



كلية العلوم

القسم : الفيزياء

السنة : الرابعة

المادة : انصاف نواقل

المحاضرة : الثانية/نظري/د. حسن سليمان

{{ مكتبة A to Z }}

مكتبة A to Z Facebook Group :

كلية العلوم

29

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

2026

## الفصل الثاني

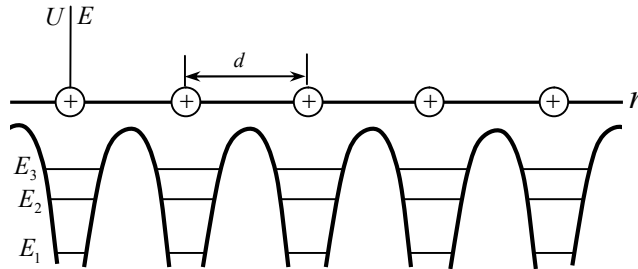
### نظرية عصابات الطاقة للأجسام الصلبة

#### Elements of Band Zone Theory of Solid States

##### 1-2 الغاز الإلكتروني في حقل كمونٍ دوري

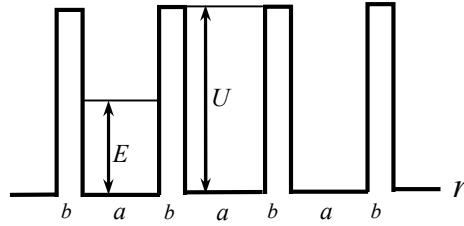
##### Electron Gas in Periodic Potential Field

سندرس حالةً تكون من أجلها الإلكترونات في بلورة أحادية *Monocrystal* أي في حقل الكمون الدوري للأيونات الموجبة للشبيكة البلورية *Lattice*. يوضح الشكل (1-2) سلسلة خطية من الأيونات الموجبة، تُشكّل من أجل الإلكترونات منحنى *Potential Relief*: كل أيون في الشبيكة يمتلك حفرة *Potential Well* لا متناهية في العمق والإلكترونات الذرات تتوزع على سويات محددة في هذه الحفر الكمونية. كما ذكرنا في الفصل السابق، تمتلك الذرات المعزولة حُفر كمونٍ متشابهةٍ من أجل الإلكترونات، غير أنها تختلف عن بعضها بأن الأجزاء العلوية من المنحنى (منحنى الكمون)، تقترب شيئاً فشيئاً من المحور الأفقي (أي المحور  $U = 0$ )، مبتعدةً إلى اللانهاية، راجع الشكل (1-15) في الفصل الأول. أمّا لدى اقتراب الذرات من بعضها البعض لمسافات يبدأ عندها التأثير فيما بينها (تتبادل التأثير مع بعضها بعضاً)، فإن شكل القسم العلوي من المنحنى يتغير وتتشكّل حواجز *Potential Barriers* بقمم *Peaks* تقع تحت المحور  $U = 0$ .



الشكل (1-2): منحنى كمون دوري من أجل الإلكترونات الناتج من سلسلة خطية للأيونات الموجبة للشبيكة البلورية

بما أن عمق الحفر الكمونية لا يؤدي دوراً محورياً في هذه الدراسة، فيمكن استبدال منحنى الكمون، في الشكل (1-2)، بمنحنى كمون لحفرات كمون محدودة العمق، كما في الشكل (2-2). أضف إلى ذلك، من المريح استبدال حواجز الكمون غير المستطيلة الشكل، في الشكل (1-2)، بأخرى مستطيلة، كما يوضح الشكل (2-2). يسمى مثل هذا النموذج لمنحنى الكمون بنموذج كرونينغ- بيني Kronig-Penny.



الشكل (2-2): نموذج كرونينغ- بيني

يُمثل مجموع عرض حفرة الكمون،  $a$ ، وسماكة الحاجز،  $b$ ، ثابت الشبكة البلورية،  $d$ ، أي أن  $a + b = d$ . وعند حساب الحالات الطاقية لغاز إلكتروني يُستخدم تقريبان حدّيان؛ تقريب الربط المحكم (الرابطة الشديدة) *Tight Bond* وتقريب الرابطة الضعيفة *Weak Bond*. سندرس هنا النتائج الرئيسية التي تم الحصول عليها في هاتين الحالتين.

#### أولاً- تقريب الرابطة الشديدة *Tight Bond Approximation*

نفرض في البداية، أنه عند تشكّل السلسلة الخطّية لذرات الجسم الصلب المتبلور، تبقى كل الإلكترونات في الحدود الموافقة للذرات المعزولة، أي أن الإلكترونات تقع في الحفر الكمونية "لذراتها". ولكن تأثر الذرات مع بعضها البعض يؤدي إلى انخفاض ارتفاع الحواجز الكمونية وسماكتها. فإذا كانت سماكة الحاجز في ذرة معزولة لانهائية، فإن سماكته في السلسلة الخطّية للذرات تبلغ قيمة صغيرة،  $b$ ، بحيث يمكن أن يبدو هذا الحاجز شفافاً من أجل عبور الإلكترونات بطريقة النفق. أفضلية العبور بالنفق تكون للإلكترونات الخارجية التي من أجلها

تكون قيمة الفارق الطاقي، أصغريةً  $U - E$ . نَعُدُّ قاع حفرة الكمون في نموذج كرونينغ-بيني مبدأً لحساب الطاقة الكامنة.

إذا كانت سرعة الإلكترون مساويةً  $U$ ، فإنه يتردد نحو الحاجز، في أثناء حركته في حفرة الكمون على طول السلسلة، خلال واحدة الزمن،  $U/a$  مرة. وعندها، يمكن تعيين تواتر انتقالات،  $\nu$ ، الإلكترونات من ذرة معيَّنة إلى ذرة أخرى مجاورة بالعلاقة الآتية:

$$\nu = \frac{U}{a} D = \frac{U}{a} e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)}b} \quad (1-2)$$

يوافق زمن إقامة الإلكترون،  $\tau$ ، في الذرة المعنية، قيمة مقلوب التواتر،  $\nu$ ، أي أن  $\tau = 1/\nu$ . فعلى سبيل المثال: إذا فرضنا  $a = 10^{-8}$  cm و  $U = 10^8$  cm/s و  $U - E = 10$  eV، و  $b = 30 \times 10^{-8}$  cm، فإن نحصل على قيمة التواتر  $\nu \approx 10^{-27}$  s<sup>-1</sup> أو فترة الحياة  $\tau \approx 10^{27}$  s. توافق القيمة  $b = 30 \text{ \AA}$  الحالة الغازية. ومن ثمَّ، على الإلكترونات في هذه الحالة أن تقيم في الذرة إقامة أبدية، وعمليات العبور بالنفق ممنوعة. ولكن لم يؤخذ بالحسبان هنا، إمكانية التأين بسبب هذه أو تلك العوامل.

إذا حافظنا الآن على شروط المسألة المطروحة هنا، باستثناء،  $b = 10^{-8}$  cm، نحصل على القيمتين  $\nu \approx 10^{15}$  s<sup>-1</sup> و  $\tau \approx 10^{-15}$  s، ومن ثمَّ فترة الإقامة الموافقة للإلكترون في ذرة ثابتة تبلغ أجزاءً صغيرةً للغاية من الثواني، ومثل هذه الشروط هي التي تُميِّز السلسلة الخطية للذرات في البلورة.

تأخذ علاقة الشك (الارتياب)، العلاقة (8-1)، من أجل الطاقة،  $E$ ، والزمن،  $t$ ، الشكل الآتي:

$$dE dt = h, \quad (2-2)$$

مما يعني أنه عند إقامة الإلكترون في حالة معيَّنة، فإن الحالة نفسها تتعيَّن خلال الزمن،  $dt$ ، بالطاقة بدقة، تصل إلى  $dE$  فقط. فمثلاً، إذا وقعت ذرات معزولة في حالة مهيجَّة، خلال فترة زمنية من رتبة  $10^{-8}$  s، فإن التعرُّض الموافق لسوية الطاقة والخطوط الطيفية، يبلغ  $dE = h/10^{-8} = 10^{-7}$  eV. إذ بهذا الشكل، يتعيَّن العرض الطبيعي لخط طيفي.

إذا فرضنا الآن،  $dt = \tau = 10^{-15}$  s، فإننا نحصل على القيمة  $dE = 1$  eV.

بهذا الشكل، نجد أنه إذا أخذنا بالحسبان **تقريب الرابطة الشديدة** ومقدرة الإلكترونات على العبور بالنفق من ذرة إلى أخرى، نصل إلى نتيجة مفادها؛

■ أن فترة بقاء هذه الإلكترونات في ذرة ثابتة، تبدو قصيرة، وهي الفترة الزمنية الموافقة لتشكّل عصابات طاقة مسموحة.

■ ومن الواضح أن أقل فترة إقامة،  $\tau$ ، وأكبر تعرّض طاقي،  $dE$ ، تُعزى للإلكترونات الخارجية.

■ تتشكل من أجل الإلكترونات الخارجية غير المهيجة عصابة تكافؤ تتوضع فوقها عصابة ناقلية.

تجدد الإشارة إلى أننا لن ندرس هنا الطرائق الأكثر دقة لنظرية تقريب الرابطة الشديدة (نظرية الإلكترون شبه-المرتبطة).

### ثانياً- تقريب الرابطة الضعيفة *Weak Bond Approximation*

لندرس الإلكترونات الحرة في إطار ما يسمى التقريب الصفري، أمّا الحقل الدوري للشبيكة البلورية فنعدّه اضطراباً؛ يُعبّر عن معادلة شرودنغر في أبسط حالة لها بالمعادلة

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0, \quad (3-2)$$

حيث تُحلّ بتوافر الشروط الحدّية الدورية.

يمكن كتابة الحل وفق بلوخ على شكل دالة موجية:

$$\psi(x) = u(x) e^{ikx}, \quad (4-2)$$

حيث  $u(x)$  دالة دورية، ينطبق دورها مع دور الكمون  $U(x)$ ، أي دورها يساوي  $d$ .

بالتعويض عن الحل (4-2) في المعادلة (3-2) واستخدام الشروط الحدّية، نحصل على المعادلة الآتية:

$$\frac{mab}{\hbar^2} U \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a = \cos ka, \quad (5-2)$$

حيث

$$\alpha = \left( \frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2} . \quad (6-2)$$

وعندها، تُفرض **حواجز** الكمون عالية ورقيقة للغاية، بحيث يمكن اعتبار قيمة  $a$ ؛ بمثابة ثابت للشبيكة البلورية (أي أن  $a \approx d$ ).

نرمز للطرف الأيسر من المعادلة (5-4) بالرمز  $y(\alpha a)$  :

$$y(\alpha a) = \frac{mab}{\hbar^2} U \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a . \quad (7-2)$$

تُحلّ المعادلة (7-4) بيانياً؛ توضع على المحور الأفقي قيمة  $\alpha a$  وعلى المحور الشاقولي قيمة

$y(\alpha a)$ . ثم يتم الحصول على صفة مميزة نوعية على شاكلة منحنى بياني، كما يوضح **الشكل**

(3-2). يُشير الخط المتقطع هنا إلى جزء المنحنى،  $y(\alpha a)$ ، الواقع خارج القيمتين  $\pm 1$ . لا

يمكن لهذا الجزء من المنحنى أن يوافق المعادلة (5-2)، طالما أن الدالة،  $\cos ka$ ، لا يمكن أن

تكون أكبر من الواحد بالقيمة المطلقة؛ أما الخط المتصل من المنحنى  $y(\alpha a)$ ، فيُشير إلى ذلك

القسم منه، الذي يقع في حدود المجال من  $+1$  إلى  $-1$ ؛ إذ يوافق هذا الجزء المعادلة (5-2).

إن **مقاطع المحور**  $AB$ ، و  $CD$ ، و  $A_1B_1$ ، و  $C_1D_1$ ، الخ، والتي لا يخرج عندها المنحنى،

$y(\alpha a)$ ، عن حدود المجال  $\pm 1$ ، **توافق العصابات المسموحة للطاقة**، طالما أن  $\alpha$  و  $E$

مرتبطان بالعلاقة (6-2).

فعندما  $\alpha a \rightarrow 0$ ، فإن  $\frac{\sin \alpha a}{\alpha a} \rightarrow 1$ ، ومن ثمّ، نجد وفقاً للعلاقة (5-2) أن  $y > 1$  عندما

$\alpha a = 0$ . تقع النقطة  $A$  في الربع الأول عند تلك الزاوية  $\alpha a$ ، الموافقة لكون  $y = 1$ . تُعيّن

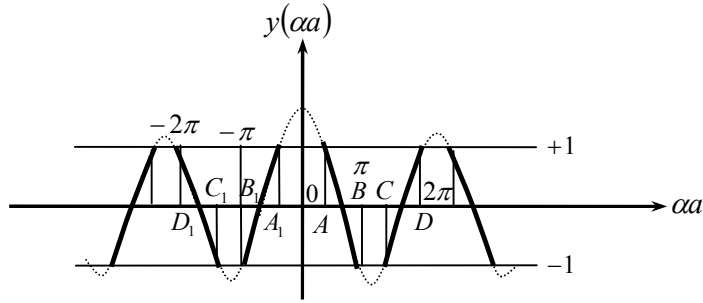
قيمة هذه الزاوية بالوسطاء الموافقة للمنحنى  $y(\alpha a)$ .

يكون لدينا في النقطة  $B$ ، حيث يبلغ  $y$  القيمة  $-1$  لأول مرة، المساواة  $\alpha a = \pi$ .

ولاحقاً، تُرصد منطقة محظورة للطاقة حتى النقطة  $C$  (أي ما بين النقطتين  $B$  و  $C$ )، والتي تقع

على ما يبدو في الربع الثالث ثمّ تظهر من جديد منطقة مسموحة للطاقة،  $CD$ ، حيث يكون

لدينا في النقطة  $D$ ، المساواة  $\alpha a = 2\pi$ .



الشكل (3-2): التابعة  $y(\alpha\alpha)$  من أجل حواجز كمون رقيقة وعالية في نموذج كرونينغ- بيني

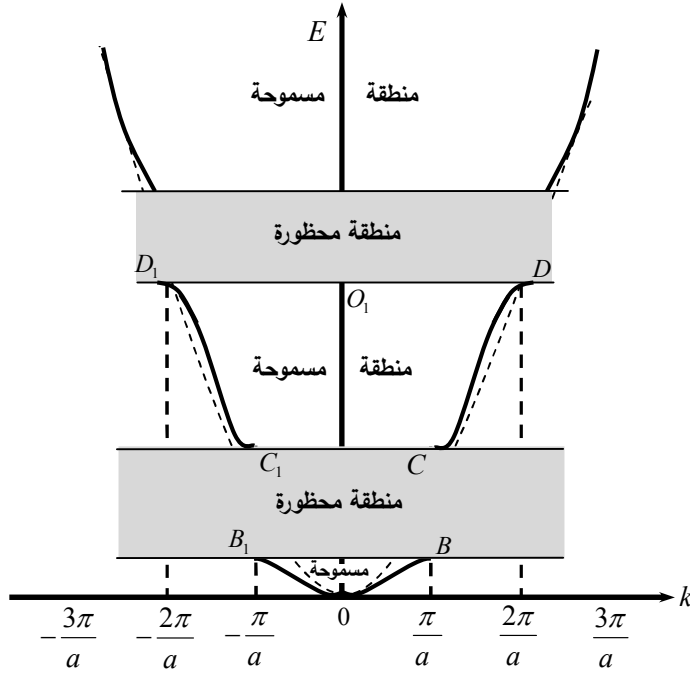
إن المنحني  $y(\alpha\alpha)$  متناظر بالنسبة للزاوية  $\alpha\alpha = 0$ ، بحيث نحصل، من أجل قيم  $\alpha\alpha$  السالبة، على زوايا مماثلة سالبة. **يزداد عرض المناطق المسموحة**  $AB$ ، و  $CD$ ، الخ، مع **ازدياد**  $\alpha\alpha$ .

ولدينا في النقطة  $B$ ، وفقاً للمعادلة (5-2)،  $\cos ka = -1$ ، وهذا يعني أن  $ka = \pi$ ؛ وفي النقطة  $D$  لدينا  $ka = 2\pi$ ، وفي النقاط اللاحقة نحصل على قيم  $ka$  من مضاعفات  $\pi$ . وبالتالي، **تُرصد سقوف العصابات الطاقية المسموحة** عند تحقق الشرط

$$k = \frac{n\pi}{a}, \quad (8-2)$$

حيث  $n = 1, 2, 3, \dots$

يوضح **الشكل (4-2)** المنحني  $E(k)$  الموافق للحالة المدروسة في هذه الفقرة. **بجوار قاع** العصابة الطاقية الأولى، **يُمثّل** المنحني  $E(k)$  **قطعاً مكافئاً**، كما كان عليه الحال في **الشكل (1-1)**. ولكن، عند الاقتراب من سقف العصابة، ينحرف المنحني  $E(k)$  عن القطع المكافئ، المشار إليه بالخط المتقطع. **فعندما**  $k = \pm \frac{\pi}{a}$ ، **يكون** لدينا **سقف** العصابة الطاقية الأولى **وانقطاعاً** في المنحني  $E(k)$ ، **يوافق المنطقة المحظورة**. **ولاحقاً**، **تُرصد مقاطع المنحنيات**، التي تُحدّد العصابات الطاقية **الأكثر ارتفاعاً**. بهذه الطريقة، نجد أن تقريب الرابطة الضعيفة يسمح لنا بتحديد مشهد العصابات الطاقية بحدودها العامة.



