فصل ۷ کیتل و ۵ علی عمر

نوارهای انرژی در جامدات

از کتاب علی عمر

عناوین

۱- مقدمه
۲- طیف انرژی در اتم، مولکول و جامد
۳- نوارهای انرژی در جامدات – قضیه بلوخ
۴- تقارن نواری در فضای k ، مناطق بریلوئن
۵- تعداد حالت ها در نوار
۶- مدل الکترون تقریباً آزاد
۷- گاف انرژی و بازتاب براگ
۸- مدل بستگی قوی
۹- محاسبه نوارهای انرژی
۱۰- فلزات، عایق ها و نیمه رساناها
۱۱- چگالی حالت ها
۱۲- سطح فرمی
۱۳- سرعت الکترون بلوخ
۱۴- دینامیک الکترون در یک میدان الکتریکی
۱۵- جرم موثر دینامیکی
۱۶- اندازه حرکت، اندازه حرکت بلور، مبدا فیزیکی جرم موثر
۱۷- حفره
۱۸- رسانایی الکتریکی
۱۹- دینامیک الکترون در یک میدان مغناطیسی، تشدید سیکلوترونی و اثر هال
۲۰- روشهای تجربی در تعیین ساختار نوار
۲۱- محدودیت های نظریه نوار، گذار فلز - عایق

مقدمه

در فصل چهار با استفاده از مدل الکترون آزاد راجع به حرکت الکترون ها در جامدات صحبت کردیم. این مدل بیش از حد ساده شده است، چرا که پتانسیل بلور را نادیده انگاشتیم. اگر بخواهیم نتایج تجربی را به طور کمّی توجیه کنیم، نمی توان از این پتانسیل کاملاً صرف نظر کرد. علاوه برآن، هم چنان که در پایان فصل چهار اشاره شد بدون منظور کردن این پتانسیل بعضی از پدیده‌ها را کلاً نمی‌توان توجیه کرد. بنابراین در این فصل تأثیر پتانسیل بلور بر خواص الکترونی جامدات را بررسی می کنیم.

در اولین بخش این فصل طیف انرژی یک الکترون درون یک بلور را بررسی خواهیم کرد و خواهیم دید که این طیف از نوارهای پیوسته تشکیل یافته است و این بر خلاف حالت مربوط به اتم ها است که طیف آن ها مجموعه ای از ترازهای گسسته است. راجع به خواص و توابع موج این نوارها به تفصیل بحث خواهیم کرد و ملاکی برای تمایز بین فلزات و نارساناها در مدل نواری به دست خواهیم آورد. سپس به چگالی حالت ها و سطح فرمی می پردازیم که به عنوان شاخص‌های مفیدی در جامدات عمل می کنند.

مقدمه

الکترون ها درون یک بلور پیوسته در حالت حرکت اند. فرمول هایی برای محاسبه ی سرعت الکترون و جرم مؤثر آن به دست خواهیم آورد. تأثیر اعمال یک میدان الکتریکی روی حرکت الکترون را مطالعه خواهیم کرد و عبارتی برای رسانایی الکتریکی الکترون به دست خواهیم آورد. گرچه این عبارت به همان عبارتی که قبلاً در فصل ۴ و تحت شرایط تقریبی به دست آوردیم، تحویل می شود ولی روشی که در این جا بررسی می کنیم عمومی تر است و در آن عامل های فیزیکی واضح تری بر رسانایی الکتریکی اثر می گذارند.

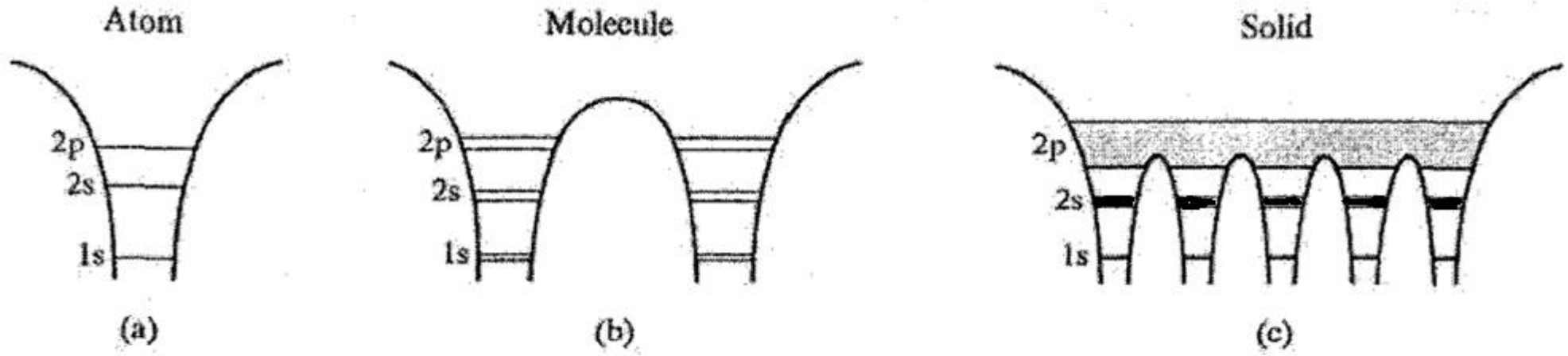
فرکانس سیکلوترونی و اثر هال نیز مجدداً مورد توجه قرار می‌گیرند و نشان می‌دهیم چگونه می‌توان از این پدیده ها برای به دست آوردن اطلاعاتی در مورد یک جسم جامد استفاده کرد.

