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
۹- فلزات، عایق ها و نیمه رساناها
۱۰- 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

تعداد حالتها در نوار

تابع بلوخ را با $\psi_{n,k}$ نشان دادیم و دلالت بر این دارد که هر مقدار اندیس n و بردار k مبین یک حالت الکترونی یا اوربیتال است. حال نشان می دهیم که تعداد اوربیتال ها در یک نوار داخل منطقه‌ی اول مساوی تعداد یاخته های واحد بلور است. این خیلی شبیه عبارت مربوط به تعداد مدهای ارتعاشی شبکه است بخش (۳-۳) و به روشی کاملاً مشابه و با اعمال شرایط مرزی اثبات می شود.

ابتدا حالت یک بعدی را در نظر می گیریم که در آن تابع بلوخ به شکل زیر است:

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x) \qquad (۵-۱۳)$$

اگر شرایط مرزی تناوبی را به این تابع اعمال کنیم نتیجه می‌شود که تنها مقادیری از k مجازند که با عبارت زیر داده می‌شوند.

$$k = n\frac{۲\pi}{L} \qquad (۵-۱۴)$$

که $n = ۰, \pm ۱, \pm ۲, \ldots$ [توجه کنید که $u_k(x)$ به طور ذاتی تناوبی است. بنابراین شرط $u_k(x+L) = u_k(x)$ به طور اتوماتیک برقرار است]. همانند بخش (۳-۳) مقادیر مجاز k شبکه‌ی منظمی تشکیل می‌دهند که طول هر ضلع آن $\frac{۲\pi}{L}$ است.بنابراین تعداد حالت های داخل اولین منطقه‌ی بریلیون به طول $\frac{۲\pi}{a}$ برابر است با:

$$(\frac{۲\pi}{a})/(\frac{۲\pi}{L}) = \frac{L}{a} = N$$

a ثابت شبکه و L طول نمونه مورد نظر است

که N تعداد یاخته های واحد است و این با آن چه قبلاً به دست آمده سازگاری دارد.

بحث مشابه‌ای برای اعتبار عبارت فوق برای شبکه ی دو یا سه بعدی می‌توان ارائه کرد.

دیدم که هر نوار N حالت در داخل منطقه ی اول دارد. از آن جا مطابق اصل طرد پائولی در هرکدام از این حالت ها حداکثر دو الکترون با اسپین های مخالف می‌توانند جای گیرند نتیجه می‌شود که تعداد الکترون هایی که یک نوار منفرد را می توانند اشغال کنند ۲N است. این نتیجه‌ی جالبی است که بعداً از آن استفاده می‌شود تا پیش بینی شود که آیا یک جسم جامد هم چون یک فلز یا مانند یک عایق رفتار می کند.

مدل الکترون تقریبا آزاد

Nearly- Free- Electron Model (NFE)

در بخش (۳–۵) و (۴–۵) ، خواص عمومی توابع حالت و همین طور انرژی های یک الکترون که درون یک جسم جامد بلوری حرکت می کند را مطالعه کردیم. برای به دست آوردن نتیجه ی صریح باید معادله ی شرودینگر (۱–۵) را برای پتانسیل واقعی V(r) در جسم جامد مورد نظر حل کنیم. ولی حل معادله ی شرودینگر به جز برای ساده ترین پتانسیل ها، کاری مشکل،وقت گیر و توام با تفصیل ریاضی است. گرچه اساساً باید نتایج بدست آمده با تجربه مقایسه شود، در این جا ترجیح می دهیم بحث را با حل معادله برای حالتی که پتانسیل های ساده شده ای حاکم است شروع کنیم. مزیت این کار این است که می توانیم معادله ی شرودینگر را با اعمال ریاضی کمتری حل کنیم و توجه خود را به مفاهیم فیزیکی نوینی معطوف کنیم که در این موضوع وارد می‌شوند.

در این بخش مدل الکترون تقریباً آزاد (NFE) را بررسی می کنیم که در این مدل فرض شده پتانسیل بلور آن چنان ضعیف است که الکترون ها اساساً هم چون یک ذره ی آزاد عمل می کنند. سپس آثار این پتانسیل را با استفاده از روش پریشیدگی منظور می کنیم. این روش در صورتی معتبر است که پتانسیل ضعیف باشد. این مدل به عنوان یک تقریب برای نوارظرفیت در فلزات ساده مانند Na, K, Al و غیره به کار می رود.

