإلكترونات المختلفة بالأعداد المدارية، l ، داخل كل طبقة طبقات ثانوية (تسمى

قشرات) *Shells*، يُرمز لها بالرموز s ، و p ، و d ، و f ، الخ:

- القشرة- s ، عندما $l = 0$ ؛
- والقشرة- p ، عندما $l = 1$ ؛
- والقشرة- d ، عندما $l = 2$ ؛
- والقشرة- f ، عندما $l = 3$.

ووفقاً لمبدأ باولي في الاستبعاد، يمكن أن يتواجد في نفس الحالة الكوانتية الموصوفة بالأعداد الكوانتية الأربعة، ليس أكثر من إلكترون واحد. ومن ثمَّ يمكن أن يتوافر في كل حالة كوانتية معيَّنة بالأعداد الكوانتية الثلاثة n ، و l ، و m ليس أكثر من إلكترونين سببناهما متعاكسان $(s = \pm \frac{1}{2})$.

يبلغ عدد قيم العدد الكوانتي المغناطيسي المتغيّر في الحدود، من $-l$ إلى $+l$ ؛

$2l + 1$ قيمة. ومن ثمَّ، العدد الأعظمي للإلكترونات في القشرة المعطاة يساوي

$$N_l = 2(2l + 1). \quad (81-1)$$

والعدد الأعظمي للإلكترونات في الطبقة المعطاة يساوي

$$N_n = \sum_{l=0}^{n-1} N_l = 2 [1 + 3 + \dots + (2n - 1)] = 2n \frac{1 + 2n - 1}{2} = 2n^2. \quad (82-1)$$

بهذا الشكل، نجد أنه يمكن أن يتواجد إلكترونان على الأكثر في الطبقة- K ، وثمانية إلكترونات على الأكثر في الطبقة- L ، وثمانية عشرة إلكترونات في الطبقة- M ، وهكذا دواليك، ومن ثمَّ، يمكن أن يتواجد في القشرة- s ، ليس أكثر من إلكترونين، والقشرة- p ، ليس أكثر من ستة إلكترونات، والقشرة- d ، ليس أكثر من عشرة إلكترونات، وهكذا دواليك.

تُعدُّ السويات- s في الذرات المعزولة بسيطة وباقي السويات فيها متحللة *Degenerated*؛ وتعني هذه الأخيرة، أنه من أجل قيم n و l المعطاة، أي من أجل قيمة E المعطاة، تتوافر $g = 2l + 1$ قيمة لـ m ويمكن أن يوافقها g إلكترونات. ومن ثمَّ عامل التحلل *Degenerate Factor*، g ، (من دون احتساب السبين) يساوي من أجل السويات- p ثلاثة بحيث أن السويات- p تُعدُّ ثلاثية التحلل، وكذلك الأمر، من أجل السويات- d يساوي عامل التحلل خمسة بحيث أن السويات- d تُعدُّ خماسية التحلل.

عند انشغال الطبقات والقشرات تسعى الإلكترونات لأن تشغل أخفض السويات الطاقية، ولذلك في البداية، يجب أن تشغل الطبقات ذات الرقم $n = 1$ ، ثمَّ ذات الرقم $n = 2$ ، ثمَّ ذات الرقم $n = 3$ ، وهكذا دواليك.

غير أن التأثير بين الإلكترونات يُسهم في إدخال تصحيحات على هذا المخطط البسيط لانشغال السويات الطاقية بالإلكترونات؛ أولاً، عند تثبيت n تتوزع القشرات في ترتيب تصاعدي بالنسبة لقيمة l ، أي تتشغل في البداية القشرات- s ، ثم القشرات- p ، ثم القشرات- d ، وهكذا دواليك؛ وثانياً، تبدو القشرة- $4s$ أخفض من القشرة- $3d$ ، وكذلك الأمر بالنسبة للقشرة- $5s$ حيث تقع أخفض من القشرة- $4d$ ، أمّا القشرة- $6s$ فتقع ليس أخفض من القشرة- $5d$ وحسب بل أسفل القشرة- $4f$ أيضاً.

ثمة صياغة ترميزية خاصة للتعبير عن حالة الإلكترونات في الذرات؛ فمثلاً من أجل إلكترونات ذرة السيلكون، $_{14}\text{Si}$ ، يمكن كتابة

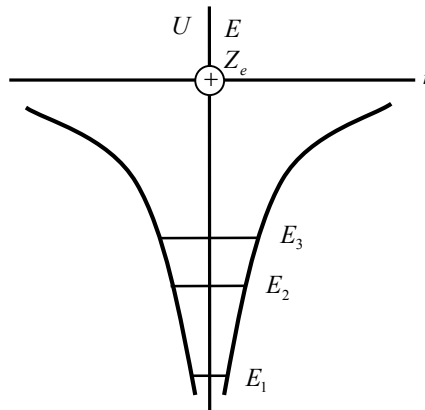
$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$$

وذرة الجرمانيوم، $_{32}\text{Ge}$ ،

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$$

يوافق الدليلان 14 و 32 الرقمين الذريين أو عدد الإلكترونات في الذرات اللامتأينة. من الواضح، أن مجموع الأدلة العلوية التي تُشير إلى عدد الإلكترونات في القشرات، يجب أن يتطابق مع العددين الذريين. وإلكترونات التكافؤ في هاتين الذرتين، هي $3s^2 3p^2$ و $4s^2 4p^2$ على الترتيب.

يوضح الشكل (14-1) حفرة كمونية لذرة حيث يوجد فيها سويات طاقة للإلكترونات.



الشكل (15-1): حفرة كمون لذرة