الشكل (4-2): تابعة الطاقة الكلية  $E$  للعدد الموجي  $k$  من أجل إلكترون متحرك في حقل كمومي دوري الذي منحني تغيره يُعطى بنموذج كرونينغ- بيني

يكمن الاستنتاج الرئيس في هذه الفقرة في أن القوانين الموجية لحركة الإلكترونات في الحقل الكمومي الدوري، تؤدي إلى نشوء المناطق المسموحة والمحظورة للطاقة. وعندها، يتم الحصول على العصابات الطاقية من أجل كل الإلكترونات وليس من أجل إلكترونات معيَّنة دون سواها.

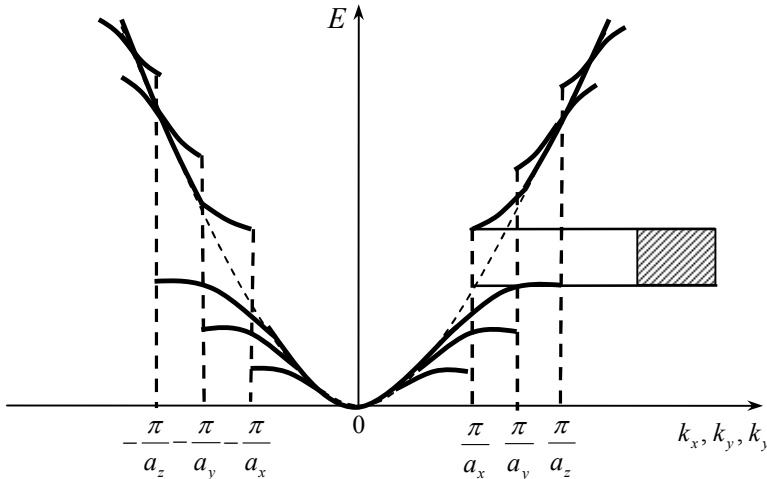
لقد حصلنا في هذه الفقرة على تفسير وصفي لأحد أوجه نظرية الرابطة الضعيفة للإلكترونات (نظرية الإلكترون شبه-الإلكترون الحر)، من خلال تطبيقها على سلسلة ذرية خطية وحيدة البعد التي أُستبدلت بنموذج كرونينغ- بيني.

عند دراسة شبيكة بلورية ثلاثية البعد، يتم الحصول على نتائج نوعية مماثلة لتلك **وحيدة** البعد من أجل كل اتجاه من الاتجاهات البلورية. ويمكن إدخال جملة الإحداثيات المتعامدة وتعيين  $E(\vec{k})$  من أجل الاتجاهات المسموحة  $k_x$ ، و  $k_y$ ، و  $k_z$ . يمكن أيضاً تمثيل كل

المنحنيات الثلاثة  $E(\vec{k})$  في مستوي واحد، كما يظهر في الشكل (5-2)؛ فإذا كانت ثابت الشبكة البلورية مساويةً  $a_x$ ، و  $a_y$ ، و  $a_z$ ، فإن انقطاعات  $E(\vec{k})$ ، ستقع عند النقاط الموافقة للقيم  $k_x = n\pi/a_x$ ، و  $k_y = n\pi/a_y$ ، و  $k_z = n\pi/a_z$  على الترتيب. قد يبدو أن المناطق المحظورة، من أجل الاتجاهات الثلاثة كافة، تقع في بعض المجالات الطاقية المشتركة بحيث نحصل عندها، بالمجمل، على عصابات طاقية محظورة. ولكن يمكن أن تظهر حالة أخرى، عندما لا تمتلك المناطق المحظورة من أجل اتجاهات مختلفة مجالات محظورة مشتركة للطاقة، أو أنها تمتلك مجرد مجالات مشتركة ضيقة، وعندها، وبالمجمل، يمكن أن تتداخل هذه المنطقة المحظورة أو تلك (بشكلٍ كاملٍ أو جزئي) مع العصابات المسموحة.

بعض المسائل المطروحة حول نظرية عصابات الطاقة للأجسام الصلبة المتبلورة

تمت دراسة الجسم الصلب المتبلور في سبعينيات القرن الماضي - وصفاً - على أساس تقريب الرابطة الشديدة والرابطة الضعيفة، إلا أن التوصيف الكمي لهذه النظرية يجب أن يقوم على أساس تصوّر البلورة جملة واحدة مؤلفة من جسيمات ثقيلة وأخرى خفيفة. سنعدّ نوى الذرات، جسيمات ثقيلة والإلكترونات، جسيمات خفيفة. فإذا رمزنا لإحداثيات



الشكل (5-2): تمثيل الدوال  $E = E(k_x)$  و  $E = E(k_y)$  و  $E = E(k_z)$  في مستوي واحد للعدد الموجي  $k$  من أجل إلكترون متحرك في حقل كمونٍ دوريّ تغيره منحنٍ يُعطي بنموذج كرونينغ- بيني

النوى بالرموز  $\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3, \dots$  وإحداثيات الإلكترونات بالرموز  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots$ ، فإن الدالة الموجية للبلورة المتعلقة بإحداثيات كل الجسيمات، يُمثل بالشكل:

$$\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3, \dots). \quad (9-2)$$

توصف الحالة المستقرة لجسيمات البلورة بمعادلة شرودنغر

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (10-2)$$

**حيث**  $\hat{H}$  مؤثر هاملتون الذي يتضمن كل أشكال الطاقة الآتية:

### 1 الطاقة الحركية للإلكترونات

$$\hat{T}_e = \sum_i \hat{T}_i = \sum_i \left( -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta_i \right), \quad (11-2)$$

حيث  $m$  كتلة الإلكترون؛ و  $\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$  مؤثر لابلاس من أجل الإلكترون ذي

الرقم -  $i$ ؛

### 2 الطاقة الحركية للنوى

$$\hat{T}_\alpha = \sum_\alpha \hat{T}_\alpha = \sum_\alpha \left( -\frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \Delta_\alpha \right), \quad (12-4)$$

حيث  $M_\alpha$  كتلة النواة؛ و  $\Delta_\alpha$  مؤثر لابلاس من أجل النواة الألفاوية ( $\alpha$ )؛

### 3 الطاقة الكامنة للتأثر الإلكتروني-مثنى - مثنى

$$U_e = \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \vec{r}_{ij}}, \quad (13-2)$$

حيث  $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12}$  F/m ثابت كهربائي (السماحية العازلية للخلاء)؛

### 4 الطاقة الكامنة للتأثر النووي-مثنى - مثنى

$$\hat{U}_z = \hat{U}_z(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3, \dots);$$

### 5 الطاقة الكامنة للتأثر الإلكتروني- النووي

$$\hat{U}_{ez} = \hat{U}_{ez}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3, \dots).$$

ومن ثم، يمكن كتابة مؤثر هاملتون  $\hat{H}$  بالشكل الآتي:

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_z + \hat{U}_e + \hat{U}_z + \hat{U}_{ez}. \quad (14-2)$$

من الواضح، أن معادلة شرودنغر هنا، تحوي عدداً كبيراً من المتغيرات يفوق عدد الذرات في البلورة، ومن ثمَّ حل مثل هذه المسألة، يبدو معقداً جداً، إن لم يكن مستحيلاً. يُستخدم في نظرية عصابات الطاقة المعاصرة، التقريب الأديباتي *Adiabatic Approximation* وتقريب الإلكترون الواحد *One-electron Approximation*، راجع مقرر فيزياء الحالة الصلبة (2).

■ وبما أن الطاقة الحركية الوسطية للجسيمات الثقيلة والخفيفة من رتبة واحدة، فيمكن عدّ الجسيمات الثقيلة غير متحركة عملياً؛

→ فضلاً عن أنه، عند تغيير موضع النوى، فعملياً يتربّخ، وبشكلٍ آني، موضع جديد للإلكترونات، يوافق الموضع الجديد للنوى.

→ وهذا بدوره يسمح؛ كتقريبٍ أولي، دراسة حركة الإلكترونات في حقل النوى اللامتحركة. يسمى مثل هذا التقريب أديباتياً.

■ يمكن تحويل مسألة الجسيمات المتعددة *Many-Body Problem* إلى مسألة إلكترون الواحد (تقريب الإلكترون الواحد). ومن أجل ذلك، تُستخدم **طريقة هارترى-فوك** *Hartree-Fock Method*. تكمن فكرة هذه الطريقة في

→ استبدال طاقة التأثير لجميع الإلكترونات مثني-مثني، **بطاقة تأثر كل إلكترون مع الحقل الوسطي لباقي الإلكترونات**، حيث تُعدّ الطاقة الكامنة للإلكترون ذي الرقم-  $i$  في هذا الحقل مساويةً  $\Omega_i$ .

→ إن **الحقل** المشار إليه، لا يُحدّد حركة الإلكترون المعني وحسب، بل أنّ **الحقل** بحدّ ذاته يتعلق بحركته (بحركة الإلكترون المعني)، ولهذا السبب، يسمى مثل هذا

الحقل **حقل التوافق - الذاتي** *Self-consistence Field*.

إن إدخال مفهوم حقل التوافق - الذاتي يسمح باستبدال المجموع (2-13)، بالمجموع  $\sum_i \Omega_i$ ،

حيث **كل حدّ فيه يتعلق بإحداثيات إلكترون واحد**.

■ يمكن تصوّر الطاقة الكامنة لتأثر الإلكترونات مع النوى على شكل مجموع:

$$U = \sum_i U_i(r_i)$$

النوى.

يمكن كتابة معادلة شرودنجر، عند الأخذ بالحسبان كل ما ذكر أعلاه، بالشكل الآتي:

$$\left\{ \sum_i \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \Omega_i(\vec{r}_i) + U_i(\vec{r}_i) \right] \right\} \Psi_e = E \Psi_e, \quad (15-2)$$

حيث الدالة الموجية للإلكترونات و  $E$  طاقة الإلكترونات.

تصف المعادلة (15-2) جملة جزئية إلكترونية، يتم الحصول عليها، بنتيجة تقسيم المعادلة (10-2) إلى معادلتين؛ واحدة من أجل الجملة الجزئية النووية والثانية من أجل الجملة الجزئية الإلكترونية.

يدخل ضمن إشارة المجموع في المعادلة (15-2) مؤثر هاملتون للإلكترون ذي الرقم  $i$ :

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \Omega_i(\vec{r}_i) + U_i(\vec{r}_i). \quad (16-2)$$

بما أن مؤثر هاملتون (16-2)، لا يحوي طاقة تأثر الإلكترونات، فيمكن تصور الدالة الموجية لجملة الإلكترونات على شكل حاصل ضرب الدوال الموجية للإلكترونات المنفصلة (أي الدالة الموجية لكل إلكترون على حدة):

$$\Psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots) = \psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) \psi_3(\vec{r}_3) \dots = \prod_i \psi_i. \quad (17-2)$$

والطاقة الكلية للجملة تساوي مجموع طاقات الإلكترونات المنفصلة:

$$E = E_1 + E_2 + E_3 + \dots = \sum_i E_i. \quad (18-2)$$

ومن ثم، بدلاً من المعادلة (15-2)، يمكننا كتابة جملة المعادلات الآتية:

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 \psi_1 &= E_1 \psi_1 ; \\ \hat{H}_2 \psi_2 &= E_2 \psi_2 ; \\ \hat{H}_3 \psi_3 &= E_3 \psi_3 ; \\ &\vdots \quad \quad \quad \vdots \end{aligned} \quad (19-2)$$

كل معادلة من هذه المعادلات تخص إلكترونات واحداً، مما يعني أن إدخال حقل التوافق - الذاتي

يسمح بالانتقال من مسألة الجسيمات المتعددة إلى مسألة الإلكترون الواحد

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (20-2)$$

حيث  $\psi(\vec{r})$  الدالة الموجية للإلكترون و  $E$  طاقة الإلكترون في البلورة.

إذا رمزنا للطاقة الكامنة للإلكترون في البلورة بالرمز  $U(\vec{r})$  نحصل على شكل آخر لمعادلة

شروندغر

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}) \right\} \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (21-2)$$

تُحل المعادلة (21-2) في تقريب الرابطة الشديدة أو تقريب الرابطة الضعيفة، وهنا جرى

دراستها في حالة البعد الواحد، على شاكلة المعادلة (3-2). .....

وهكذا، نجد أن النظرية المعاصرة تستند إلى سلسلة من التقريبات التي تسمح بوصف

حالة الإلكترونات في الجسم الصلب؛ غير أن هذه التقريبات تنعكس، وبشكل كبير، على

النتائج، ولذلك يجب ألا ننظر إلى استنتاجات النظريات المبسطة، على أنها انعكاس صحيح

تماماً للحقيقة. إلا أن أسس نظرية عصابات الطاقة مقبولة من أجل تحليل البلورات المختلفة،

فضلاً عن إمكانية تطبيقها على الأجسام الصلبة المتعددة التبلور *Polycrystalline Solid*

*States*، وأيضاً على أنصاف النواقل الأمورف *Amorphous Semiconductors*.

أنصاف النواقل الأمورف هي أجسام صلبة غير متبلورة، لا يتوافر الانتظام البعيد المدى

*Long-Order Arrangement* للذرات أو الأيونات المؤلفة لها، ولكن بشكلٍ أو بآخر يُصان

الانتظام القريب المدى *Short-Order Arrangement* لهذه المكونات فيها.

ولاحقاً، تم استخدام المفصل الأساسية لنظرية العصابات الطاقة أكثر من مرة، والآن

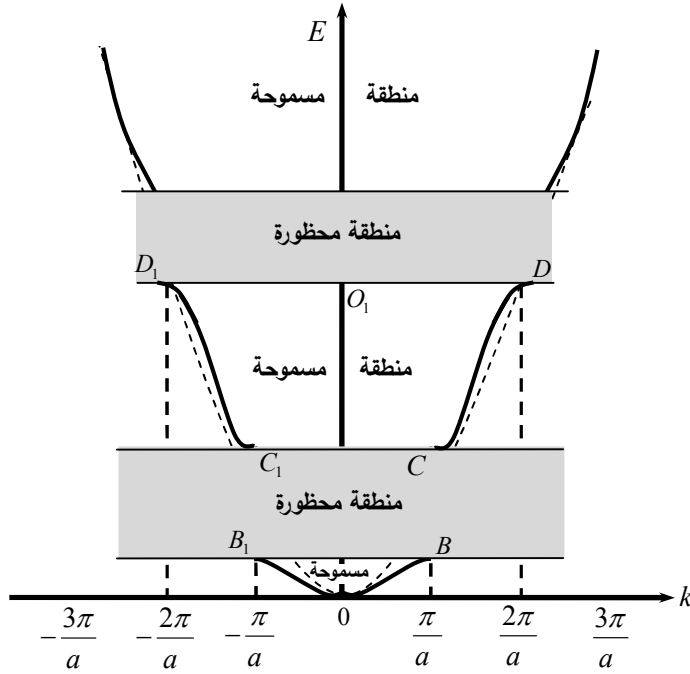
سننتقل إلى دراسة بنية العصابات الطاقية *Band Structure*، مستخدمين ما يسمى الفضاء

$\vec{k}$  - (الفراغ -  $\vec{k}$ ) ( $\vec{k}$  - Space) ومناطق بريلوان *Brillouin Zones* فيها.

### 3 مناطق بريلوان Brillouin Zones:

أستخدم سابقاً مفهوم فضاء الزخم *Impulse-Space* (فراغ- $\bar{p}$ ) الذي يتعيّن عن طريق معرفة الزخم في جملة الإحداثيات الديكارتية؛  $p_x$  و  $p_y$  و  $p_z$ ؛ وحسب المعادلة (7-1)، في الفقرة 1، يتناسب الزخم،  $\bar{p}$ ، تناسباً طردياً مع المتجه الموجي  $\vec{k}$ . ومن ثمّ بدلاً من دراسة فراغ الزخم، يمكن أيضاً دراسة الفراغ- $\vec{k}$ ، الذي يتعيّن بوساطة جملة الإحداثيات  $k_x$  و  $k_y$  و  $k_z$ . وعندها، ليس بالضرورة، في الحالة العامة، أن تكون جملة الإحداثيات المعطاة جملةً ديكارتيةً.