مدل دیگر مدل بستگی قوی می باشد که در آن به جز یک برهم کنش ضعیف با اتم‌های همسایه که بعداً می توان آن را به صورت یک پریشیدگی در نظر گرفت؛ پتانسیل‌های اتمی آن قدر قوی اند که اساساً الکترون، اطراف یک اتم منفرد گردش می کند. و به عنوان یک مدل تقریبی برای نوارهای داخلی باریک جامدات، مثلاً نوار ۳d در فلزات واسطه عمل می کند.

مدل شبکه خالی

نقطه‌ی آغاز مدل NFE ، حل معادله ی شرودینگر برای حالتی است که پتانسیل دقیقاً صفر است یعنی الکترون کاملاً آزاد است. به هر جهت لازم است که در حل معادله، خواص تقارنی بخش (۴-۵) که توسط تقارن انتقالی شبکه ی مستقیم اعمال می گردند منظور شوند. این شرط منجر به مدل شبکه‌ی خالی می شوند.

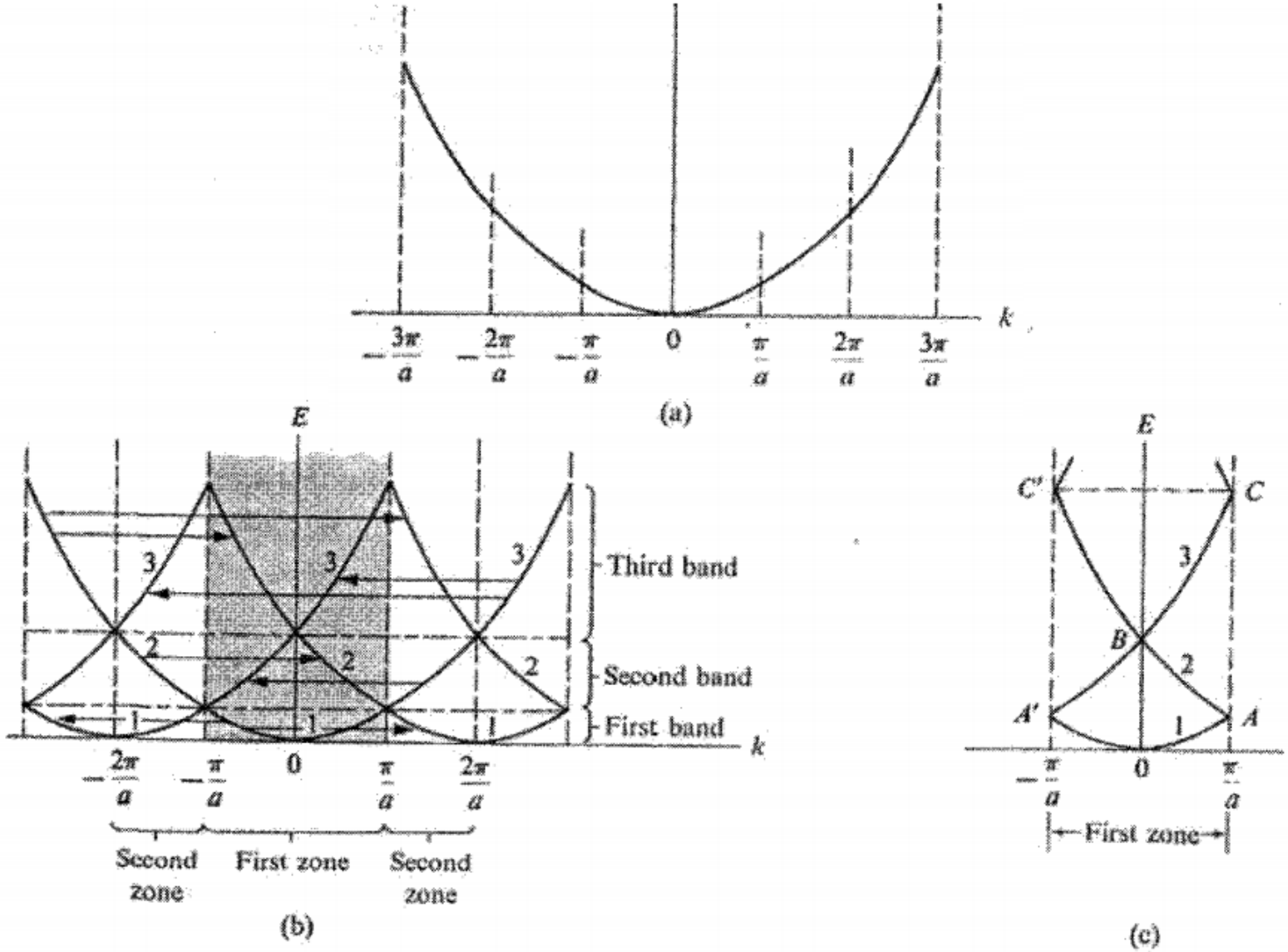
در یک شبکه ی یک بعدی، توابع حالت و انرژی برای مدل شبکه ی خالی به صورت زیرند.