بخش آخر راجع به محدودیت های مدل نوار انرژی و گذار فلز ـ رسانا بحث می کند.

طیف انرژی در اتم ها، مولکول و جامدات

هدف اولیه‌ی این بخش توصیف کیفی طیف انرژی الکترونی است که درون یک جامد بلوری حرکت می‌کند. بهتر است بحث را با بررسی طیف یک اتم آزاد آغاز کنیم و ببینیم هنگامی که اتم ها به دور هم گرد می آیند تا یک جسم جامد را تشکیل دهند چگونه این طیف تدریجاً تغییر می‌کند.

به عنوان مثال لیتیوم را در نظر می گیریم. ابتدا یک اتم آزاد لیتیوم را بررسی می کنیم؛ همان طور که در شکل (۱–۵ الف) نشان داده شده است، الکترون در یک چاه پتانسیل حرکت می کند. وقتی معادله ی شرودینگر را حل کنیم، همان گونه که نشان داده شده است، مجموعه ای از ترازهای انرژی گسسته به دست می آید. هم چون حالت مربوط به اتم هیدروژن این ترازها را به $1s$,$2s$,$2p$ و غیره نمایش می دهیم. اتم لیتیوم شامل سه الکترون است، دو تای آن ها لایه‌ی $1s$ (کاملاً پر) را اشغال می کنند و الکترون سوم در زیر لایه ی $2s$ جای می گیرد.



شکل ۱-۵ تغییرات تدریجی طیف انرژی Li از یک اتم (الف) ، به یک مولکول (ب) و به یک جسم جامد (ج)

موقعیتی را در نظر می‌گیریم که دو اتم لیتیوم گردهم می آیند تا مولکول لیتیوم Li_2 را تشکیل دهند. هم چنان که در شکل (۱-۵ب) نشان داده شده است، پتانسیلی که توسط الکترون دیده می‌شود دو برابر می شود. حالا طیف انرژی شامل مجموعه ای از طیف های دوگانه ی گسسته است. هرکدام از ترازهای اتمی که عبارتند از ۲p,۲s,۱s و غیره به دو تراز نزدیک و جدای از هم شکافته می شوند. به دلیل رابطه ی نزدیک بین ترازهای اتمی و مولکولی، ترازهای انرژی مولکولی را نیز ۲p,۲s,۱s و غیره می نامیم و توجه داریم که هرکدام از این ترازها در واقع از دو زیر تراز تشکیل یافته اند.

بر طبق اصل طرد پائولی در هر تراز حداکثر دو الکترون با اسپین های مخالف جای می گیرند. مولکول Li_2 شش الکترون دارد، چهار تای آن ها تراز دوگانه ی مولکولی ۱s و دوتای دیگر تراز پایین تر $2s$ دوگانه را اشغال می کنند.

شکافتگی ترازها در مولکول و جامد به چه عواملی بستگی دارد؟

مطابق بحث فوق، مقدار شکافتگی شدیداً به فواصل بین هسته ای دو اتم در مولکول بستگی دارد. هرچه هسته ها به هم نزدیک تر باشند پریشیدگی شدیدتر و شکافتگی بزرگ تر خواهد بود. هم چنین شکافتگی به اوربیتال های اتمی بستگی دارد. شکافتگی تراز ۲p بزرگتر از تراز ۲s است که آن هم به نوبه ی خود از شکافتگی تراز ۱s بزرگ تر است. دلیل آن این است که شعاع اوربیتال ۱s خیلی کوچک است و این اوربیتال خیلی محکم مقید به هسته خود است . این اوربیتال معمولاً از پریشیدگی متأثر نمی شود. این مطلب در مورد اوربیتال های ۲s,۲p که شعاع بزرگ تری دارند و خیلی ضعیف به هسته های خود مقیدند درست نیست. با یک بیان کلی بررسی فوق را می توان

به یک مولکول چند اتمی Li که شامل چندین اتم است تعمیم داد. بنابراین در یک مولکول سه اتمی هر تراز اتمی به سه تراز و در یک مولکول چهار اتمی هر تراز به چهار تراز شکافته می‌شود. لیتیوم جامد را می توان به عنوان لیتیوم گازی در نظر گرفت که تعداد اتم ها ی آن بسیار زیاد و به صورت یک مولکول لیتیوم بسیار عظیم درآمده است.

