عنوان المحاضرة:

نظرية الأنطقة للمواد الصلبة

Band theory of solids

Dr. Ghassan Adnan

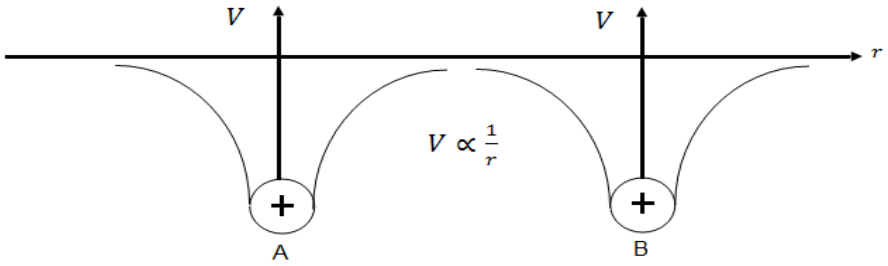
PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

نظرية الأنطقة للمواد الصلبة

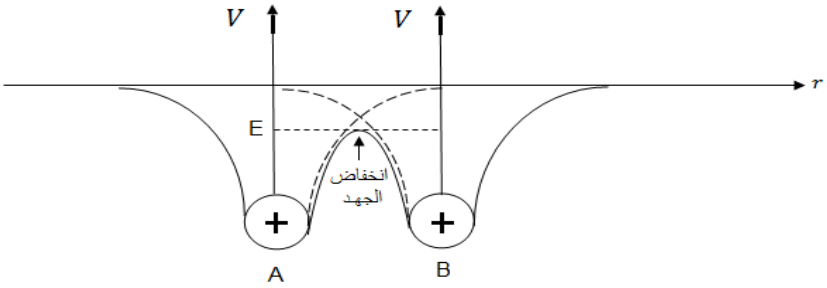
تناولنا في الفصل السابق حركة الالكترونات في المواد الصلبة باستخدام نموذج الإلكترون الحر المكمى ،وهو نموذج مبسط جدا لإهماله جهد البلورة Crystal Potential أي إهمال التفاعل بين الكترونات التوصيل والشبيكة الدورية للبلورة ، إن مبدأ تأثير جهد البلورة الدوري على الالكترونات أي تفاعل الموجات المرافقة لالكترونات التوصيل مع لباب أيونات البلورة ، يعني إن الالكترونات في البلورات ترتب أنفسها ضمن أنطقه أو حزم تسمى أنطقة الطاقة Energy Bands ،إن هذه الأنطقة تكون مفصولة بعضها عن بعض بمناطق طاقة محرمة Forbidden تمنع الالكترونات من احتلالها أو الوجود فيها وتسمى فسح الطاقة أو فجواتها Energy Gaps .

مستويات الطاقة وحزم الطاقة

من المعروف ان الالكترونات في حركتها في الذرة تستقر في أغلفة حول النواة في مجموعات أو مستويات ذات طاقة محددة ، تقل ارتباطها في النواة كلما بعدت مستويات وجودها عن مركز النواة وبذلك يسهل انطلاقها بحرية بمجال نفوذها. وفي حالة ذرة منفردة،فان الالكترون يتحرك حول النواة ويكون تحت تأثير جاذبية النواة فإذا كان لهذا الالكترون ان يتحرر من جذب النواة فعليه أن يعبر حاجز الجهد ،وهذا الجهد يتناسب عكسيا مع المسافة من النواة $\left(V \propto \frac{1}{r}\right)$ وهكذا يبدو منحني الجهد وكما هو واضح في الشكل (1a) .



(1a)

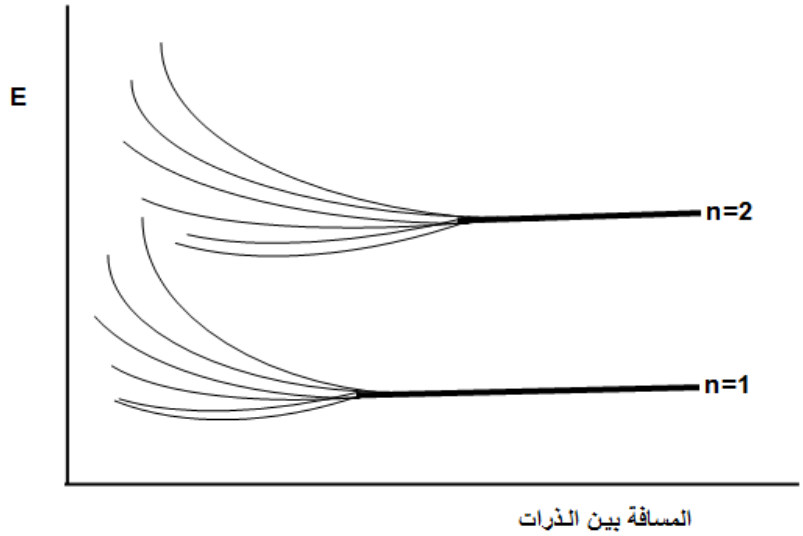


(2a)