$$\psi_k^{(o)} = \frac{1}{L^{1/2}} e^{ikx} \qquad (۵-۱۵)$$

$$E_{(k)}^{(o)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_o} \qquad (۵-۱۶)$$

که شاخص بالای (o) نشان می دهد که حل ها مربوط به حالت پریشیده نشده هستند(بخش A-۷).

منحنی نمایش انرژی $E_{(k)}^{(o)}$ برحسب k که در شکل (۱۰-۵ الف) رسم شده همان شکل آشنای هذلولی است. شکل (۱۰-۵ ب) نتیجه ی اعمال خاصیت تقارنی (i) بخش (۴-۵) را نشان می‌دهد. اجزاء هذلولی شکل (۱۰-۵ ب) در لبه های مناطق گوناگون قطع شده و به اندازه های مضاربی از $G = \frac{۲\pi}{a}$ انتقال یافته اند تا مطمئن شویم انرژی در هر دو نقطه ی معادل یکسان است. طیف انرژی هنگامی که بررسی ما فقط محدود به اولین منطقه ی بریلیون باشیم در شکل (۱۰-۵ ج) نشان داده شده است.



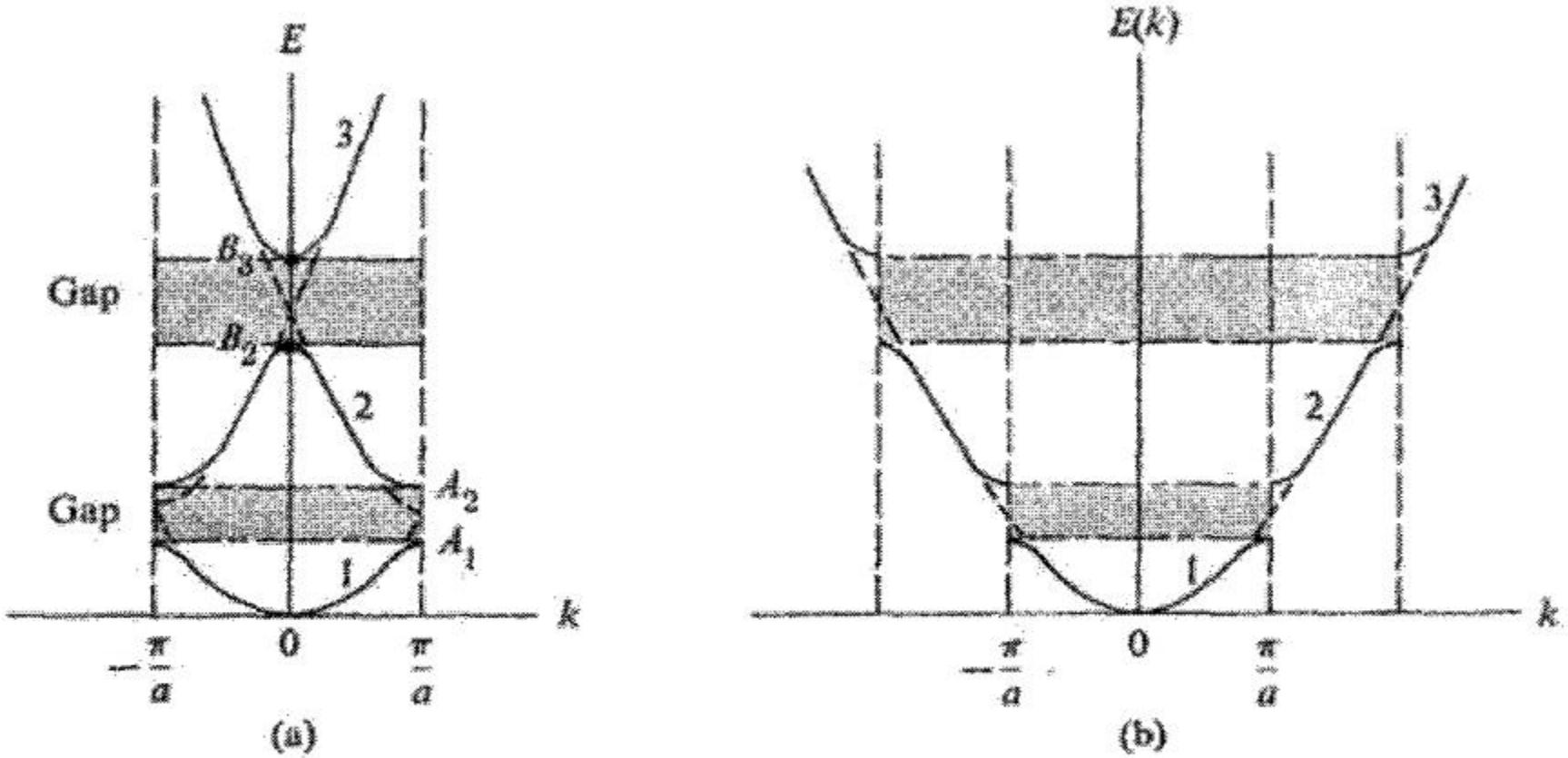
شکل ۱۰-۵ (الف) هذلولی آشنا که منحنی پاشندگی برای یک ذره آزاد با انرژی $E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m_o}$ را نشان می‌دهد. (ب) منحنی های پاشندگی برای همان ذره در مدل شبکه ی خالی که تقارن انتقالی و نوارهای مختلف را نشان می دهد .(ج) منحنی های پاشندگی برای مدل شبکه ی خالی (فقط در اولین منطقه)