توافق العصابات الطاقية المسموحة في الجسم الصلب مناطق طاقية في الفراغ- $\vec{k}$ ، وفي أبسط حالة، من أجل سلسلة خطية من الذرات، يكون لدينا ما يسمى الفراغ- $k$  أحادي البعد؛ إذ يوضح الشكل (4-2) تمثيلاً لهذا "الفراغ" وفق المحور  $k$ ؛ وهنا، يوافق القطاع الواقع بين



الشكل (4-2): تابعة الطاقة الكلية  $E$  للعدد الموجي  $k$  من أجل إلكترون متحرك في حقل كمونٍ دوريّ

قيمتي  $k$ ؛ من  $-\pi/a$  إلى  $+\pi/a$ ، المنطقة الطاقية الأولى. فهذا القطاع الممتد على المحور الأفقي بطول  $2\pi/a$ ، ليس سوى ما يسمى **منطقة بريلوان الأولى** *First Brillouin Zone* في الفراغ- $k$  أحادي البعد.

تتألف **منطقة بريلوان الثانية** (التالية) من قطاعين؛ الأول من  $\pi/a$  إلى  $2\pi/a$  والثاني، من  $-\pi/a$  إلى  $-2\pi/a$ ؛ وبشكلٍ مشابهٍ، تتعَيَّن مناطق بريلوان التالية من أجل الحالة الأحادية البعد.

- إذن، تُمثَّل مناطق بريلوان من أجل الحالة الأحادية البعد بمقاطعٍ على المحور  $k$ ،  
 → حيث تُعدُّ الطاقة على امتدادها،  $E$ ، شبه مستمرة *Quasi-continuous*، أي دالةً شبه مستمرة "للمتجه الموجي"  $k$ .  
 → وتعاني الطاقة عند تخوم العصابات الطاقية هذه من انقطاعات، يوضحها **الشكل 4-2** بدقة.

- **تتعيَّن مناطق بريلوان في الفراغ- $\bar{k}$  ثلاثي البعد** بصورة معقدة للغاية على الرغم من سهولة إيجاد منطقة بريلوان الأولى من أجل الشبكة البلورية المكعبة؛  
 → إذ إنها تُعدُّ **مكعباً** في الفراغ- $\bar{k}$ ، طول ضلعه يساوي  $2\pi/a$  (حيث  $a$  ثابت الشبكة البلورية).

→ فضلاً عن أنه في هذه الحالة، يوضع مبدأ الحساب،  $k=0$ ، في **إحدى عقد** ما يسمى الشبكة البلورية المقلوبة.

- جرى إدخال مفهوم **الشبكة المقلوبة** *Reciprocal* في الدراسة المذكورة أعلاه من خلال تعيين متجهاتها الأساسية؛

→ فإذا كانت المتجهات الأساسية للشبكة المباشرة  $\bar{a}_1$ ، و  $\bar{a}_2$ ، و  $\bar{a}_3$ ،

→ فإن المتجهات الأساسية للشبكة المقلوبة هي المتجهات  $\bar{b}_1$ ، و  $\bar{b}_2$ ، و  $\bar{b}_3$

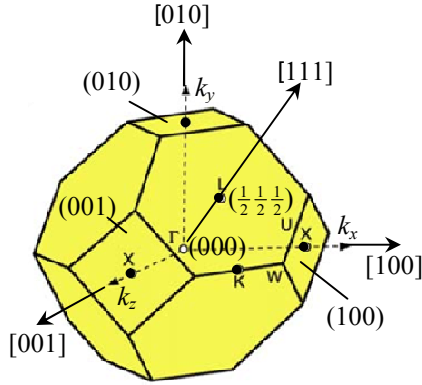
- بالتعريف- والتي تم إيجادها من العلاقات الآتية:

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}; \\ \vec{b}_2 &= 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}; \\ \vec{b}_3 &= 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}.\end{aligned}\quad (22-2)$$

- تُعدُّ الشبيكة المقلوبة من أجل شبيكة مكعبة بسيطة (SC)، شبيكة مكعبة بسيطة أيضاً،
- ومن أجل شبيكة مكعبة متمركز الوجوه (FCC)، شبيكة مكعبة متمركز الحجم (BCC)،
- وبالعكس تكون الشبيكة المقلوبة لشبيكة مكعبة متمركز الحجم BCC، شبيكة مكعبة متمركزة الوجوه FCC.

توجد قاعدة لبناء منطقة بريلوان وفق الشبيكة المقلوبة للبلورة مع الأخذ بالحسبان دوريتها *Periodicity*؛ لاسيما، من أجل الشبيكة المكعبة البسيطة تمتلك، كما أُشير أعلاه، مركزاً في  $k = 0$ ، وطول ضلع يساوي  $2\pi/a$ . المتجهات الأساسية للشبيكة المقلوبة في هذه الحالة ستكون مساويةً، وفقاً للعلاقات (22-2)،  $b_1 = 1/a_1$  و  $b_2 = 1/a_2$  و  $b_3 = 1/a_3$ . تُبنى منطقة بريلوان الأولى من المتجهات التي تملك الطول:  $2\pi b_1 = 2\pi/a$ ، و  $2\pi b_2 = 2\pi/a$  و  $2\pi b_3 = 2\pi/a$ ؛ ولكن هذا ممكن، في حالة الشبيكة المكعبة البسيطة فقط.

- فمثلاً، يوافق الشبيكة البلورية الماسية (من نوع الألماس Diamond) المؤلف من شبيكتين مكعبتين متمركزي الوجوه، تنزاح إحداها بالنسبة للأخرى بمقدار ربع القطر الفراغي، منطقة بريلوان الأولى على شكل مجال من الفراغ  $-k$ ، غير محدود بمكعب، وإنما بمجسم متعدد أوجه مبتورة Truncated Octahedron، يتألف من أربعة عشرة وجهاً؛  
 → ستة منها مربعة الشكل، وثمانية سداسية الشكل، كما يوضح الشكل (6-2).  
 → في هذا الشكل، تبتعد المستويات (100) عن بعضها البعض مسافات مقدارها  $\frac{1}{2}a$ ، حيث  $a$  ثابت الشبيكة البلورية؛



الشكل (6-2): منطقة بريلووان الأولى لشبيكة بلورية مكعبة من نوع الألماس

→ ومن ثمّ تمتلك متجهات الشبيكة المقلوبة ومنطقة بريلووان الأولى في الاتجاهات

$$[100] - [\bar{1}00] \text{ طولاً مشتركاً، يساوي } \frac{4\pi}{a} = \frac{2\pi}{a/2}$$

بتعبير آخر، **يساوي طول** قطعة من المحور  $k$ ، **يُحسب** من المبدأ  $k = 0$ ، في الاتجاه

$[100]$ ،  $\frac{2\pi}{a}$ ، وفي الاتجاه  $[\bar{1}00]$ ، أيضاً  $\frac{2\pi}{a}$ . ومن ثمّ، تُبنى منطقة بريلووان

الأولى هنا، من  $\frac{2\pi}{a}$  إلى  $-\frac{2\pi}{a}$ ، مما يميّزها عن السلسلة الخطية البسيطة (الشبيكة

الخطية البسيطة)، التي تُبنى من  $-\pi/a$  إلى  $\pi/a$ .

→ يمكن أيضاً، أن نرصد مشهداً مماثلاً لما سبق من أجل الاتجاهات الأساسية  $[010]$ ،

و  $[0\bar{1}0]$ ، و  $[001]$ ، و  $[00\bar{1}]$ . إذ طول كل قطاع من هذه القطاعات الواقعة على

المحور  $k$ ، وفق كل هذه الاتجاهات، والمحسوبة من المركز  $k = 0$ ، يساوي  $\frac{2\pi}{a}$ .

وبالتالي، **يُشار إلى إحداثيات مراكز الأوجه- المربّعة** الشكل وفق المحاور  $k_x$ ، و

$$k_y \text{، و } k_z \text{، في الشكل (6-2)، بوحدات الـ } \frac{2\pi}{a}$$

→ **ولكن من أجل الاتجاهات القطرية**  $[111]$ ، **ومثيلاتها**، تساوي الإحداثيات المشار إليها

$$\text{بوحدات } 2\pi/a \text{، القيم } (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$$

→ **وطول قطعة المحور  $k$  في الاتجاه [111] (والاتجاهات القطرية الأخرى)، من مركز العصابة،  $k=0$ ، يبلغ  $\sqrt{3} \pi / a$ .**

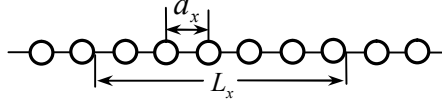
من البلّورات التي تمتلك شبكة الألماس؛ نذكر بلّورة السيلكون وبلّورة الجرمانيوم، حيث تُعدُّ الطاقة داخل الجسم المؤلف من أربعة عشرة وجهاً (أي داخل منطقة بريلوان الأولى) دالة مستمرة (أو شبه-مستمرة) للمتجه الموجي،  $\vec{k}$ ، أو للمركبات ( $k_x$ ، و  $k_y$ ، و  $k_z$ )، فضلاً عن رصد انقطاعات للطاقة؛ كدوال لـ  $\vec{k}$ ، على أوجه منطقة بريلوان. يمكن أن تمتلك مناطق بريلوان الثانية، والثالثة، الخ، أشكالاً أكثر تعقيداً من شكل منطقة بريلوان الأولى، ولكن يمكن الاكتفاء بمنطقة بريلوان الأولى، طالما، وكما سيبدو جلياً لاحقاً، أن مناطق بريلوان اللاحقة تعطي حالات طاقة مكافئة فيزيائياً للحالات الطاقية لمنطقة بريلوان الأولى.

### 1-3 عدد الحالات في منطقة بريلوان الأولى والمنطقة الطاقية المسموحة:

Number of States in First Brillouin Zone and Allowing Energetic Zone

سندرس في البداية، قطاعاً من السلسلة الذرية (الأيونية) الخطية بطول يساوي  $L_x$ ،

الشكل (7-2). من الواضح، أن عدد ذرات السلسلة في القطاع  $L_x$ ، يساوي  $N_x = L_x / a_x$ .



الشكل (7-2): سلسلة خطية من الذرات

نضع مقاطع السلسلة المختارة في **النقطتين**  $x$  و  $x + L_x$ ، في نقاط متكافئة فيزيائياً على

السلسلة، مما يعني أنه يكفي اختيارها على مسافة واحدة بين الذرات؛ ومن ثمّ الدالة  $\psi$  التي

تصف حالة الإلكترونات، يجب أن تحقق المساواة (الشروط الحدية الدورية):

$$\psi(x + L_x) = \psi(x). \quad (23-2)$$

ومن أجل دالة بلوخ، لدينا:

$$e^{ik_x(x+L_x)} = e^{ik_x x}. \quad (24-2)$$

ومن ثمّ تتحقق المساواة الأخيرة، إذا كان

$$e^{ik_x L_x} = 1. \quad (25-2)$$

وتتحقق المساواة (25-2)، عندما فقط عندما  $k_x L_x = n_x 2\pi$ ، حيث  $n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ .

ومن ثمّ يكون لدينا:

$$k_x = \frac{n_x 2\pi}{L_x} = \frac{n_x}{N_x} \cdot \frac{2\pi}{a_x}. \quad (26-2)$$

■ نعين **الحد الأقصى للقيمة المطلقة**  $n_{xm}$ ، انطلاقاً من أن منطقة بريلوان الأولى محدودة

$$. k_x = \pi / a_x \text{ بالقيمة}$$

→ ومن ثمّ نحصل من المعادلة (26-2) على القيمة  $n_{xm} = \frac{1}{2} N_x$ .

→ ومن ثم يكون لدينا في منطقة بريلوان الأولى  $N_x$  قيمة لـ  $k_x$ ، عندما

$$n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm \frac{1}{2} N_x$$

→ بتعبير آخر، لدينا في منطقة بريلوان الأولى  $N_x$  حالة.

■ إذا كان  $L_x$  طول عينة أحادية التبلور Mono-crystal، و  $N_x$  عدد الذرات الموافق

في البعد الخطي المعطى، وأهملنا خرق الدورية عند نهايات العينة، فإننا نحصل وفقاً

للمعادلة (26-2)، على عدد قيم  $k_x$  (عدد الحالات) المساوي لعدد الذرات  $N_x$ .

وبازدياد الطول  $L_x$ ، يزداد عدد الحالات، أي أن هذه الحالات تتوزع بكثافة أكبر، ومن

أجل قيم  $N_x$  كبيرة، يمكن عدّ مناطق بريلوان شبه-مستمرة.

■ إذا درسنا بلورة ثلاثية البعد، فإن كل ما قيل أعلاه، يكرر من أجل كل اتجاه؛ ومن ثمّ

العدد الكلي للحالات في منطقة بريلوان الأولى، يساوي عدد الذرات في البلورة،

$$N = N_x N_y N_z \text{ (من دون أخذ السبين بالحسبان).}$$

■ قد لا يوجد في كل حالة من الحالات المشار إليها، أكثر من إلكترونيين، يختلفان عن

بعضهما البعض بالسبين.

■ وحالة الإلكترون تُعيّن؛ كجسيمة دقيقة، بأربع كميات فيزيائية، أي بالإضافة إلى  $k_x$  و

$k_y$  و  $k_z$ ، الكمية الرابعة هي السبين. ولكن، عندما تكون الكميات  $k_x$ ، و  $k_y$ ، و

$k_z$  معطاة، فهناك قيمتان فقط للسبين.

■ توافق القيم المتقطعة لـ  $k$  مستويات طاقة متقطعة في العصابة الطاقية المسموحة،

والعدد الكلي للحالات في العصابة الطاقية، أيضاً يساوي  $N$ .

■ من المعلوم، أنه يمكن تطبيق مبدأ باولي للاستبعاد على المستويات الطاقية المتقطعة

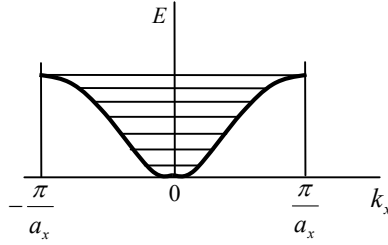
للعصابات المسموحة؛ بتعبير آخر، يُماتّل المستوى الطاقى بحالة طاقية.

→ ولكن مثل هذه المعالجة ليست دقيقة تماماً:

→ في الواقع، يوافق المستوى الطاقى، كرة في فراغ الطاقة (الفراغ الطوري الطاقى)، أي

الكثير من القيم  $k_x$  و  $k_y$  و  $k_z$  أو الكثير من الحالات.

→ ومن ثم، يمكن أن يقع في **المستوى الطاقى الواحد**، ليس إلكترونين فقط، بل الكثير من الإلكترونات؛ حتى في "الفراغ -  $k$  أحادي البعد، يوافق **المستوى الطاقى الواحد**، قيمتين لـ  $k_x$  مختلفتين بالإشارة، أي **إنه يتضمن** حالتين طاقتين، كما يوضح الشكل (8-2)، وكذلك الأمر، يُنظر إلى الفراغ -  $k_y$  و الفراغ -  $k_z$  أحادي البعد.



الشكل (8-2): تمثيل الدالة  $E(k_x)$  من أجل منطقة بريلون الأولى

- بهذا الشكل، يمكن تطبيق مبدأ باولي **على الحالات فقط**، وليس على مستويات الطاقة في العصابة؛ **ولكن**، طالما حساب تركيز حاملات الشحنة يجري عند الأخذ بالحسبان **كثافة الحالات**، فليس من مشكلة هنا؛ إذ تُطبق في العديد من الحالات الطريقة المبسطة (كما فعلنا في **الفقرة 1-1** على سبيل المثال).....
- تُصان في حالة تشكّل عُصابات الطاقة من مستويات متحللة لذرات معزولة (راجع **الفقرة 3-1**) العلاقات (23-2)-(26-2) بذات الشكل (أي تبقى كما هي من أجل المستويات اللامتحللة  $s$ )، وتبقى كمية الحالات في منطقة بريلون وفي العصابة الطاقية، مساويةً  $N$ . في الواقع، لا بد من إجراء حساب إضافي للتحلل، واعتبار عدد الحالات في منطقة بريلون مساويةً  $gN$ ، فضلاً عن وجود عُصابات جزئية -  $g$  في العصابة الطاقية.

### 2-3 دورية الطاقة ومنطقة بريلوان المختزلة

Periodicity of Energy, Reductive Brillouin Zone

تُحدِّدُ دورية الشبكة البلورية دورية الدالة الموجية،  $\psi$ . وبما أن الشبكة المقلووية دورية أيضاً، فإن القيم الخاصة للطاقة، المعيّنة من حل معادلة شرودنغر، يجب أن تكون دوالاً دورية للمتجه الموجي،  $\vec{k}$ .

