عنوان المحاضرة:

نظرية الإلكترون شبه الحر

Nearly Free –Electron Theory

Dr. Ghassan Adnan

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

نظرية الإلكترون شبه الحر

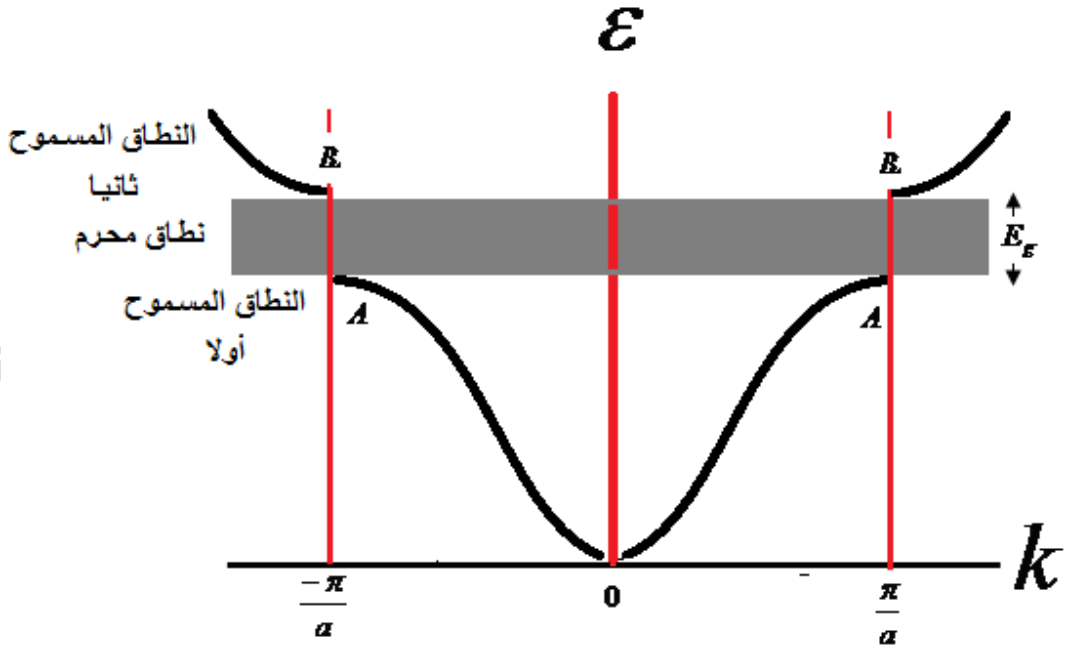
يوصف تركيب أنطقه الطاقة في بلورة غالبا باستخدام نموذج الإلكترون شبه الحر Nearly Free (–Electron Model). إن هذا النموذج يجيب على معظم الأسئلة حول سلوك الالكترونات في المعادن على الرغم من أن هنالك حالات يكون فيها نموذج الإلكترون شبه الحر غير قابل للتطبيق.

يفترض نموذج الإلكترون شبه الحر لحالات إلكترون في صلب حدوث قليل من التشويش Perturbation في طيف الحالات الالكترونية لإلكترون حر تماما. يعزى هذا التشويش الضعيف إلى الجهد الدوري للباب الأيونات الموجبة والتراكب القوي (جدير بالاعتبار)بين الذرات المتجاورة الذي يفرض بالقوة كنتيجة لصغر الفسح التي تفصل بين الذرات .والتفسير الأولي لهذه الفرضيات بالنسبة إلى غاز الكتروني في معدن ،على اعتبار أن اللباب الذرية هي مناطق ذات طاقة كامنة سالبة مقارنة بالطاقة الكامنة الالكترونية للمناطق التي تفصل تلك اللباب.ووفقا إلى قانون حفظ الطاقة الكلية يجب أن يتحرك إلكترون ما بسرعة اكبر مما هي عليه (يمتلك طاقة حركية كبيرة)عندما يمر من خلال منطقة اللب الذري .

إن الطاقة الكلية لإلكترون بموجب نموذج الإلكترون شبه الحر ليست حركية تماما.كما هو الحال لإلكترون حر تماما .بسبب الطاقة الكامنة لايونات الشبيكة،إن النتيجة المهمة هي أن الطاقة الحركية لإلكترون شبه حر تعاني من انقطاع أي حدوث فجوة عند قيم محددة لمتجه الموجة $\left(\vec{k}\right)$ لشبيكة خطية ثابتها (a) كالآتي:

$$k = \pm \frac{jp}{a}, \; j = 1,2,3..... \quad ..... (2)$$

بينما لا يعاني منحني الطاقة الحركية لإلكترون حر تماما مثل هذه الانقطاعات كما في الشكل (1) ولاحظ الشكل (2)



الذي يوضح تغير الطاقة الحركية (e) بوصفها دالة لمتجه الموجة $\left(\vec{k}\right)$ لإلكترون شبه حر في شبيكة خطية أحادية الذرات ثابت فسحها البينية (a) ويظهر تأثير الشبيكة على حركة الإلكترون وذلك بتوليد