نوارهای انرژی

هرکدام از ترازهای اتمی به N زیر تراز نزدیک به هم شکافته می شود؛ که N تعداد اتم های موجود در جامد است. از آن جا که N خیلی بزرگ و در حدود $۱۰^{۲۳}$ است، زیر لایه ها آن چنان به هم نزدیک اند که به هم می پیوندند و یک نوار انرژی را تشکیل می دهند. بدین ترتیب همان گونه که در شکل (۱-۵ ج) نشان داده شده است ترازهای ۱s, ۲s, ۲p به ترتیب به نوارهای ۱s, ۲s, ۲p تبدیل می‌شوند.

اندازه بازه انرژی بین دو تراز در یک نوار انرژی؟

برای نشان دادن این که زیر لایه ها در یک نوار چقدر به هم نزدیک اند، مثال عددی زیر را در نظر می گیریم: فرض کنید پهنای نوارمقدار نوعی $5eV$ باشد. بازه ی انرژی بین دو تراز مجاور از مرتبه‌ی $\frac{5}{10^{23}} = 5\times10^{-23}eV$ است. از آن جا که این مقدار بی نهایت کوچک است، زیرا لایه ها از یک دیگر قابل تشخیص نیستند و می توانیم توزیع آن ها را به صورت نوارهای انرژی پیوسته در نظر بگیریم.

ساختار طیف انرژی یک جسم جامد؟

با مرور مطالب فوق می توان گفت: طیف یک جسم جامد، ترکیبی از نوارهای انرژی است. نواحی میانی که این نوارها را از هم جدا می کنند، گاف های انرژی، یا نواحی ممنوعه ی انرژی هستند که الکترون ها نمی توانند آن ها را اشغال کنند. برعکس چنین وضعیتی، حالت مربوط به یک اتم یا یک مولکول آزاد است که انرژی های مجاز، مجموعه ای از تراز های گسسته را تشکیل می دهند. قرار گرفتن این تراز های گسسته در نوارهای انرژی، یکی از مهم ترین خواص اساسی یک جسم جامد است و در این کتاب اغلب از آن استفاده خواهد شد.

نوارهای انرژی در جامدات، قضیه بلوخ

تابع بلوخ

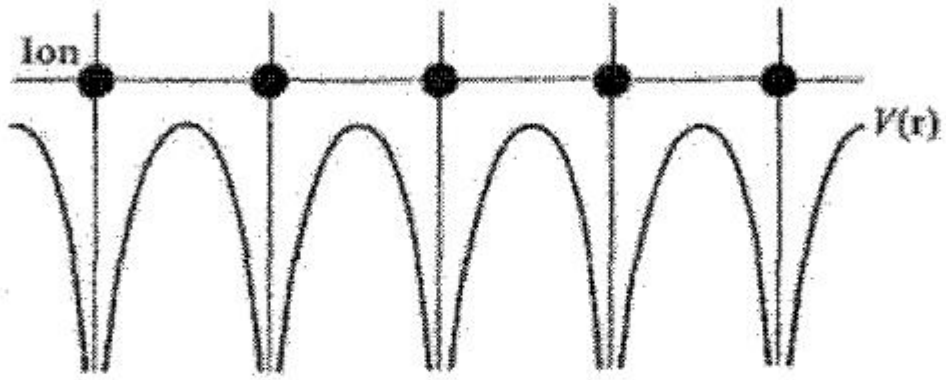
رفتار یک الکترون در یک جامد بلوری توسط معادله ی شرودینگر مطالعه می شود. این معادله را می توان به صورت زیر نوشت (بخش ۲-A):

$$\left[-\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla^{2}+V(r)\right]\psi(r)=E\psi(r) \qquad (۵-۱)$$

V(r) پتانسیل بلور است که توسط الکترون «دیده» می شود. ψ_r و E به ترتیب تابع حالت و انرژی این الکترون اند. پتانسیل V(r) شامل بر هم کنش الکترون با تمام اتم ها در جسم جامد و همین طور برهم کنش الکترون های دیگر است (بعد به این مطلب بر می گردیم). در این مرحله ملاحظه می کنیم که پتانسیل V(r) تناوبی است. این پتانسیل همان تقارن انتقالی بلور را دارد یعنی:

$$V(r+R)=V(r) \qquad (۵-۲)$$

که R بردار شبکه است. چنین پتانسیلی به طور شماتیک در شکل (۳-۵) نشان داده شده است.