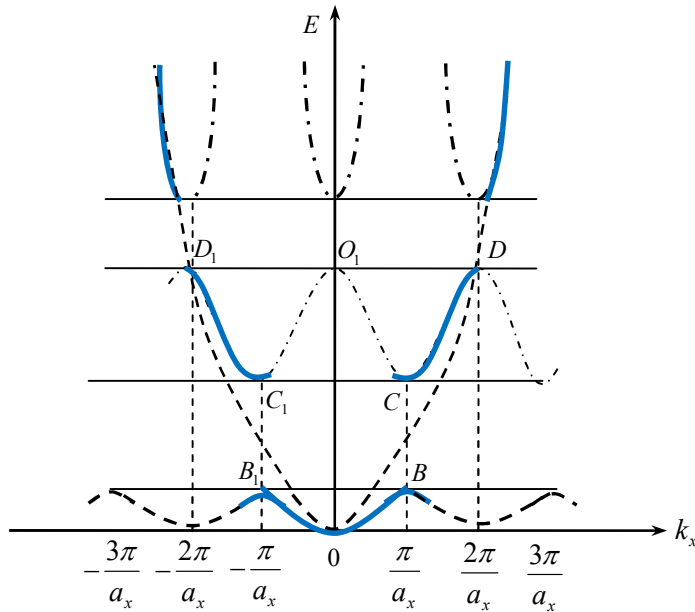
يبلغ دور الدالة الأخيرة وفق المحور  $k_x$ ، كما ذكرنا أعلاه، القيمة  $2\pi/a_x$ . ومن ثمَّ

$$E(k_x) = E\left(k_x + \frac{n2\pi}{a_x}\right), \quad (27-2)$$

حيث يمكن أن نعدُّ هنا، أن  $k_x$  يتغيّر من 0 إلى  $\pm\pi/a_x$ ، أي أن قيم  $k_x$  محدودة بمنطقة بريلوان الأولى. إذ يسمح دخول الحدّ  $\frac{n2\pi}{a_x}$  في العلاقة الأخيرة، باحتساب مناطق بريلوان

المتبقية. ويمكن الحصول على استنتاجات مماثلة من أجل  $k_y$  و  $k_z$ .

■ تُشير الخطوط المتصلة في الشكل (9-2) إلى منحنيات الطاقة  $E(k_x)$ ، من نوع



الشكل (9-2): تمثيل التابعية  $E(k_x)$  من أجل عُصابات طاقة مختلفة

المنحنيات الممثلة في الشكل (2-4)،

■ والخطوط المتقطعة تُشير إلى نفس المنحنيات، ولكن المنزاحة بالنسبة لبعضها البعض، بمقدار  $n 2\pi / a_x$ .

■ ثم إن الخطوط الأفقية توافق قاع وسقف العصابات المسموحة (والمحظورة). وكما يتضح من الشكل، فإن العلاقة (2-27) تتحقق من أجل كل عصابة من العصابات المسموحة، على الرغم من اختلاف المنحنيات  $E(k_x)$  عن بعضها البعض من أجل العصابات المسموحة المختلفة. ومع ازدياد الطاقة  $E$ ، يزداد عرض المناطق المسموحة.

■ وبما أن  $E(k_x)$  دالة دورية، فمن الواضح، أنه ليس ضرورياً تمثيل مختلف مناطق بريلوان؛

→ إذ من الممكن إزاحة قطعة من المنحني،  $CD$ ، في الشكل (2-9) نحو اليسار بمقدار

$$\frac{n 2\pi}{a_x}، أي إزاحتها إلى الموضع  $O_1C_1$ .$$

→ وبالعكس، يمكن إزاحة قطعة المنحني،  $C_1D_1$ ، نحو اليمين بمقدار  $\frac{n 2\pi}{a_x}$ ، أي

إزاحتها إلى الموضع  $O_1C$ .

→ إذن، يمكن نقل منطقة بريلوان الثانية إلى منطقة بريلوان الأولى، وبشكلٍ مشابه، يمكن نقل المنطقة الثالثة إلى الأولى، وهكذا دواليك.

→ تسمى منطقة بريلوان الأولى التي تُثقل إليها منحنيات الطاقة  $E(k_x)$  من أجل عصابات طاقة مختلفة، كما في الشكل (2-10)، منطقة بريلوان المختزلة *Reductive* من أجل حالة "الفراغ" -  $k_x$  أحادي البعد؛

→ سنختار مستقبلاً الفراغ- $k$  أحادي البعد وفقاً لاتجاهات بلورية محددة، بشكلٍ مشابه لما تم فعله في الشكل (2-1).

→ ولاحقاً، سنرى في منطقة بريلوان المختزلة أن العصابات الطاقية التي تستخدم بصورة أساسية هي العصابتان الطاقيتان العلويتان فقط؛ عصابة التكافؤ *Valence Zone*

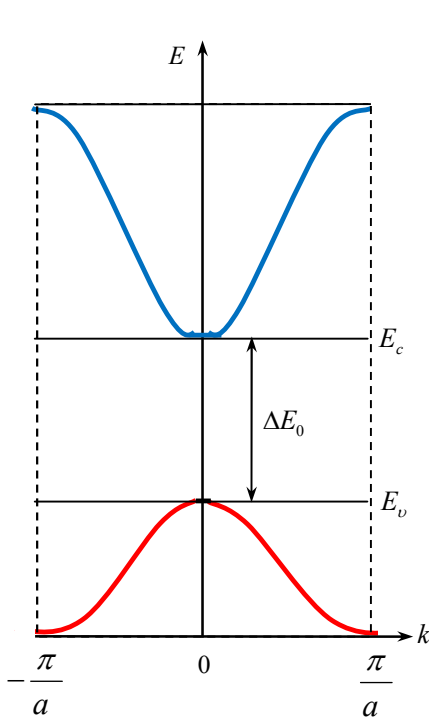
وعصابة الناقلية *Conduction Zone*، لأن الحاملات الحرة للشحنة الكهربائية

تتوزع في هاتين العصابتين. وعند استخدام تقريب الرابطة الضعيفة، فإننا نحصل على

عصابة تكافؤ بنهاية قصوى تقع في  $\vec{k} = 0$  وعصابة ناقلية بنهاية دنيا تقع في

$\vec{k} = 0$ . ثم إن كلتا العصابتين تملكان في جوار  $k = 0$  مسار قطع مكافئ، كما

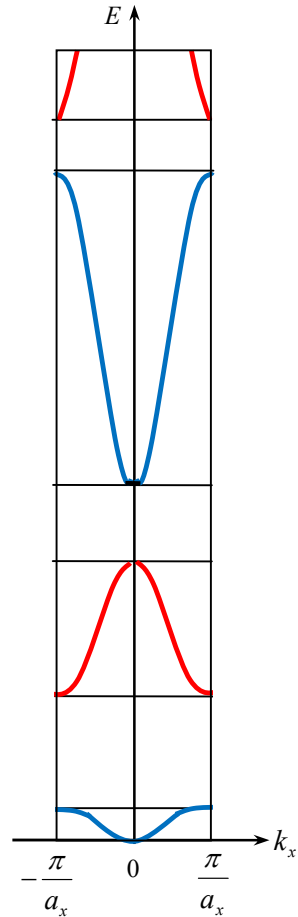
يبدو في الشكل (11-2).



الشكل (11-2): عصابة الناقلية والتكافؤ بنقطتين

حرجتين عندما  $k = 0$  والمسار المكافئ في جوار

$k = 0$  في الفضاء  $k$ -الأحادي البعد



الشكل (10-2): تمثيل الدالة  $E(k_x)$  من أجل عصابات

طاقة مختلفة في منطقة بريلوان المختزلة

### 3-3 الكتلة الفعّالة Effective Mass:

إنّ تأثر الإلكترونات مع الشبكة البلّورية معقّد إلى درجة أن الحساب المباشر لهذا التآثر يُمثّل تحدياً صعباً وجدياً، غير أنه يمكن تجاوز بعض الصعوبات إذا أدخلنا في الحساب ما يسمى **الكتلة الفعّالة؛ وعندها يمكن الانتقال** من مسألة دراسة حركة الإلكترونات **في الحقل الكمونية** للشبكة البلّورية إلى مسألة دراسة حركة الإلكترونات **الحرّة**، أي تطبيق القوانين الأساسية المحققة من أجل الإلكترونات الحرّة على إلكترونات العصابات الطاقية.

لنتوقف في البداية عند الإلكترونات **الحرّة**. فوفقاً للتعريف المعطاة في **الفقرة 1-1**، لدينا:

$$v = \frac{\hbar k}{m}; \quad (28-2)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (29-2)$$

نُعيّن  $k$  من المعادلة (29-2) عن طريق التفاضل، فنجد:

$$\frac{dE}{dk} = \frac{k\hbar^2}{m}. \quad (30-2)$$

ثمّ نعوّض عن العلاقة الأخيرة في المعادلة (28-2)، فنجد:

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}. \quad (31-2)$$

إن العلاقة (31-2) صالحة، ليس من أجل الإلكترونات الحرّة وحسب، بل من أجل الإلكترونات الواقعة في الحقل الكموني للشبكة البلّورية أيضاً. ويمكن الاقتناع بذلك، إذا ما درسنا **سرعة المجموعة لأمواج دوبروي**،  $d\omega/dk$ ، المساوية لسرعة الإلكترون،  $v$ .

لنفرض الآن أن **طاقة إلكترون العصابة الطاقية تتغيّر** تحت تأثير مؤثر خارجي ما: في

هذه الحالة يمكننا كتابة العلاقة الآتية:

$$dE = Fv dt, \quad (32-2)$$

حيث  $F$  قوة خارجية ما تؤدي إلى تغيّر طاقة الإلكترون.

وبالتعويض عن (31-2) في العلاقة (32-2) نجد:

$$dE = \frac{F}{\hbar} \cdot \frac{dE}{dk} dt . \quad (33-2)$$

ومنه، نحصل على العلاقة الآتية:

$$\frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} F . \quad (34-2)$$

ولدينا أيضاً من العلاقة (31-2):

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{d^2 E}{dk^2} \cdot \frac{dk}{dt} , \quad (35-2)$$

أو مع الأخذ بالحسبان العلاقة (34-2) يكون لدينا:

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \cdot \frac{d^2 E}{dk^2} F . \quad (36-2)$$

إذا أدخلنا الآن الرمز الآتي

$$m^* = \frac{1}{\frac{1}{\hbar^2} \cdot \frac{d^2 E}{dk^2}} \quad (37-2)$$

إلى العلاقة الأخيرة وأطلقنا عليه اسم **الكتلة الفعالة للإلكترون**، تكون المعادلة (36-2)؛ بمثابة قانون نيوتن الذي يربط بين القوة، والكتلة، والتسارع؛ والمهم هنا، هو أن القوة الخارجية هي القوة الوحيدة المسببة للتسارع، ومن ثمّ يمكن دراسة الإلكترون في الشبكة البلورية؛ **كإلكترون حرٍ**. ومن الواضح أيضاً، أنه يمكن إعادة كتابة المعادلة (37-2) بالشكل الآتي:

$$(m^*)^{-1} = \frac{d^2 E}{dk^2} \cdot \frac{1}{\hbar^2} = \frac{d^2 E}{dp^2} \quad \text{أو} \quad \frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m^*} \quad (38-2)$$

بالنسبة للإلكترونات الحرة فعلياً، والتي من أجلها العلاقة (29-2) محققة،  $m^* = m$ ، وذلك وفقاً للعلاقة (37-2). ولكن من أجل إلكترونات العصابات الطاقية، يمكن أن تتطابق الكتلة الفعالة،  $m^*$  مع الكتلة،  $m$ ، **فقط ما دام قانون نيوتن**، الممثل بالعلاقة (36-2)، محققاً، ومن ثمّ ثمة

قوانين أخرى محققة من أجل جسمٍ كتلته  $m^*$ . وتبعاً لقيمة  $\frac{d^2 E}{dk^2}$ ، فإن قيمة  $m^*$  تتغير في

حدود كبيرة.

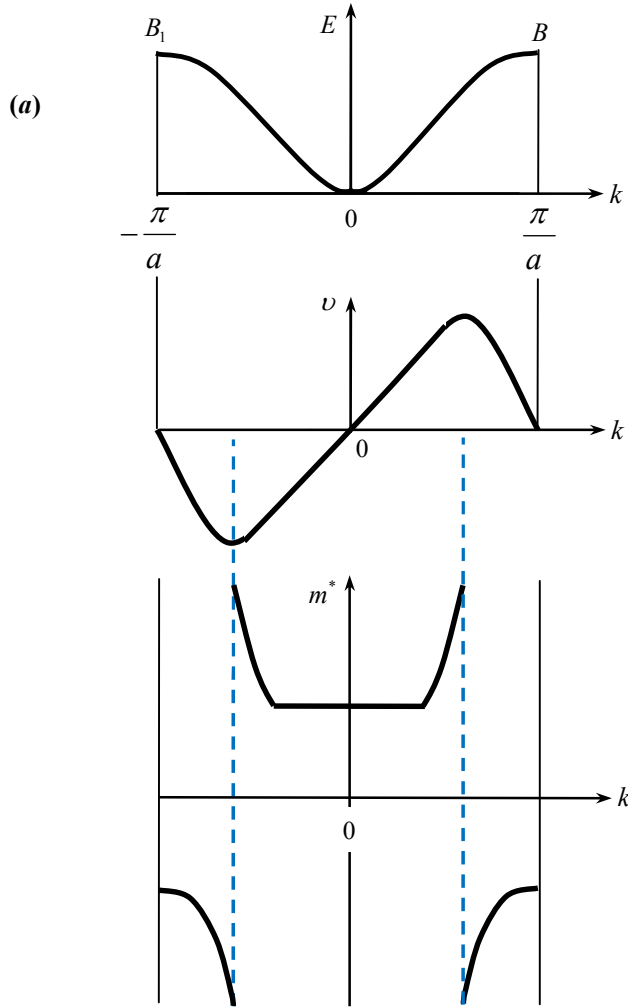
### 1-3-3 التمثيل البياني لتابعة الكتلة الفعالة للإلكترون للعدد الموجي:

Graphical representative of wave number-effective mass dependence

سندرس المنحنيات الثلاثة التي يوضحها الشكل (12-2): إذ يوضح الشكل (12a-2) التابعة

من أجل عصابة واحدة من عصابات الطاقة في حدود منطقة برييلوان الأولى، والشكل

(12b-2) التابعة  $v(k)$ ، المعيّنة بالعلاقة (31-2)، والشكل (12c-2) التابعة  $m^*(k)$ ،



الشكل (12-2): تمثيل الدوال  $E(k)$  و  $v(k)$  و  $m^*(k)$  في عصابة طاقة مسموحة

المعينة بالعلاقة (2-37).

- إذا امتلك المنحني  $E(k)$ ، بجوار  $k = 0$ ، شكل قطع مكافئ (علاقة  $E$  مع  $k$  تربيعية)،
- فإن السرعة،  $v(k)$ ، في مكان مماثل لهذا الجوار، تُعد دالة خطية للعدد الموجي،  $k$ ،
- و الكتلة الفعالة  $m^*$  مقداراً ثابتاً موجباً.
- ومن ثم، تُعزى تلك التابعة إلى قاع العصابة الطاقية، وبدقة أكثر، إلى مستويات الطاقة المتوضعة بجوار قاع العصابة الطاقية.
- وفي نقاط تحذب المنحني  $v(k)$ ، فإن السرعة  $v$ ، تبلغ قيمة حدية Extreme Values، وتتوّل الكتلة الفعالة،  $m^*$ ، إلى اللانهاية.
- فعند الاقتراب من النهاية الحدية من جهة قيم  $k$  الصغيرة (بالقيمة المطلقة)، فإن قيمة  $m^*$  تتوّل إلى  $+\infty$
- وعند الاقتراب منها من جهة قيم  $k$  الكبيرة (بالقيمة المطلقة)، فإن قيمة  $m^*$  توّل إلى  $-\infty$ .
- بهذا الشكل، نجد أن الكتلة الفعالة في الجزء الأوسط من العصابة الطاقية المسموحة للإلكترونات تُعد مقداراً غير معين؛ غير أن ذلك لا يُبدي تأثيراً حقيقياً على النتائج المستقبلية، طالما أن كل الظواهر تقريباً في أنصاف النواقل والعوازل مرتبطة بانشغال المستويات الطاقية بجوار قاع العصابة الطاقية المسموحة أو بشغورها بجوار سقف العصابة الطاقية.
- يكون المنحني  $E(k)$  بجوار النقطتين  $B$  و  $B_1$  مستقيماً أفقياً تقريباً، أمّا الكمية  $\frac{dE}{dk}$  في النقطتين  $B$  و  $B_1$  نفسيهما، فتساوي الصفر، ولذلك، وتبعاً للعلاقة (2-31)،
- $v = \hbar^{-1}(dE / dk)$ ، فإن سرعة الإلكترونات عند تخوم منطقة بريلوان تساوي الصفر.
- وهذا بدوره يوافق توقف الإلكترونات وانعكاسها عن الشبكة البلورية، بحيث تُغيّر قيم الزخم،  $p$ ، والعدد الموجي،  $k$ ، إشاراتها.