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

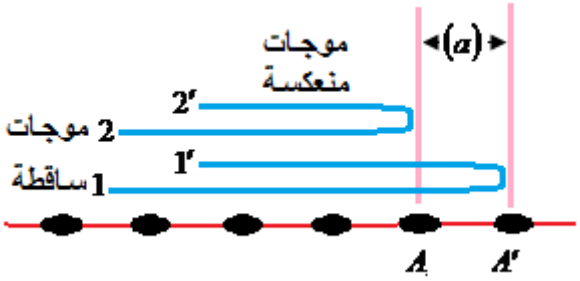
فسحة طاقة (E_g) حيث يقتصر ذلك فقط عندما تقترب $\left(\vec{k}\right)$ من $\left(\pm\frac{p}{a}\right)$ أو مضاعفاتها الصحيحة $\left(\pm j\frac{p}{a}\right)$ حيث يكون تشويش الشبيكة على الإلكترون عند نهايته العظمى ومن ناحية أخرى تتحرك الالكترونات بحرية تامة خلال الشبيكة عند قيم اصغر من $\left(+j\frac{p}{a}\right)$ واكبر من $\left(-j\frac{p}{a}\right)$ لانعدام التشويش أو مقاومة الشبيكة.

انعكاس براك ومنشأ فسحة الطاقة

يمكن اعتبار حركة الالكترونات شبه الحرة في شبيكة خطية ثابتها (a) وعند حافات فسح الطاقة $\left(k = \pm\frac{jp}{a}\right)$ مشابها لاستطارة الموجة الكهرومغناطيسية بوساطة الذرات في الشبيكة ،حيث تنشأ تقوية الموجات المستطيرة عندما يتحقق شرط براك للحيد القوي :

$$n\,l = 2a\,Sin \quad \text{.....} \quad (3)$$

حيث (a) تمثل البعد البيني بين السطوح و (q) تمثل الزاوية التي يصنعها اتجاه انتشار الموجة مع سطوح الشبيكة و (n) يمثل أي عدد صحيح .وعند انتشار الموجة مع سطوح الشبيكة بعد سقوطها عموديا أي $(q = 90^{\circ})$ لذلك يصبح شرط براك $(nl = 2a)$ ،فمثلا عند انعكاس الموجات $(2,1)$ عند ذرات (أيونات) متعاقبة مثل A', A كما في الشكل (3) .



فأن فرق المسار بين الموجات المنعكسة يساوي $(2a)$ وفرق الطور بينهما يساوي $\left(2p\frac{2a}{l}\right)$.إن أعظم تداخل تقوية بين الموجات المنعكسة $(2',1')$ تحدث فقط عندما يكون فرق الطور بينهما مساويا $(\pm 2np)$ أو $(\pm 2jp)$ أي عندما :

$$\pm\,2\,jp = 2p\,\frac{2a}{l}$$
$$\pm\,jl = 2a \quad \text{.....} \quad (4)$$

Dr. Ghassan Adnan
PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

أي يتحقق قانون براك ،ولما كانت $\left(l = \frac{2p}{k}\right)$ كان $\left(k = \pm j\frac{p}{a}\right)$ وهذا يتفق مع المعادلة (2)

.نستنتج مما تقدم انه عند قيم $\left(k = \pm j\frac{p}{a}\right)$ تعاق حركة الالكترونات باتجاه معين حيث تجبر على الحركة بالاتجاه المعاكس نتيجة تعرضها لانعكاس براك ويتكرر عكس اتجاه الانتشار كلما تكرر انعكاس براك .ان ذلك يعني ان الدالات الالكترونية عند حافة أية فسحة للطاقة تكون موجات واقفة وليست منتقلة لأنها تحقق شرط براك للحيد القوي الذي يمكن التعبير عنه بدلالة متجه الموجة $\left(\vec{k}\right)$ ومتجه الشبيكة المقلوبة $\left(\vec{G}\right)$ كالآتي:

$$2\,\vec{k}\cdot\vec{G} + G^2 = 0 \quad \text{.....} \quad (5)$$

فضلا عن الصيغة المكتوبة في المعادلة (3)والمكافئة لها ،ولما كان متجه الشبيكة المقلوبة $\left(\vec{G}\right)$ لشبيكة خطية (ذات بعد واحد) ثابتها (a) يساوي $\left(j\frac{2p}{a}\right)$ كان :