شکل ۳-۵ پتانسیل بلور که توسط الکترون دیده می شود.

بر طبق قضیه بلوخ، حل معادله ی (۱-۵) برای یک پتانسیل تناوبی $V(r)$ به صورت زیر است:

$$\psi_k(r)=e^{ik.r}u_k(r) \qquad (۵-۳)$$

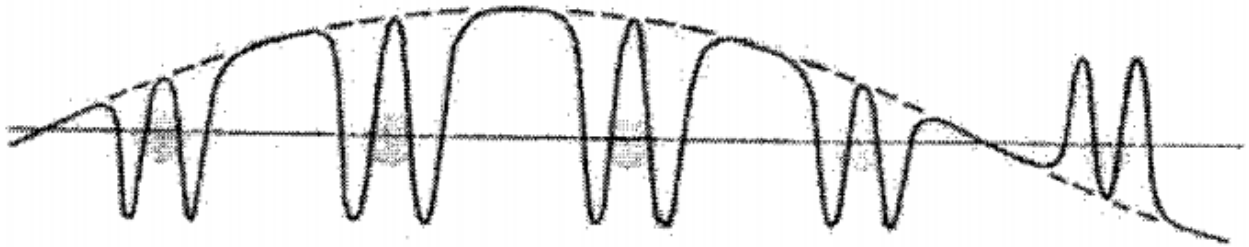
که تابع $u_k(r)$ همان تقارن انتقالی شبکه را دارد یعنی:

$$u_k(r+R) = u_k(r) \qquad (۵-۴)$$

بردار k همان گونه که خواهیم دید، کمیتی مرتبط با اندازه حرکت ذره است.

تابع حالت ψ_k در رابطه ی (۳-۵) که به نام تابع بلوخ معروف است چندین خاصیت جالب دارد.

الف) همان طور که ضریب $e^{ik.r}$ نشان می دهد، این تابع به شکل یک موج تخت رونده است و این نکته دلالت بر این دارد که الکترون در بلور مانند یک ذره ی آزاد منتشر می شود. اثر تابع $u_k(r)$ مدوله کردن این موج است و هم چنان که در شکل (۴-۵) نشان داده شده است، دامنه از یاخته ای به یاخته ی دیگر به طور تناوبی نوسان می کند ولی این بر مشخصه بنیادی تابع موج که یک موج رونده است اثری ندارد.



شکل ۴-۵ موج با تابع بلوخ. منحنی صاف نشان دهنده ی تابع $e^{ik.r}$ است که توسط تابع شبه اتمی $u_k(r)$ مدوله شده است.

اگر الکترون براستی کاملاً آزاد بود تابع حالت ψ_k با رابطه ی $(\frac{1}{V^{1/2}})e^{ik.r}$ بیان می شد، یعنی تابع $u_k(r)$ ثابت می بود. ولی الکترون آزاد نیست و با شبکه اندرکنش دارد و این اندرکنش مشخصه ی ویژه تابع تناوبی u_k را معین می کند.

ب) چون الکترون مانند یک موج با بردار k رفتار می کند، طول موج دو بـروی $\lambda = \frac{2\pi}{K}$ را دارد و بنابراین اندازه حرکت آن

$$P = \hbar k \qquad (۵-۵)$$

است. راجع به بردار اندازه حرکت بلوری الکترون و خواص آن در بخش های بعد بحث می کنیم.

ج) تابع ψ_k بلوخ یک اوربیتال بلوری است و در اطراف اتم خاصی جای گزیده نشده است، بنابراین الکترون متعلق به همه بلور است. البته این مطلب با خاصیت (الف) که الکترون را به صورت یک موج رونده توصیف کردیم سازگار است. توجه کنید که تابع ψ_k به گونه ای انتخاب شده است که تابع توزیع الکترون $|\psi_k|^۲$ در بلور تناوبی باشد.

در بحث فوق بر مقایسه ی بین الکترون بلوری و الکترون آزاد تأکید کردیم و این به درک خواص الکترون در بلور کمک می کند. ولی نباید نتیجه گرفت که این دو الکترون، رفتار کاملاً یک سانی دارند. تابع بلوخ الکترون خواص بسیار جالبی دارد که با الکترون مشترک نیستند. این خواص از اندرکنش الکترون با شبکه نتیجه می شود.