→ إذ يُعتقد هنا أن الإلكترون يهجر النقطة  $B$  ويظهر في النقطة  $B_1$  أو بالعكس، يهجر النقطة  $B_1$  ويظهر في النقطة  $B$ . وتبدو قيمة  $m^*$  **بجوار** سقف (قمة) عصابة الطاقة محدودة ولكنها **سالبة**؛

→ إذ يمكن تفسير ذلك **بتسارع الإلكترون في الاتجاه المعاكس** لاتجاه تأثير القوة الخارجية،  $\vec{F}$ ، حيث يتكوّن التسارع المشار إليه هنا بالقوة الداخلية التي تؤثر بها الشبكة البلورية.

→ وبهذه الطريقة، نجد أن **الكتلة الفعّالة** للإلكترونات، **بجوار** سقف العصابة الطاقية المسموحة، تكون مقداراً **سالباً**. وطالما أن القوة،  $\vec{F}$ ، ذات طبيعة كهربائية، فليس صعباً أن نفهم أنه إذا درسنا، **عوضاً عن الإلكترون، ثقباً** أي فجوة موجبة تمتلك شحنة أولية موجبة  $(e = 16 \times 10^{-19} \text{ C})$ ، فإن هذا الثقب سيتسارع، في الحالة المعطاة، في اتجاه القوة،  $\vec{F}$ .

→ ومن ثمّ **بجوار** سقف العصابة المسموحة، يمكن تعيين الكتلة الفعّالة الموجبة للثقب، بشكلٍ مشابهٍ لتعيين الكتلة الفعّالة للإلكترون، أي باستخدام العلاقة،

$$m^* = \left( \frac{1}{\hbar^2} \cdot \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$$

وعندها يتم إيجاد قيمة  $m^*$  بسهولة. وكما سيتضح

لاحقاً، فإن الثقب تحديداً هي التي تُعدُّ حاملات للشحنة الكهربائية عندما تنجم الظواهر المدروسة من العمليات التي تجري في مستويات الطاقة **بجوار** سقف المنطقة الطاقية المسموحة. ....

### 3-3-3 الكتلة الفعالة للإلكترون؛ كنتسورٍ وتعيين الكتلة الفعالة للإلكترونات والثقوب تجريبياً:

The Effective Mass of Electron and Experimental Determination of the Electrons and Holes Effective Mass 7/4/2026

- تتعین الكتلة الفعالة للإلكترون تبعاً للمقدار  $d^2E/d\vec{k}^2$ ، حيث الكمية  $\vec{k}$  هي مقدار متجه. وفي هذه الحالة، المشتق الثاني للطاقة بالنسبة للمتجه الموجي،  $\vec{k}$ ، يُعدُّ تنسوراً من المرتبة الثانية:

$$\frac{d^2E}{d\vec{k}^2} = \left( \frac{d}{d\vec{k}} \cdot \frac{\partial E}{\partial k_x}; \frac{d}{d\vec{k}} \cdot \frac{\partial E}{\partial k_y}; \frac{d}{d\vec{k}} \cdot \frac{\partial E}{\partial k_z} \right)$$

$$= \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{vmatrix} \quad (45-2)$$

- يتضح من العلاقة (45-2) أن  $d^2E/d\vec{k}^2$  عبارة عن مقدارٍ مؤلفٍ من تسعة مشتقات

جزئية للطاقة من المرتبة الثانية بالنسبة للمتجه الموجي. تسمى المقادير  $\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}$  **مركبات**

أو **عناصر التنسور**؛ لا تتعلق قيمة المشتق المختلط بترتيب التفاضل:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} = \frac{\partial^2 E}{\partial k_j \partial k_i} \quad (46-2)$$

يسمى مثل هذا التنسور **تنسوراً متناظراً** والحدود ذات الشكل  $\partial^2 E / \partial^2 k_i^2$  تسمى **أقطار التنسور**.

- بهذا الشكل، تبدو **الكتلة الفعالة** المساوية لمقلوب  $d^2E/d\vec{k}^2$ ، **تنسوراً** أيضاً. وفي الاتجاهات المختلفة لحركة الإلكترون في البلورة يمكن أن تمتلك كتلته الفعالة قيماً مختلفة،

أي إنها تتغير تبعاً لاتجاه حركة الإلكترون. هذا يعني أن الكتلة الفعالة في الحالة العامة متناحية (غير متماثلة المناحي) *Anisotropic*.

يمكن إعادة كتابة التنسور (2-45) على شاكلة التنسور  $d^2E/dp^2$  الذي يُعدُّ، تبعاً للعلاقة (2-38)، تنسوراً لمقلوب الكتلة الفعالة:

$$\frac{d^2E}{dp^2} = (m^*)^{-1} = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial p_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_x \partial p_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_x \partial p_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial p_y \partial p_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_y \partial p_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial p_z \partial p_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_z \partial p_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_z^2} \end{vmatrix}. \quad (47-2)$$

■ يمكن تعيين الكتلة الفعالة للإلكترونات والثقوب المشاركة في الناقلية تجريبياً باستخدام طريقة التجاوب السيكلوتروني.

→ يكمن جوهر هذه الطريقة في الآتي: توضع البلورة في حقل مغنطيسي ثابت (تحريضته  $\vec{B}$ ) اتجاهه معلوم؛ **فقوة لورانتس** المؤثرة في الإلكترون، عندما  $\vec{v} \perp \vec{B}$ ، تعطى بالعلاقة

$$F_l = e v B. \quad (48-2)$$

وهي **قوة طرد مركزي**

$$F_c = \frac{m v^2}{r}.$$

ومنه نحصل على نصف قطر الدوران،  $r$ :

$$r = \frac{m v}{e B}. \quad (49-2)$$

ويمكن التعبير عن السرعة الخطية،  $v$ ، بدلالة السرعة الزاوية،  $\omega$ :

$$v = \omega r. \quad (50-2)$$

وتبعاً للعلاقتين (2-49) و (2-50) نجد أن:

$$\omega = \frac{eB}{m} \quad (51-2)$$

وبتعيين القيمة التجاوبية للتواتر،  $\omega$ ، تجريبياً عند معرفة شدة الحقل المغناطيسي،  $B$ ، يمكننا وفقاً للعلاقة (51-2) تعيين الكمية  $m = m^*$ .

■ إذن، **يمكن** إيجاد الكتلة الفعّالة لكل من الإلكترونات والثقوب من أجل اتجاهات مختلفة في البلورة بطريقة تجريبية. أضف إلى ذلك، تُعَيَّن الكتلة الفعّالة للإلكترونات والثقوب عند دراسة الظواهر الكهروحرارية والظواهر الغلفانية-المغناطيسية أيضاً.

## 4-2 البنية المعقدة للعصابات الطاقية لأنصاف النواقل في الفراغ- $\vec{k}$ :

The Complex Structure of Zones in  $\vec{k}$  - Space for Semiconductors

يوضح الشكل (11-2) عُصَابَتِي التَكَافُؤِ والناقلية **بنهايات حدية عند النقطة  $k = 0$** ؛ فإذا كانت سطوح تساوي الطاقة في الفراغ- $k$  كروية، **فالكثلة الفعّالة متماثلة المناحي Isotropic**، أي إنها لا تتعلق باتجاه حركة الإلكترون؛ ولكن شكل العصابات الطاقية في الفراغ- $k$  من أجل البلورات نصف الناقلة الأكثر انتشاراً، يُعدُّ أكثر تعقيداً.

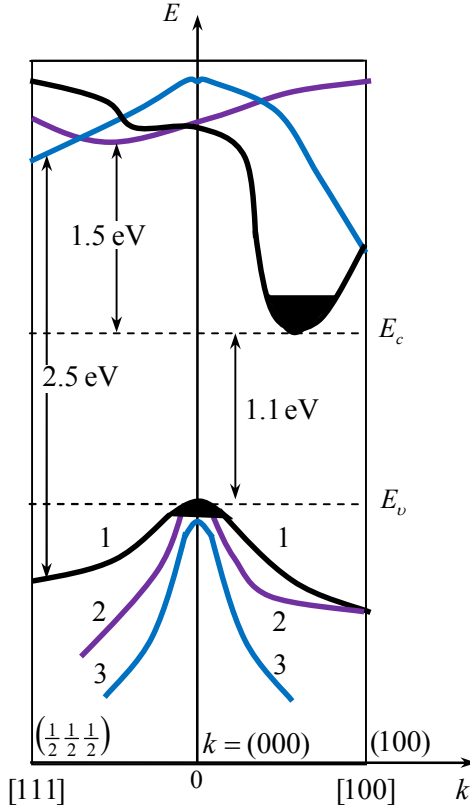
## 1-4-2 بنية عصابة الطاقة للسيلكون Zone Structure of Silicon

تحتوي ذرة السيلكون 14 إلكترونات **موزعاً** على الحالات وفق الآتي:

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

- يجدر بالذكر أن الحالات- $p$  في الذرات تتصف بالتحلل الثلاثي (أي أن درجة انطباق الحالات- $p$  تساوي 3).
- **إن عصابة التكافؤ**، وكذلك عصابة الناقلية، للبلورة هي بمثابة **تراكم لثلاث عصابات جزئية**.
- فمن أجل السيلكون يوضح الشكل (14-2) **ثلاثة منحنيات في عصابة الناقلية وثلاثة منحنيات في عصابة التكافؤ**.

→ وضع على المحور الأفقي، على يمين  $k = 0$ ، **منطقة بريلوان المختزلة** من أجل الاتجاه [100].



الشكل (14-2): بنية عصابة الطاقة لبلورة السيلكون من أجل اتجاهين في الفضاء  $k$ -

→ إذ يمكن كتابة إحداثيات حدّ العصابة الطاقية بالشكل؛  $(2\pi/a, 0, 0)$ ، أي إن الطول وفق  $k_x$  يوافق القيمة  $2\pi/a$ .

→ أما على يسار  $k = 0$ ، وضعت منطقة بريلوان المختزلة من أجل الاتجاه [111] وتساوي إحداثيات حدّ العصابة مقدرةً بوحدات الـ  $2\pi/a$ ؛  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ، أي أنه يمكن كتابتها بالشكل  $(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ ، وهو ما يتضح أيضاً من الشكل (6-2). ثم إن طول

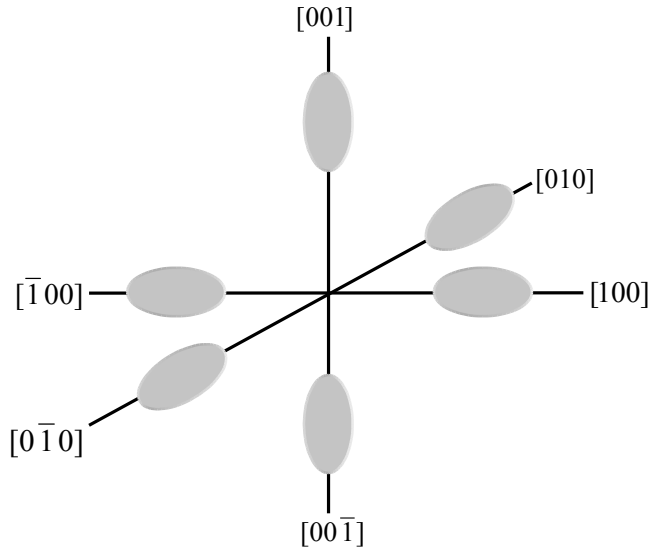
المحور  $k$  الموافق لحدّ العصابة الطاقية، يساوي  $\frac{\sqrt{3}\pi}{a}$ .

■ ويتضح من الشكل (14-2) أيضاً أنّ أحد منحنيات الـ  $E(k)$  يمتلك من أجل عصابة الناقلية في الاتجاه [100] نهاية دنيا (مطلقة) عميقة *Deep (Absolute)*  $Minimum$ ؛ يسمى المجال حول النهاية الدنيا هذه "واديًا" *Valley*، وفي الحالة المعطاة، يُحدّد قاع الوادي قاع عصابة الناقلية،  $E_c$ .

→ تشغل إلكترونات الناقلية هذه النهاية الدنيا المطلقة، مُشكّلةً بذلك "سائلاً إلكترونياً" *"Electron Liquid"*، ممثلاً في الشكل (14-2) بالتظليل الأسود.

→ توجد في بلورة السيلكون ستة "أودية" متكافئة حول النهايات الدنيا المطلقة من أجل الاتجاهات الرئيسية؛ [100]، و  $[1\bar{0}0]$ ، و [010]، و  $[0\bar{1}0]$ ، و [001]، و  $[00\bar{1}]$ .

فإنّ تم تعيين سطح تساوي الطاقة بجوار قاع الوادي في الفراغ- $k$ ، فإنه يبدو على هيئة مجسم قطع ناقص دوراني *Rotated Ellipsoid* بالنسبة لنصف المحور الكبير المتطابق مع الاتجاه [100] أو مع الاتجاه الآخر المشار إليه في الشكل (15-2) للأودية الخمسة. إذ يوضح الشكل (15-2) مجسّمات قطع ناقص من أجل الأودية الستة.



الشكل (15-2): مقاطع سطوح تساوي الطاقة في أودية عصابة الناقلية لبلورة السيلكون

### يتم الحصول على هذه النتيجة تحليلاً بالطريقة الآتية:

لندرس، في الحالة العامة، علاقة طاقة الإلكترون في مجال صغير ما حول المتجه الموجي  $\vec{k}_0$ ، الذي يُعدُّ نقطة نهاية دنيا للطاقة. ننشر الدالة- المنحني  $E(\vec{k})$  في سلسلة تايلور ونكتفي من أجل مجالٍ صغيرٍ بجوار  $\vec{k}_0$  بالحدود الثلاثة الأولى من هذا المنشور:

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \sum_i \left( \frac{\partial E}{\partial k_i} \right)_{\vec{k}_0} (k_i - k_{0i}) + \frac{1}{2} \sum_{ij} \underbrace{\left( \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \right)_{\vec{k}_0}}_{\hbar^2 (m_{ij}^{-1})_{\vec{k}_0}} (k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}), \quad (52-2)$$

→ يأخذ الدليلان  $i$  و  $j$  في هذه العلاقة القيم  $x$ ، و  $y$ ، و  $z$  بصورة مستقلة عن بعضها البعض، بحيث يُعدُّ الحدَّان الثاني والثالث من السلسلة (52-2) مجاميع.

→ ولكن طالما في نقطة النهاية الحدية؛  $(\partial E / \partial k_i)_{\vec{k}_0} = 0$ ، فإن المجموع الثاني في المعادلة (52-2) يؤوّل إلى الصفر.

→ نختار في هذه الدراسة جملة إحدائيات بطريقة يتحوّل فيها التنسور المتناظر، الممثل بالعلاقة (47-2)، إلى الشكل القطري، عندما فقط عندما تختلف الحدود الموجودة في القطر الرئيس عن الصفر:

$$(m^*)^{-1} = \begin{vmatrix} m_{xx}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_{yy}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_{zz}^{-1} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} m_1^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_2^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_3^{-1} \end{vmatrix}. \quad (53-2)$$

وفي هذه الحالة، يتحول التنسور (53-2) إلى الشكل الآتي:

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2 (k_x - k_{x0})^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 (k_y - k_{y0})^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 (k_z - k_{z0})^2}{2m_3}, \quad (54-2)$$

أو بدلالة الزخم إلى الشكل الآتي:

$$E(\vec{p}) = E(\vec{p}_0) + \frac{(p_x - p_{x0})^2}{2m_1} + \frac{(p_y - p_{y0})^2}{2m_2} + \frac{(p_z - p_{z0})^2}{2m_3}. \quad (55-2)$$

يمكن الحصول على سطح تساوي الطاقة في الفراغ- $p$ ، إذا فرضنا:

$$E(\vec{p}) - E(\vec{p}_0) = \text{const}. \quad (56-2)$$

$$1 = \frac{(p_x - p_{x0})^2}{2m_1 [E(\vec{p}) - E(\vec{p}_0)]} + \frac{(p_y - p_{y0})^2}{2m_2 [E(\vec{p}) - E(\vec{p}_0)]} + \frac{(p_z - p_{z0})^2}{2m_3 [E(\vec{p}) - E(\vec{p}_0)]}.$$

وتبعاً لقيمة الثابت في الطرف الأيمن من العلاقة (56-2)، يتعين هذا أو ذاك السطح- سطح

تساوي الطاقة؛ ومن الواضح، أن الشرط (56-2)، يعني أن المعادلة (55-2) هي معادلة

مجسم قطع ناقص.