$$\vec{k} = \pm\frac{1}{2}G = \pm j\frac{p}{a} \quad \text{.....} \quad ,(6)$$

للتمثيل على ذلك إن أول انعكاس (وظهور أول فسحة طاقة)يحدث عند $\left(k = \pm\frac{p}{a}\right)$ وينشأ بسبب أن الموجة المنعكسة عن ذرة ما في شبيكة خطية تعاني من تداخل تقوية بفرق طور $(2p)$ مع الموجة المنعكسة من ذرة أخرى مجاورة لها أولا .أن الحل بالنسبة للقيمة $\left(k = \pm\frac{p}{a}\right)$ يتضمن مركبتين متساويتين من الأمواج المنتقلة نحو اليسار $\left(k = -\frac{p}{a}\right)$ ونحو اليمين $\left(k = +\frac{p}{a}\right)$ وان جمعهما لا يؤدي إلى دالات موجية منتقلة كما هو الحال بموجب الإلكترون الحر بل يؤدي إلى دالات لموجات واقفة .ان مدى قيم $\left(\vec{k}\right)$ بين $\left(+\frac{p}{a}\right)$ و $\left(-\frac{p}{a}\right)$ يشكل منطقة برليون الأولى لهذه الشبيكة أما المنطقة المحددة لقيم $\left(\vec{k}\right)$ بين $\left(\frac{-2p}{a}\right)$ و $\left(-\frac{p}{a}\right)$ وكذلك بين $\left(+\frac{p}{a}\right)$ و $\left(+2\frac{p}{a}\right)$ فتشكل منطقة برليون الثانية وهكذا .....بقية المناطق.

دالات بلوخ

يحدد سلوك إلكترون التوصيل في صلب متبلور بدراسة معادلة شرودنكر وإيجاد حلولها المناسبة .وتتطلب كتابة معادلة شرودنكر لإلكترون توصيل تحديد الجهد الكلي المؤثر في ذلك الإلكترون والتغير المكاني لذلك الجهد.ويدعى الجهد الكلي عادة جهد البلورة $V(\vec{r})$.قام فيلكس بلوخ بدراسة جهد البلورة وأستنتج أن $V(\vec{r})$ يتضمن جزأين أساسيين هما:

Dr. Ghassan Adnan
PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

أولا: جهد كهروستاتيكي $V(\vec{r})_i$ ينشأ عن تفاعل إلكترون توصيل مع جميع لباب الايونات التي تؤلف شبيكة البلورة.إن هذا الجزء من جهد البلورة $V(\vec{r})$ يجب أن يمتلك الدورية الانتقالية للشبيكة المثالية نفسها (أي عند إهمال اهتزاز لباب الأيونات).

ثانيا : جهد $V(\vec{r})_e$ ينشأ من تفاعل إلكترون التوصيل وبقية الكترونات التوصيل (الكترونات بلوخ)المتحركة خلال شبيكة البلورة.لقد افترض بلوخ إن إسهام هذا الجزء في جهد البلورة $V(\vec{r})$ يجب أن يكون جهد دوريا (مثل إسهام الجزء الأول) لكي تتحقق متطلبات التعادل الكهربائي في البلورة .وعلى هذا الأساس يعطى جهد البلورة كالآتي:

$$V(\vec{r}) = V_i(\vec{r}) + V_e(\vec{r}) \quad \text{.....} \quad (7)$$

وبموجب فرضيات بلوخ ،وبعد استخدام الطاقة الكامنة الكلية الدورية لإلكترون التوصيل $\left[U(\vec{r}) = -eV(\vec{r})\right]$ تكتب معادلة شرودنكر في فضاء ثلاثي الأبعاد ولإلكترون واحد كالآتي:

$$\left[\left(-\frac{\mathbf{h}^2}{2m}\right)V^2 + U\left(\vec{r}\right)\right]y = ey \quad \text{.....} \quad (8)$$

ولها دورية الشبيكة ذاتها .لقد استنتج بلوخ أن الحلول الممكنة لمعادلة شرودنكر (الدالات الموجية التي تحقق معادلة شرودنكر والخاضعة لجهد دوري)يجب أن تكون بالصيغة الخاصة الآتية:

$$y_k(\vec{r}) = U_k(\vec{r})\exp\left(i\vec{k}.\vec{r}\right) \quad \text{.....} \quad (7)$$

أي أن الحلول تكون موجات مستوية ومعدلة بوساطة $U_k(\vec{r})$ وهي دالة تعتمد على قيمة متجه الموجة $\left(\vec{k}\right)$(الذي ينسب عادة إلى زخم الإلكترون) فضلا عن امتلاكها دورية الشبيكة وهذا يعني أن :

$$U_k\left(\vec{r}\right) = U_k\left(\vec{r} + \vec{T}\right) \quad \text{.....} \quad (8)$$

حيث $\left(\vec{T}\right)$ تمثل المتجه الانتقالي أو ألزخمي للشبيكة ،ومن ناحية أخرى لما كأن إلكترون التوصيل يسلك سلوك موجة فأنه ذات متجه موجة $\left(\vec{k}\right)$ رافقه طول موجة ديبرولي أي $\left(l = \frac{2p}{k}\right)$ وزخم ديبرولي $\left(\vec{P} = \mathbf{h}\vec{k}\right)$ حيث يدعى الزخم $\left(\vec{P}\right)$ الزخم البلوري الالكتروني.

Dr. Ghassan Adnan
PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com