والآن اذا الذرتان A و B وجعلناهما تقتربان الواحدة من الاخرى فأنه كلما ازداد التقارب بينهما أصبحت قوة التجاذب بين النواة الواحدة والالكترونات الاخرى أشد وينجم عن ذلك انخفاض حاجز الجهد في المجال بين الذرتين وكما يبدو ذلك في الشكل (1b)، في حين يبقى حاجز الجهد عاليا في الطرف الآخر من الذرتين. ان زيادة التقارب بين الذرتين يؤدي الى تداخل أغلفتهما وبهذا ينخفض حاجز الجهد بينهما الى الحد الذي يصبح فيه مستوي الطاقة E المبين في الشكل (1)موحدا لكل من الذرتين. فإذا كان لكل مستوى الكترون واحد فان تداخل المستويين ينجم عن مستوى الموحد للذرتين سيضم الكترونين وعندئذ يتعذر التمييز بين الكترون الذرة A و الذرة B،ان احتواء المستوي لإلكترون واحد لا يتعارض مع قاعدة الاستبعاد لباولي شرط ان يكون الالكترونين دوران برمي متعاكس$\left(S = \pm\frac{1}{2}\right)$.ولكن الصورة تختلف اذا كان مستوى الذرة المنفردة في الاصل يحتوي على الكترونين فعند تداخل الاغلفة للذرتين يصبح لدينا اربعة الكترونات في المستوي نفسه

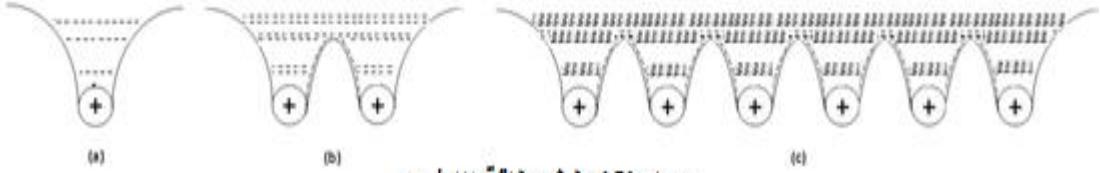
PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

وعند تداخل الاغلفة لثلاثة ذرات يصبح لدينا ستة الكترونات في المستوي نفسه وعند تداخل الاغلفة لأربعة ذرات يصبح لدينا ثمانية الكترونات في المستوي نفسه وهذا يتناقض مع قاعدة الاستبعاد لباولي ولهذا يتحتم عندئذ انشطار المستوى n=1 الى مستويين متقاربين في الحالة الأولى و الى ثلاثة مستويات في الحالة الثانية والى أربعة مستويات متقاربة في الحالة الثالثة وهكذا بحيث ان كل مستوى فيه الكترونان وفي كل حالة. ويمكن تعميم هذا المبدأ عند تداخل N من الذرات في مادة فأن كل مستوى ينشطر الى N من المستويات ولكل مستوي الكترونان ،ان المستوى يتحول الى حزمة او نطاق من المستويات Level Band ولها طاقة حزمة Energy Band تقاس بالإلكترون فولت شكل (2).



شكل(2):انشطار المستويات عند تقارب الذرات.

فمن أجل توضيح ذلك لنأخذ فلز الليثيوم Li^3 مثالا حيث تحتوي ذرة الليثيوم على ثلاثة الكترونات موزعة على الاغلفة الثانوية $1S^2\ 2S^1$ وعند حل معادلة شرودنكر نحصل على مستويات طاقة منفصلة لذرة الليثيوم ويرمز لها 1S 2S 2P وكما هو مبين في الشكل (3a)،واذا أخذنا ذرتين من الليثيوم وجعلناهما يقتربان الواحدة من الاخرى لتكوين جزيئة الليثيوم Li_2 فاذا كان لكل غلاف موحد للذرتين يضم الكترونين لهما دوران برمي متعاكس $\left(S = \pm\frac{1}{2}\right)$ ،وعليه ينشطر الغلاف الموحد الى مستويين فرعيين للطاقة وكما هو مبين في الشكل (3b). يعتمد مقدار الانشطار في كل مستوى طاقة (غلاف موحد) اساسا على المسافة بين نواتي الذرتين المكونتين للجزيئة وعلى الغلاف الذري. فمثلا يكون الانشطار في الغلاف الثانوي 1S اوطأ من ذلك الانشطار للغلاف الثانوي 2S .ان تفسير ذلك ان نصف قطر الغلاف الثانوي1S يكون صغيرا جدا ، أي يكون الالكترون في هذا الغلاف مقيدا بقوة الى نواة ذرته ولا يتأثر كثيرا بالمجال الناشئ عن اقتراب ذرة من ذرة اخرى ويكون العكس صحيحا .