يمكننا كتابة معادلة مجسم القطع الناقص، من أجل  $E(p)$  ثابت، بدلالة أنصاف المحاور  $a$ ،

و  $b$ ، و  $c$ ، بشكلها النهائي الآتي:

$$\boxed{\frac{(p_x - p_{x0})^2}{a^2} + \frac{(p_y - p_{y0})^2}{b^2} + \frac{(p_z - p_{z0})^2}{c^2} = 1.} \quad (57-2)$$

ومن ثم، بمقارنة المعادلتين (55-2) و (57-2) مع بعضهما البعض، نجد:

$$\begin{aligned} a^2 &= 2m_1 [E(\vec{p}) - E(\vec{p}_0)]; \\ b^2 &= 2m_2 [E(\vec{p}) - E(\vec{p}_0)]; \\ c^2 &= 2m_3 [E(\vec{p}) - E(\vec{p}_0)]. \end{aligned} \quad (58-2)$$

■ إن اتجاه المحاور الرئيسية لتتسور الكتلة الفعالة موجبة بطريقة محددة بالنسبة لمحاور

تناظر البلورة.

■ فإذا كان تناظر البلورة، بحيث محوران من المحاور الرئيسية الثلاثة متكافئان فيزيائياً

(المحوران  $x$  و  $y$  مثلاً)، فإن المركبات الموافقة لتتسور الكتلة الفعالة يجب أن تتساوى مع

بعضها البعض؛ وفي الحالة الراهنة، يجب أن تتحقق المساواة:

$$m_1 = m_2 ; a = b. \quad (59-2)$$

وعندها تأخذ معادلة سطح تساوي الطاقة الشكل الآتي:

$$E(\vec{p}) = E(\vec{p}_0) + \frac{(p_x - p_{x0})^2}{2m_1} + \frac{(p_y - p_{y0})^2}{2m_3} + \frac{(p_z - p_{z0})^2}{2m_3}. \quad (60-2)$$

وهذه المعادلة ليست سوى معادلة مجسم قطع ناقص دوراني، يتطابق محوره مع الاتجاه  $p_{z0}$ .

- يوافق هذا الاتجاه، المركبة  $m_3$ ، التي تسمى **كتلة فعالة طولانية** *Longitudinal*، ويُرمز لها بالرمز  $m_l$ :

$$m_3 = m_l. \quad (61-2)$$

- أما المقدار  $m_1 = m_2$ ، فيسمى **كتلة فعالة عرضانية** *Transverse*، ويُرمز لها بالرمز  $m_t$ :

$$m_1 = m_2 = m_t. \quad (62-2)$$

- وعند توافر تلك الحالة، التي من أجلها تكون **كل المركبات متساوية**، أي

$$m_1 = m_2 = m_3 = m^* \quad (63-2)$$

فإن الكتلة الفعالة تُعدُّ مقداراً **سُلمياً** *Scalar*. وفي هذه الحالة، يوصف سطح تساوي الطاقة بالمعادلة

$$E(\vec{p}) = E(\vec{p}_0) + \frac{p^2}{2m^*} \quad (64-2)$$

أو بالمعادلة:

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (65-2)$$

- وهكذا، نجد أن المعادلتين (64-2) و (65-2) تصفان **سطوح تساوي طاقة كروية**

**الشكل**؛ فضلاً عن أنه أفترض أن **النهايات الحدية تقع في النقاط**  $\vec{k}_0$  **لمنطقة**

**بريلوان**. ومثل هذه الحالة، تتحقق في بعض أنصاف النواقل.

- عندما تقع النهاية الحدية في مركز منطقة بريلوان، فيمكن أن نضع على وجه

الخصوص،  $E(\vec{k}_0) = 0$ ، والحصول على المعادلة الآتية:

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (66-2)$$

أي نحصل على علاقة من نوع العلاقة (6-1)، من أجل جسيم حر يمتلك طاقة حركية فقط. ولكن إدخال الكتلة الفعّالة،  $m^*$ ، في العلاقات التي تم استنتاجها في هذه الفقرة، يراعي كما أشرنا سابقاً، هدف الانتقال من حركة إلكترونات العصابات الطاقية إلى حركة الجسيمات الحرة. ومن أجل سطوح تساوي الطاقة كروية الشكل؛ التي لا تنطبق مراكزها على مركز منطقة بريليون، فيمكن استخدام العلاقة (60-2) بعد الأخذ فيها بالحسبان المساواة  $m_1 = m_2 = m_3$ . تُعطي تجارب التجاوب السيكلوتروني من أجل بلّورات السيلكون قيم مركّبات تنسور الكتلة الفعّالة للإلكترونات الواقعة بجوار قاع الوادي (قاع عصابة الناقلية) بالشكل الآتي:

$$\begin{cases} m_1 = m_2 = m_l = 0.19 m ; \\ m_3 = m_t = 0.98 m , \end{cases} \quad (67-2)$$

حيث  $m$  كتلة الإلكترون الحر، و  $m_l$  الكتلة الفعّالة الطولانية، و  $m_t$  الكتلة الفعّالة العرضانية. وتعطي نسبة نصف محور القطع الناقص، وفقاً للعلاقة (58-2)، المساواة الآتية:

$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{m_l}{m_t}} = 2.72 . \quad (68-2)$$

**سُدخل الآن ما يسمى الكتلة الفعّالة لكثافة الحالات:**

→ عند حساب كثافة الحالات،  $N(E)$ ، وتركيز إلكترونات الناقلية،  $n_0$ ، ومقادير أخرى، يُستخدم **المتوسط الهندسي** لمركّبات الكتلة الفعّالة الثلاث المشار إليها.

→ أضف إلى ذلك، يُحسب **عدد الأودية المتكافئة**  $M$  **مكان وجود** إلكترونات الناقلية؛ ولكي

يكون لدينا إمكانية استخدام علاقة من الشكل (17-1)،  $N(E) = \frac{2\pi (2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2}$ ،

تُعيّن ما تسمى الكتلة الفعّالة لكثافة الحالات **من أجل الإلكترونات** والتي يمكن كتابتها بالشكل:

$$m_n = \sqrt[3]{M^2 m_1 m_2 m_3} , \quad (69-2)$$

حيث لا بد من إدخال الكمية  $m_n$  في العلاقة (17-1) عوضاً عن الكمية  $m$ ، فضلاً عن أن

$$M = (M^{2/3})^{3/2} = M$$

$$. N(E) = M \frac{2\pi(2m_n)^{3/2}}{h^3} E^{1/2}$$

→ وعندها تُحسب الطاقة  $E$  بدءاً من قاع عُصابة الناقلية (قاع الوادي)،  $E_c$ ، لأن العلاقات المستعملة، هي من أجل إلكترونات عُصابة الناقلية. وهكذا نحصل من العلاقة (2-69) من أجل السيلكون على الكتلة الفعّالة الآتية لكثافة الحالات للإلكترونات:

$$m_n = \sqrt[3]{M^2 m_1 m_2 m_3} = \sqrt[3]{36^2 (0.19)^2 0.98 m^3} = 1.08 m . \quad (70-2)$$

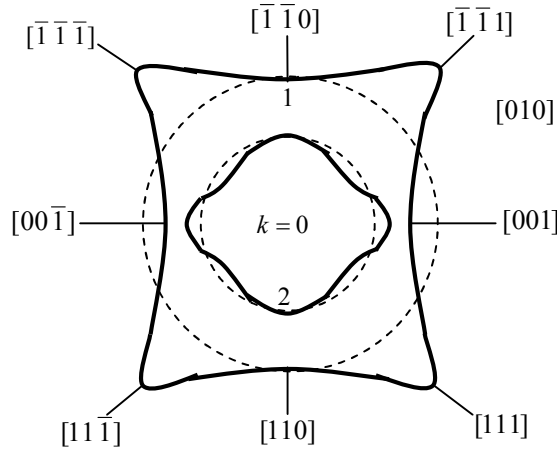
→ بهذا الشكل، نجد أن ثمة إمكانية لاستبدال مجسّمات القطوع الناقصة الستة المتوفرة من أجل بلورة السيلكون بسطح تساوي طاقة كروي واحد بكتلة فعّالة من أجل كثافة الحالات،

$$. m_n = 1.08 m$$

ننتقل الآن إلى عُصابة التكافؤ:

- تمتلك المنحنيات  $E(\vec{k})$  عند سقف عصابة التكافؤ، الشكل (2-14)، نهاية حدية قصوى *Maximum* تقع في النقطة  $k = 0$ ، أي في مركز منطقة بريلوان:
  - يتصف المنحنيان 1 و 2 بنقطة حدية مشتركة يوافقان ثقب ثقيلة (1) وثقب خفيفة (2)، تتعّين كتلتها الفعّالة بجوار  $k = 0$ .
  - يؤدي التآثر السبيني- المداري *Spin-Orbital Interaction* لانزياح النهاية الحدية القصوى للمنحني 3 نحو الأسفل، بمقدار  $0.035 \text{ eV}$ ؛ عادةً، لا تُرصد هذه الثقوب تجريبياً، لأن الانزياح المشار إليه للنهاية الحدية القصوى نحو الأسفل كبير كفايةً.
  - تشغل ثقوب الناقلية أعلى المستويات الطاقية في عصابة التكافؤ، ويُشار في الشكل (14-2) إلى اصطلاح "سائل الثقوب" "*Hole Liquid*" بالتظليل الأسود.
- يوضح الشكل (2-16) المقطع العرضي في المستوي  $(\bar{1}\bar{1}0)$  - مستوى سطوح ثبات الطاقة العائدة للعصابتين الجزئيتين 1 و 2. تم رسم الخطوط المتقطعة لتشير إلى اختلاف سطوح تساوي الطاقة عن الكرات (إذا مثلنا السطح في الفراغ- $k$  ثلاثي البعد).

- **يختلف** سطح تساوي الطاقة من أجل **الثقوب الخفيفة** *Light* (المنحني 2 في الشكلين 14-2) و (16-2) **قليلاً** عن الكرة، ومن أجل **الثقوب الثقيلة** *Heavy* (المنحني 1 في الشكلين 14-2) و (16-2) **يكون سطح تساوي الطاقة أكثر تموجاً**، أي إنه يوافق كرة



الشكل (16-2): مقاطع سطوح تساوي الطاقة بجوار سقف عصابة التكافؤ لبؤرة السيلكون:  
1- من أجل الثقوب الثقيلة 2- من أجل الثقوب الخفيفة

أكثر تشوهاً؛ ولكن يمكننا أن نعدّ الكتل الفعّالة للثقوب الخفيفة،  $m_{pL}$ ، وللثقوب الثقيلة،  $m_{pH}$ ، متماثلة المناحي (سَلْمِيَّة)، أي يمكننا استبدال السطوح المتموجة بكرات وسطية. تم إيجاد قيم الكتل الفعّالة للثقوب الخفيفة والثقيلة في السيلكون من تجارب التجاوب السيكلوتروني، حيث وجد:

$$\begin{aligned} m_{pH} &= m_{p1} = 0.49 m ; \\ m_{pL} &= m_{p2} = 0.16 m . \end{aligned} \quad (71-2)$$

ومن أجل النوع الثالث للثقوب تم الحصول على القيمة  $m_{p3} = 0.24 m$ . ثم إنَّ:

$$E_3(\vec{k}) = E(0) - E_{S0} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} A , \quad (76-2)$$

حيث من أجل السيلكون:  $A = 4.1$  و  $E_{S0} = 0.035 \text{ eV}$  .....

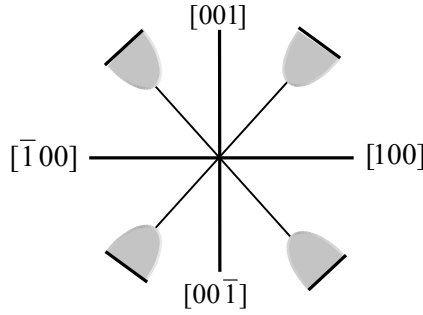


بريلوان في الإتجاه [111].

→ ثمّ إن إحداثيات النهاية الحديّة الدنيا مقدرةً بوحدات الـ  $2\pi/a$ ؛ تأخذ الشكل  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ .

→ **وسطح تساوي الطاقة هنا** عبارة عن مجسم قطع ناقص دوران **بمحور تناظر ينطبق** على الاتجاه البلّوري القطري [111].

→ ومن ثمّ **توجد** من أجل بلّورات الجرمانيوم **ثمان** نهايات حديّة دنيا متكافئة؛ ولكن بما أن هذه النهايات تقع على تخوم منطقة بريلوان، ونصيب منطقة بريلوان الأولى منها **نصف فقط** من كل مجسم قطع ناقص (مجسم طاقة)، كما يوضح **الشكل (2-18)**، فإنه توجد في الجرمانيوم **ليس ثمانية** مجسمات قطع ناقص، وإنما فقط **أربعة مجسمات** قطع ناقص كاملة. وهذا يعني أن  $M = 4$  من أجل الجرمانيوم، ومن ثمّ الجرمانيوم، كما السيلكون، يُعدّ **نصف ناقل متعدد الأودية**.



الشكل (2-18): مقاطح سطوح تساوي الطاقة في وهداث عصابة الناقلية لبّورة الجرمانيوم

تُعطي تجارب التجاوب السيكلوتروني من أجل بلّورات الجرمانيوم قيم مركّبات تنسور

الكتلة الفعّالة للإلكترونات الواقعة بجوار سقف عصابة الناقلية بالشكل الآتي:

$$m_1 = m_2 = m_t = 0.082 m ; \quad (81-2)$$

$$m_3 = m_l = 1.58 m . \quad (82-2)$$

وتبلغ نسبة نصفي محوري مجسم القطع الناقص القيمة:

$$\sqrt{\frac{m_l}{m_t}} = 4.4. \quad (83-2)$$

وتُحسب الكتلة الفعّالة لكثافة الحالات للإلكترونات من العلاقة (2-69)، حيث نجد:

$$m_n = 0.54m. \quad (84-2)$$

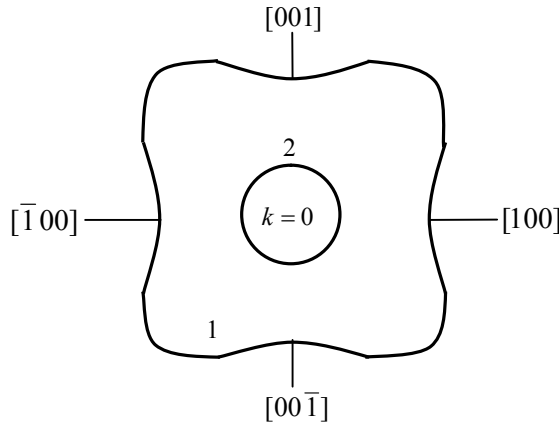
يملك منحني عصابة التكافؤ 1 و 2 قمة مشتركة عند النقطة  $k = 0$ ، والمنحني 3 منزاح بالنسبة لها نحو الأسفل بمقدار 0.28 eV.

بشكلٍ مشابهٍ للسيلكون، تُعيّن سطوح تساوي الطاقة الكروية الوسطية للجرمانيوم؛ وبدقة أكثر، يجب هنا تطبيق التوسيط من أجل الثقوب الثقيلة فقط، كما يظهر في الشكل (2-19)، لأن سطح تساوي الطاقة من أجل الثقوب الخفيفة كروي.

تبلغ قيم الكتل الفعّالة للثقوب في الجرمانيوم

$$\begin{aligned} m_{p1} &= 0.34 m ; \\ m_{p2} &= 0.04 m ; \\ m_{p3} &= 0.08 m . \end{aligned} \quad (85-2)$$

وعملياً، الثقوب الثقيلة في الجرمانيوم هي التي تُعيّن الناقلية الثقبية ثم إن  $m_p \approx m_{pH}$ .



الشكل (2-19): مقاطح سطوح تساوي الطاقة بجوار سقف عصابة التكافؤ لبلورة الجرمانيوم:

1- من أجل الثقوب الثقيلة 2- من أجل الثقوب الخفيفة

### 3-4 بنية عصابة الطاقة لبعض المركبات $A^{III}B^V$ :

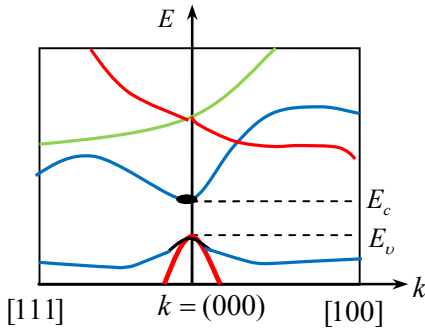
#### Zone Structure of $A^{III}B^V$ Complexes

لقد وجدت مركبات عناصر المجموعتين الثالثة والخامسة للجدول الدوري لمندلييف، والتي يُرمز لها بالرمز  $A^{III}B^V$ ، والمسماة عناصر انتقالية، تطبيقات واسعة في إلكترونيات أنصاف النواقل والمجالات التكنولوجية الأخرى. وأكثر المركبات المعروفة في هذه المجالات هي: GaAs، و InSb، و GaP، و GaSb.

■ إن **سطوح تساوي الطاقة** لعصابة التكافؤ وعصابة الناقلية **للمركبات** المشار إليها، تُعدُّ **كرويةً**، ومن ثمَّ **الكتلة الفعّالة** للإلكترونات والنقوب تُعدُّ **سُلميةً**.

■ **تتشكل** العصابات الطاقية من تراكم ثلاث حزم طاقة (عصابات جزئية)، لأنها تنشأ من السويات- $p$ : تكون العصابتان الجزئيتان في عصابة التكافؤ منزاحتين بعض الشيء بالنسبة لبعضها البعض، بحيث تكون النهايات الحديّة منزاحة عن مركز منطقة بريليون في الاتجاه [111] أو الاتجاه [100]. وقيمة الانزياح تحقق المتراجحة؛ التي تنص على أن الطاقة  $E(0)$  أقل من الطاقة في النهاية الحديّة القصوى، بمقدار أجزاء مئوية أو أجزاء ألفية من الإلكترون- فولط. وأصغر الانزياحات (يمكن أن يساوي الصفر) متوافر في InSb و InAs.

**تتألف عصابة الناقلية** من ثلاث عصابات جزئية؛ يمكن أن تتواجد النهايات الحديّة في مركز منطقة بريليون وفي مناطق أخرى.



الشكل (20-2): بنية عصابة الطاقة لبلورة أنتيموانيد الإنديوم

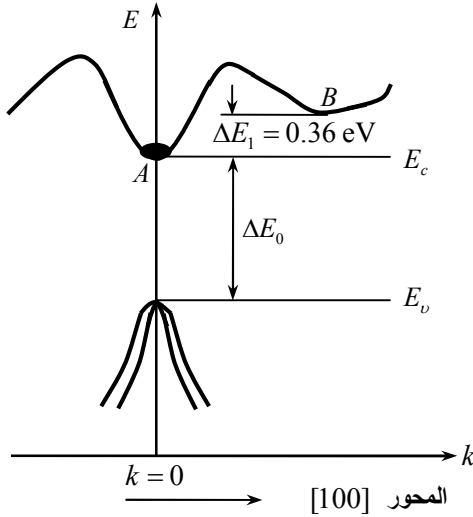
يوضح **الشكل (20-2)** بنية عصابة الطاقة للمركب InSb؛ بمثابة مثال، حيث توافق النهاية الحديّة الدنيا المطلقة النقطة  $k = 0$ ، أي تقع في مركز منطقة بريليون الأولى المختزلة. ثم إن قيم الكتل الفعّالة من أجل المركب InSb في قاع عصابة الناقلية وعند سقف عصابة التكافؤ تساوي:

$$m_n = 0.013 m ; \quad m_p = 0.6 m .$$

حيث يبلغ عدد الأودية المتكافئة هنا الواحد؛  $M = 1$ ، والكتلة الفعالة متماثلة المناحي. ولكن، وخلافاً لنظريات الإلكترون الحر للعصابات الطاقية التي لها شكل القطوع المكافئة، توصف العصابات المسموحة في InSb في الفراغ- $k$  بمنحنيات لا تُعدُّ قطعاً مكافئةً تربيعية. بتعبير آخر، تتغير الكتلة الفعالة للإلكترونات عند ازدياد الطاقة، أي بازياد **الطاقة** تزداد الكتلة الفعالة للإلكترون. وثمة حالة مشابهة، تُلاحظ من أجل الثقوب الخفيفة.

نلاحظ أيضاً، أن بلورة أنتيموانيد الإنديوم (InSb) تتصف بعرضٍ صغيرٍ للمنطقة المحظورة ( $\Delta E_0 = 0.17 \text{ eV}$  عند الدرجة 300 K)، واستناداً إلى هذه القيمة يُنظر إلى مثل هذه المواد النصف الناقلة على أنها أنصاف نواقل ضيقة المنطقة المحظورة.

يوضح **الشكل (21-2)** مقاطع منفصلة من بنية عصابة الطاقة **لزنبريد الغاليوم (GaAs)**. ومن المعروف، أن  $m^* = 0.07 m$ ، في النهاية الحدية الدنيا- $A$  وفي النهاية الحدية الدنيا الأعلى- $B$ ؛  $m^* = 1.2 m$ .



الشكل (21-2): مقاطع من بنية عصابة الطاقة لبلورة GaAs

## 5 الفلزات، وأنصاف النواقل، والعوازل Metals, Semiconductors, and Dielectrics:

تختلف الفلزات عن اللافلزات، وفقاً لنظرية عصابات الطاقة، بغياب المنطقة المحظورة أو بالانشغال غير الكامل لعصابة التكافؤ. والاختلاف بين أنصاف النواقل والعوازل اصطلاحياً - شرطي؛ إذ يوافق عرض المنطقة المحظورة عند أنصاف النواقل الشرط؛  $\Delta E_0 \leq (2-3)eV$  وتكون كل الحالات في عصابة التكافؤ، في درجة حرارة منخفضة، مشغولة بالإلكترونات، أمّا من أجل العوازل، فيحقق عرض المنطقة المحظورة الشرط؛  $\Delta E_0 > (2-3)eV$ ، مع الاحتفاظ بكل الشروط الأخرى.

### 1-5 مخطط عُصابات الطاقة للأجسام الصلبة المتبلورة من دون احتساب مستويات الإشابة

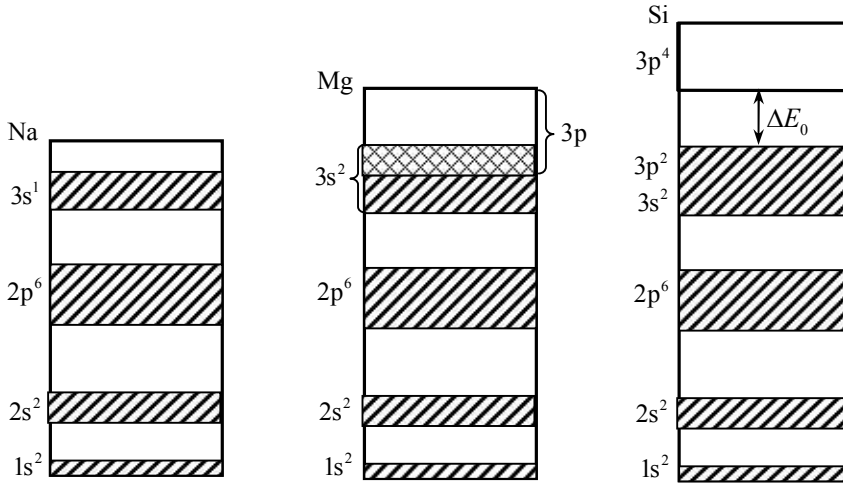
Band Scheme of Crystalline Solid States without Impurity Levels

يوضح الشكل (22-2) مخططاً كيفياً لعصابات الطاقة من أجل الصوديوم (Na)، والمغنيزيوم (Mg)، والسيلكون (Si): الاتجاهات الأفقية للعصابات الطاقية هنا، ممثلة بتدرجات اختيارية، ولا تُعدّ محوراً لحساب أي كمية فيزيائية؛ ولاحقاً سنمثّل (في بعض الأحيان) عصابات الطاقة في الأجسام الصلبة بوضع المسافات على المحور الأفقي في الحجم العادي الثلاثي البعد. وعندها يمكن للعصابات الطاقية أن تميل بوجود حقل كهربائي، وتتقوّس في أماكن اللاتجانسات الموضعية المختلفة وعلى تخومها، الخ؛ ولكن في الحالة الراهنة، الاتجاه الأفقي ليس مرتبطاً بأي إحدائية. وتوضع في الاتجاه الشاقولي نحو الأعلى طاقة الإلكترونات ونحو الأسفل طاقة الثقوب، أي أن طاقة الإلكترونات ترتفع عند الانتقال إلى سوية طاقية أعلى، وعلى العكس من ذلك، طاقة الثقوب تنخفض عند الانتقال إلى سوية طاقية أدنى في مخطط عصابات الطاقة.

i. تحوي ذرة الصوديوم 11 إلكترونات موزعة على الحالات وفق الآتي:

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

ومن ثمّ عند أي درجة حرارة، بما فيها  $T = 0$ ، تكون عصابة التكافؤ للصوديوم،  $3s$ ، الحاوية  $N$  حالة، مشغولة جزئياً فقط (في درجة الحرارة المنخفضة وعند غياب الحقول الكهربائية ينشغل النصف السفلي من العصابة فقط). المسافات بين الحالات المتجاورة،  $\Delta E$ ، في العصابة



الشكل (22-2): مخطط كفي لعصابات الطاقة من أجل بلورات البوتاسيوم والمنغنيز والسليكون

المسموحة صغيرة جداً، بحيث أن طاقة الإلكترون،  $\Delta E_E$ ، حتى في حقل كهربائي ضعيف، يمكن أن تفوق الفاصل  $\Delta E$  بعشرات المرات؛ أي بمقدور الإلكترونات الانتقال تحت تأثير الحقل الكهربائي إلى سويات فارغة، وهذا ما يوافق مشاركتها في الحركة المنتظمة، أي مساهمتها في تيار الناقلية، والمواد التي تمتاز بإمكانية كهذه هي الفلزات.

**ii. تحوي ذرة المغنيزيوم 12 إلكترونات موزعاً على الحالات وفق الآتي:**

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

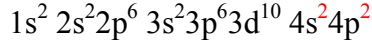
يبدو وكأن المغنيزيوم الصلب يجب أن يكون نصف ناقل (عازل)، لأن عصابة التكافؤ مشغولة تماماً، ولكن في الحالة الراهنة، **عصابات الطاقة متداخلة** ولا توجد فجوة طاقة بين عصابة التكافؤ وعصابة الناقلية، مما يعني أن المغنيزيوم فلز.

**iii. تحوي ذرة السليكون 14 إلكترونات موزعاً على الحالات وفق الآتي:**

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

والإلكترونات التكافؤ هنا، هي الإلكترونات  $3s^2 3p^2$ . يبدو للوهلة الأولى أن السليكون الصلب يجب أن يكون فلزاً، لأن العصابة الجزئية  $3p$  تحوي  $3N$  حالة والعصابة الجزئية  $3s$  تحوي  $N$  حالة. ويوجد بطبيعة الحال فقط  $4N$  إلكترون تكافؤ.

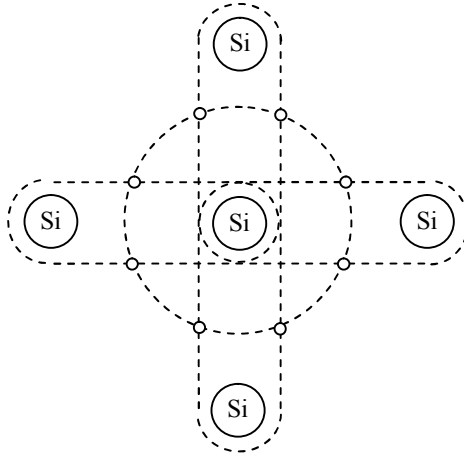
وذرة الجرمانيوم تحوي 32 إلكترونًا موزعاً على الحالات وفق الآتي:



ثم إن إلكترونات التكافؤ، هي الإلكترونات  $4s^2 4p^2$ . يبدو الجرمانيوم وكأنه فلز أيضاً، طالما يوجد هنا  $4N$  حالة فقط  $4N$  إلكترونًا؛ غير أن الجرمانيوم، كما السيلكون، نصف ناقل.

**في حقيقة الأمر، تتشكل عصابة التكافؤ هنا من العصابات الجزيئية s وعصابة جزيئية واحدة من العصابات الجزيئية p؛ ومن ثم، عدد الحالات في عصابة التكافؤ يساوي  $2N$ ، وإلكترونات التكافؤ في درجة الحرارة المنخفضة تشغلها بالكامل؛ وعصابة الناقلية تتألف من عاصبتين جزيئيتين أخريتين بـ  $2N$  حالة شاغرة (في درجة الحرارة المنخفضة)، إذن، لدينا عاصبتين إحداهما مشغولة تماماً بالإلكترونات والأخرى فارغة منها تماماً وثمة فاصل طاقة بينهما.**

**والشكل (23-2) يوضح السلوك التساهمي للروابط في Si.**

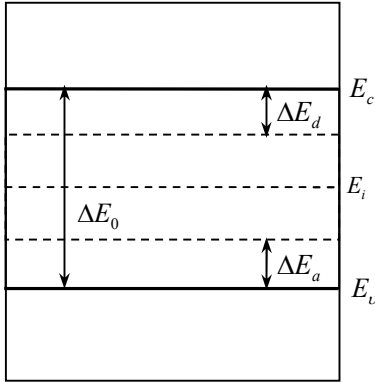


الشكل (23-2): إلكترونات التكافؤ في السليكون

## 2-5 مخطط عصابات الطاقة لأنصاف النواقل والعوازل المتبلورة مع احتساب مراكز الإشابة:

### Band Scheme of Crystalline Semiconductors and Dielectrics with Impurity Levels (Centers)

سنمئلاً مستقبلاً فقط عصابة التكافؤ وعصابة الناقلية لأنصاف النواقل والعوازل، كما يظهر في الشكل (24-2). يرمز الرمز  $E_c$  في الشكل (24-2) إلى قاع عصابة الناقلية والرمز  $E_v$  إلى سقف عصابة التكافؤ، والرمز  $E_i$  إلى منتصف المنطقة المحظورة .

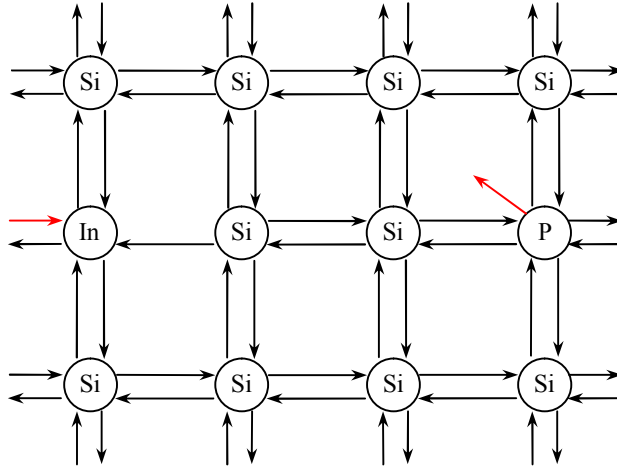


الشكل (24-2): مخطط عصابات الطاقة لأنصاف النواقل مع الأخذ بالحسبان مستويات الطاقة للشوائب

تكون كل الحالات في عصابة التكافؤ، في درجة حرارة منخفضة، مشغولة، في حين إن كل الحالات في عصابة الناقلية تكون شاغرة؛ ومن ثم لا يحوي الجسم الصلب حاملات حرة للشحنة الكهربائية. وعند رفع درجة الحرارة، بمقدور بعض الإلكترونات الانتقال من عصابة التكافؤ إلى عصابة الناقلية، أي الانتقال عبر المنطقة

المحظورة؛ سندرس إحصاء هذه الانتقالات لاحقاً، وهنا نُشير فقط إلى أنه، إلى جانب تنشيط *Activation* الإلكترون عبر المنطقة المحظورة المترافق بتشكيل ثقبٍ حرٍ *Free Hole* وإلكترون حرٍ *Free Electron* في عصابتي التكافؤ والناقلية على الترتيب، يمكن أن تجري عملية فيزيائية أخرى أسهل من سابقتها، تكمن في تأين *Ionization* سويات (مراكز) الإشابة؛ إذ تُلاحظ هذه العملية في مجال درجات الحرارة المنخفضة على وجه الخصوص.

- تتكوّن سويات الإشابة في المنطقة المحظورة بسبب استبدال ذرات نصف الناقل المدروس أي الأصلية بذرات شائبة (غريبة) أو نتيجة لزرع ذرات إشابة فيما بين العقد الذرية في



الشكل (25-2): المانحات والآخذات في السليكون

الشبيكة البلورية لنصف الناقل المدروس. فضلاً عن أنه، بمقدور سويات الإشابة أن تتشكل عن طريق العيوب النقطية والممتدة في البنية البلورية.

■ يوضح الشكل (25-2) ذرات الإشابة من النوع- **المانح** (ذرات الفوسفور P) وذرات الإشابة من النوع- **الآخذ** (ذرات الإنديوم In) في السليكون. تُشير الأسم- اصطلاحاً إلى الروابط التكافؤية: أربعة أسهم من كل ذرة من ذرات الـ Si توافق إلكترونات التكافؤ الأربعة العائدة إليها؛ والأسهم المتجهة نحو ذرة الـ Si المعنّية توافق إلكترونات التكافؤ للذرات المجاورة.