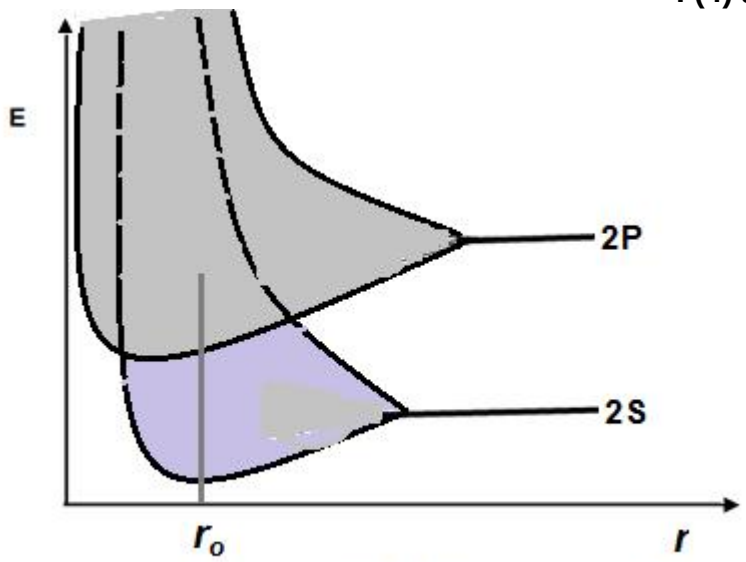
شكل (3):طيف طاقة الليثيوم.

ويمكن تعميم الاعتبارات المذكورة اعلاه لجزيئة Li المتعددة الذرات.فلجزيئة الليثيوم ذات الذرات الثلاثة ينشطر كل غلاف الى ثلاثة مستويات بينما ينشطر كل غلاف في جزيئة ذات أربع ذرات الى مجموعة رباعية.وهكذا يمكن اعتبار الليثيوم الصلب حالة نهائية عندها يصبح عدد الذرات كبيرا جدا وينتج عنها بلورة صلبة.وبموجب ما تقدم تنشطر الاغلفة الموحدة الى N من المستويات الثانوية المتقاربة بعضها مع بعض حيث N تمثل عدد الذرات التي تضمها المادة الصلبة.ولما كان عدد الذرات N في المادة الصلبة كبيرا جدا (حوالي 10^{23} ذرة لكل مول) كانت المستويات الثانوية متقاربة جدا بعضها من بعض حيث يمكنها ان تتداخل

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

بعضها ببعض لتشكل ما يسمى حزمة طاقة Energy Band ،وعلى هذا الاساس تكون كل من الاغلفة الثانوية 1S 2S 2P حزم طاقة 1S 2S 2P على التعاقب كما في الشكل (3c).

ان الفلزات في طبيعة بنيتها البلورية يحتم تقارب ذراتها من بعضها البعض بحيث لا يمكن اعتبار ذراتها معزولة عن بعضها البعض لتكون كل ذرة تؤثر بمجالها على جارتها وهذا التأثير في الحقيقة يكون متبادل فيما بينها.فبدلا من أن تحتل مستويات الطاقة المختلفة في الذرة حدودا ضيقة في حالة الذرة المعزولة نجد أن هذه الحدود أو المستويات تتوسع في حدودها كلما اقتربت ذرتان من بعضها البعض فتأخذ شكل حزم من مستويات عديدة الطاقة ، وهذه الحزم تشتد في توسعها بصفة خاصة في مستويات الاغلفة الخارجية وكما هو مبين في الشكل (4) .



الشكل(4) :اتساع المستويات 2S و2P لتكوين حزمة طاقة في البلورات.

هذا التوسع يتوقف على المسافة الذرية(r) ،فإذا كانت هذه المسافات صغيرة اشتد التوسع في كل مستوى حتى تتداخل الحزم الناتجة عنها ،بينما لو كانت المسافات كبيرة بقي التوسع في حدود ضيقة فلا يحدث التداخل بل تبقى فجوات Gaps بينها.في بعض الفلزات يكون رص الذرات فيها بدرجة كبيرة تجعل من الحزم المتكونة تقترب من بعضها البعض فتتضاءل الفجوات وقد يحدث تداخل بين الحزم ،وفي هذه الحالة لا يبذل الغاز الالكتروني اي مجهود لإيجاد مسارات له اذ ان الحزمة الثانية متصلة وتندرج مستويات طاقتها مع مستويات الحزمة الاولى وبالتالي يتصف الفلز بأنه جيد التوصيل الكهربائي.

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com