■ **لدى استبدال** ذرة Si بذرة فوسفور P، **تنشغل** (تكتمل) كل الروابط التكافؤية **ويبقى إلكترون فائض** واحد، على اعتبار أن الفوسفور خماسي- التكافؤ؛ وتبدو طاقة هذا الإلكترون أعلى من طاقة الإلكترونات التي أمّنت الروابط التكافؤية.

■ يُرمز إلى السوية الطاقية الموافقة للإلكترون "الفائض" في الفوسفور في المخطط الطاقى، المبيّن في الشكل (25-2)، بالرمز  $E_d$ . **ذرات الشائبة** (في الحالة الزاهنة فوسفور) **مندثرة** في البلورات على مسافات بعيدة عن بعضها البعض والإلكترونات "الفائضة" المشار إليها

أعلاه، إذا كانت بتراكيز ليست كبيرة، فإن الفوسفور لا يُشكّل عصابات طاقية، وإنما سوية طاقة واحدة مشتركة،  $E_d$ ، تتكرر من أجل واحدة حجم البلورة  $N_d$  مرة، حيث تركيز المانح (تعداده في وحدة حجم البلورة).

ويتكوّن من أجل مانح آخر غير الفوسفور (كالزرنخ، AS، مثلاً) سويات طاقة أخرى، ومن ثمّ تركيزها يساوي تركيز المانح. كل مانح يتميز بطاقة تأين خاصة به، توافق الفجوة الطاقية،  $\Delta N_d$ ، ما بين  $E_d$  وقاع عصابة الناقلية،  $E_c$ ؛ فكلما قلّت  $\Delta N_d$ ، كانت إمكانية تأين هذا المانح أو ذلك، أسهل (ومن ثمّ يجري في درجة حرارة أخفض). وبنتيجة التأين، تُشكّل المانحات إلكترونات الناقلية.

إن إلكترونات الناقلية المتوزعة في عصابة الناقلية على سويات مختلفة بجوار قاع هذه العصابة، تُحدّد المركبة الإلكترونية للناقلية الكهربائية لأنصاف النواقل (والعوازل) والظواهر الأخرى التي تجري فيها؛ وعادةً تُفرض الطاقة الحركية للإلكترون في قاع العصابة أي في السوية  $E_c$ ، مساويةً للصفر، مما يعني أن السوية  $E_c$  تُمثّل الطاقة الكامنة لإلكترونات الناقلية.

■ لدى استبدال ذرة Si بذرة إنديوم I، تكتمل من جهة I فقط ثلاث روابط تكافؤية، على اعتبار أن الإنديوم ثلاثي- التكافؤ.

→ يوافق الأخذ سوية طاقة ما، نرّمز لها بالرمز  $E_a$ ، حيث  $E_a > E_v$ : إن الحركة الحرارية أو مؤثر آخر يمكن أن يؤدي إلى انتقال أحد الإلكترونات من ذرة Si مجاورة وتُكمل رابطة الإنديوم مع السيلكون؛

→ وعندها يقع الإلكترون المشار إليه في سوية آخذ،  $E_a$ ، ويثبت فيها، في حين يتشكّل عند الذرة الموافقة للسيلكون "ثقب" موجب "Hole" Positive في الرابطة التكافؤية، مما يعني تشكّل فجوة Vacancy أو ثقب حرّ موجب في مجال سقف عصابة التكافؤ. يمكن للثقب المشار إليه الانتقال إلى سويات فجوية مشابهة أخرى في عصابة

التكافؤ تحت تأثير حقل كهربائي. وهذا يعني أنه بمقدور هذا الثقب المشاركة في نقل الشحنة الكهربائية، أي المساهمة في تيار الناقلية.

→ **يتكوّن** من أجل الآخذ الحالي (ذرات الإنديوم، مثلاً) عندما يكون تركيزه ليس كبيراً **سوية طاقة واحدة،  $E_a$ ، تتكرر من أجل واحدة حجم البلورة  $N_a$  مرة، حيث  $N_a$**  يرمز إلى تركيز الآخذ.

→ يُمثّل الفاصل الطاقوي،  $(E_a - E_v) = \Delta E_a$ ، طاقة تأين الآخذات. كل آخذ يتميّز بطاقة تأين خاصة به، توافق الفجوة الطاقية،  $\Delta E_a$ ، ما بين  $E_a$  وسقف عصابة التكافؤ،  $E_v$ ؛ سندرس عمليات تأين المانحات والآخذات لاحقاً.

### 3-5 النظرية الأولية لحالات الشوائب Elementary Theory of Impurity States:

إن دخول الشوائب إلى بلورات السيلكون، والجرمانيوم، الخ، يجعل شبكياتها البلورية مُعابئة (أي تحوي عيوباً مختلفة الأنواع)؛ وكما ذكرنا أعلاه، عندما يكون تركيز الشوائب، من المجموعتين III و V للجدول الدوري لمندلييف، صغيراً، تتكوّن في المنطقة المحظورة لهذه البلورات **مستويات طاقة** شائبة.

**سندرس النظرية الأولية** لحالات الشوائب باستخدام نموذج شبيه ذرة الهيدروجين (أو باختصار شبيه الهيدروجين) *Hydrogen Like Model*. إن التآثر (التأثير المتبادل) *Interaction* بين الإلكترون الضعيف الارتباط نسبياً بالمانح (P، و AS، الخ) والأيون الموجب الموافق للشائبة يحدث في الجسم الصلب الذي يتصف بالسماحية العازلية،  $\epsilon$ . يمكن في مثل هذه الحالة تعيين الطاقة الكامنة للإلكترون غير المشارك في تشكيل الروابط التكافؤية، من العلاقة الآتية:

$$U(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon\vec{r}} \quad (86-2)$$

ونحصل من حل معادلة شرودنغر من أجل نموذج شبيه الهيدروجين على العلاقة الآتية:

$$E_n = -\frac{m^* e^4}{8h^2 \pi \epsilon_0^2 \epsilon^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{me^4}{8h^2 \pi \epsilon_0^2 \epsilon^2} \cdot \frac{m^*}{m} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (87-2)$$

حيث  $n = 1, 2, 3, \dots$  و  $m^*$  الكتلة الفعالة للإلكترون، طالما أنه يقع في الحقل الدوري للشبيكة البلورية.

من الشائع أثناء الحساب، اعتبار  $m^*$  مقداراً سلمياً ومبدأ حساب الطاقة يوافق

$$E_\infty = E_c = 0. \quad (88-2)$$

تسمح مثل هذه الطريقة بإزالة تأثير الشبيكة البلورية (بدقة أكثر، إخفاء تأثيرها على قيمة  $m^*$ )، والأخذ بالحسبان تأثر الإلكترون مع الباقي الأيوني "العائد إليه"، وأيضاً احتساب طبيعة الوسط المدروس من خلال السماحية العازلية التي يتميّر بها،  $\epsilon$ .

**إذا اعتبرنا، أن الكمّية  $E_c$  لا تساوي الصفر،** فيمكننا أن نكتب بدلاً من العلاقة (87-2) العلاقة الآتية:

$$E_n = E_c - \frac{me^4}{8h^2\pi\epsilon_0^2\epsilon^2} \cdot \frac{m^*}{m} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (89-2)$$

ومن ثمّ تقع السوية  $E_n$  في المنطقة المحظورة، أي تنزاح إلى ما دون  $E_c$  بمقدار، يُعيّن بالقيمة المطلقة للطرف الأيمن للعلاقة (87-2)؛ فعندما  $n = 1$ ، أي من أجل الحالة الأساسية (الأرضية) لنموذج شبيه-الهيدروجين، يكون لدينا:

$$E_1 = E_c - \frac{me^4}{8h^2\pi\epsilon_0^2\epsilon^2} \cdot \frac{m^*}{m} = E_d, \quad (90-2)$$

إذن، يمكن أيضاً كتابة العلاقة الآتية:

$$\Delta E_d = E_c - E_d = \frac{me^4}{8h^2\pi\epsilon_0^2\epsilon^2} \cdot \frac{m^*}{m} = \frac{13.6}{\epsilon^2} \cdot \frac{m^*}{m} \text{ (eV)}. \quad (91-2)$$

ومن هنا، نستنتج أن كل الشوائب خماسية- التكافؤ تمتلك طاقة تأين واحدة في نصف الناقل من النوع Ge و Si، الخ: فمن أجل Ge مثلاً، بوضع  $m^* = 0.25 m$  و  $\epsilon = 16$ ، نجد  $\Delta E_d = 0.01 \text{ eV}$ ؛ ولكن في الواقع، تختلف  $\Delta E_d$  بعض الشيء من أجل شوائب مانحة خماسية- التكافؤ مختلفة، على الرغم من أن رتبة قيمها توافق القيمة المشار إليها،  $\Delta E_d$ .  
يمكن أيضاً حل مسألة مشابهة لما سبق من أجل شوائب آخذة ثلاثية- التكافؤ في الجرمانيوم، بحيث نحصل على العلاقتين الآتيتين:

$$E_d = E_v + \frac{me^4}{8h^2 \pi \epsilon_0^2 \epsilon^2} \cdot \frac{m^*}{m}; \quad (92-2)$$

$$\Delta E_a = E_a - E_v = \frac{13.6}{\epsilon^2} \cdot \frac{m^*}{m} \text{ (eV)}, \quad (93-2)$$

ومن ثم، بوضع  $m^* = 0.25 m$  و  $\epsilon = 16$ ، نجد  $\Delta E_a = 0.01 \text{ eV}$ .

تعد الدراسة النظرية للسويات الآخذات من أجل السيلكون صعبة، بحكم أن طاقة تأين الآخذات فيه تتطابق من حيث رتبة قيمتها مع قيمة طاقة الانشطار السبيني-المداري.

**الجدول (1):** طاقة تأين شوائب عناصر المجموعتين III و V من الجدول الدوري في الجرمانيوم والسيلكون

طاقة التآين (eV)		مانح أو آخذ	الشائبة
Si	Ge		
0.045	0.0104	A	B
0.057	0.0102	A	Al
0.065	0.0108	A	Ga
0.160	0.0112	A	In
0.044	0.0120	D	P
0.049	0.0127	D	As
0.039	0.0096	D	Sb

كما نرى في **الجدول (1)**، فإن القيم التجريبية لطاقة تأين شوائب عناصر المجموعتين III و V في الجرمانيوم، في الواقع، قريبة من القيمة المشار إليها في متن النص،  $0.01 \text{ eV}$ ؛ ومن أجل السيلكون، **يلاحظ تباين كبير** إلى حد ما بين قيم طاقة تأين الشوائب،  $\Delta E_a$  و  $\Delta N_d$ ، التجريبية والمحسوبة،  $0.01 \text{ eV}$ ، ثم إنها أكبر منها في الجرمانيوم. بما أن النظرية تتفق جيداً مع التجربة، فيمكن القول، على الأقل من أجل الجرمانيوم، أنها تصف حالات الشوائب بشكل مقبول.

يمكن أن تتوافر، إلى جانب حالات الشوائب الأساسية (الأرضية) في المنطقة المحظورة، حالات شوائب مهيجة؛ ثم إن حالات التهيج الموافقة لقيمة العدد الكوانتي الرئيس،  $n = 1, 2, 3, \dots$ ، ستتوزع فوق حالة المانح الأساسية، وهذا واضح من العلاقتين (8-2) و (8-4) أيضاً.

يعرض **الجدول (2)** القيم المحسوبة من أجل الحالة الأساسية والحالات المهيجة للمناح في السيلكون. لقد تم رصد الحالات المهيجة في السيلكون تجريبياً، وذلك عند دراسة امتصاص الأشعة تحت الحمراء *Infrared Rays* طويلة الطول الموجي في درجة حرارة الهليوم السائل؛ حيث يتفق جيداً موضع هذه السويات المهيجة مع القيم المحسوبة نظرياً.

**الجدول (2):** القيم المحسوبة للسويات المانحة في السيلكون عند اختيار مبدأ الحساب  $E_c = 0$

$E_n \times 10^{-2} \text{ eV}$			الحالة
Sb	As	P	
- 3.9	- 4.9	- 4.4	أساسية
- 3.1	- 3.3	- 3.2	متهيجة
-1.13	-1.13	-1.13	
-0.94	-1.11	-1.06	
-0.90	-0.95	-0.93	
- 0.59	- 0.59	- 0.59	
-0.57	-0.57	-0.57	

إنّ طاقة الحالات المانحة الأساسية في الجرمانيوم أقل منها بكثير في السيلكون (راجع **الجدول (1)**). وتقع الحالات المهيجة تحت قاع عصابة الناقلية على مسافات من رتبة  $10^{-4} \text{ eV}$ . لرصد مثل هذه السويات تجريبياً لا بد من استخدام بصريات المجال المليميترى، مما يُعدُّ صعباً إلى حدٍ ما؛ أضف إلى ذلك، بسبب صغر قيم  $\Delta E_d$ ، فمن الممكن عدم احتسابها، لكونها لا تُبدي تأثيراً حقيقياً.

الكتلة الفعّالة في المركّبات  $A^{III}B^V$ ، بما فيها GaAs و InSb، متماثلة المناحي، ولذلك يمكن في هذه الحالة تطبيق نموذج شبيه الهيدروجين الموصوف في هذه الفقرة.

وأخيراً، تجدر الإشارة إلى أن سويات الشوائب المانحة والآخذة، التي تكوّن ذرات عناصر المجموعتين III و V في أنصاف النواقل التساهمية من نوع الجرمانيوم وما شابه، تُعدُّ "ضحلة" ("خفيفة") "Shallow" أي توافقها طاقة تأين ليست كبيرة نسبياً.

**الجدول (3):** سوياات الطاقة للشوائب في الجرمانيوم والسيلكون

طاقة التآين (eV)		مانح أو آخذ	الشائبة
Si	Ge		
$E_v + 0.045$	$E_v + 0.0104$	A	B
$E_v + 0.057$	$E_v + 0.0102$	A	Al
$E_v + 0.065$	$E_v + 0.0108$	A	Ga
$E_v + 0.160$	$E_v + 0.0112$	A	In
$E_c - 0.044$	$E_c - 0.0120$	D	P
$E_c - 0.049$	$E_c - 0.0127$	D	As
$E_c - 0.039$	$E_c - 0.0096$	D	Sb
$E_c - 0.033$	$E_c - 0.0093$	D	Li
$E_v + 0.049$	$E_v + 0.04$	A	Cu
	$E_v + 0.033$	A <sup>(1)</sup>	
$E_v + 0.24$		D	
	$E_v + 0.13$	A	Ag
	$E_c - 0.29$	A <sup>(1)</sup>	
	$E_c - 0.04$	A <sup>(2)</sup>	
$E_v + 0.35$	$E_v + 0.05$	D	Au
$E_v + 0.54$	$E_v + 0.16$	A	
	$E_c - 0.29$	A <sup>(1)</sup>	
	$E_c - 0.04$	A <sup>(2)</sup>	
	$E_v + 0.03$	D	Zn
	$E_v + 0.09$	D <sup>(1)</sup>	
$E_v + 0.31$		A	
$E_v + 0.55$		A <sup>(1)</sup>	
	$E_v + 0.05$	D	Cd
	$E_v + 0.16$	D <sup>(1)</sup>	
$E_c - 0.18$	$E_c - 0.18$	D	S
	$E_c - 0.14$	D	Se

	$E_c - 0.10$	D	Te
	$E_c - 0.16$	A	Mn
	$E_c - 0.37$	$A^{(1)}$	
$E_c - 0.57$		D	
	$E_v + 0.22$	A	Ni
	$E_c - 0.30$	$A^{(1)}$	

ذرات عناصر المجموعات I و II، و VI، و VIII التي تدخل في أنصاف النواقل من

نوع الجرمانيوم وما شابه، تُشكّل سويات شوائب "عميقة" *Deep Impurity Levels*.

يمكن إدخال شوائب إلى الشبكة البلورية على شاكلة ذرة مانحة (D) Donor أو ذرة آخذة (A) Acceptor؛ فضلاً عن أنها يمكن أن تكون أيونات مشحونة أحادية ( $A^{(1)}$  أو  $D^{(1)}$ ) وأيونات مشحونة مرتين ( $A^{(2)}$  أو  $D^{(2)}$ ). ثمة حالات أيضاً، تكمن في أن الإشابة نفسها يمكن أن تُشكّل سويات مانحة وسويات آخذة (مراكز مانحة- آخذة). يعرض **الجدول (3)** سويات شوائب في السيلكون والجرمانيوم تكوّنت بمناحات وأخذات مختلفة.



مكتبة AZ to Z