نحوه‌ی ارائه‌ای که برای نمایش شکل (۱۰-۵ ج) به کار رفته به نمایش منطقه ی تحویل یافته[1] موسوم است از آن جا که این نمایش تمام اطلاعات مورد نیاز را مشخص می کند راحت ترین است . نمایش شکل (۱۰-۵ الف) نمایش منطقه ی گسترش یافته[2] نام دارد و وقتی مناسب است که بخواهیم ارتباط نزدیک بین یک الکترون آزاد و یک الکترون بلوری برقرار کنیم. شکل (۱۰-۵ ب) دلالت بر نمایش منطقه ی تناوبی[3] دارد و گاهی که بررسی توپولوژیکی در فضای k مورد نظر باشد مفید است. تمام این نمایش ها کاملاً معادل اند. استفاده از یک نمایش بخصوص به خاطر سهولت آن است که و نه به خاطر برتری ذاتی آن بر روش های دیگر.

---

1. Reduced Zone Scheme
2. Periodic Zone Scheme
3. Periodic Zone Scheme

هنگامی که پتانسیل بلور منظور شود، طیف انرژی (۱۰-۵ج) چگونه تغییر خواهد کرد؟. شکل (۱۱-۵ الف) این مطلب را نشان می دهد . اولین و دومین نوار که قبلاً در نقطه ی A و (A') در شکل (۱۰-۵ج) تماس داشتند حالا شکافته می شوند. به طوری که یک گاف انرژی در مرز منطقه‌ی بریلیون ایجاد می شود . یک گاف مشابهی در مرکز منطقه، جایی که نوارهای ۲و۳ قبلاً هم دیگر را قطع کرده بودند (نقطه ی B در شکل ۱۰-۵ج) و هم چنین در نقطه ی C که نوارهای ۳و۴ قبلاً یک دیگر را قطع کرده بودند ایجاد می شود. بنابراین در مدل شبکه ی خالی، در حالت کلی گاف های انرژی در فضای k جایی که نوارها یک دیگر را قطع می کنند ایجاد می شود . این تقاطع یا در مرکز و یا در مرزهای BZ رخ می دهد. در این نقاط شکل طیف شدیداً با پتانسیل بلور (که ممکن است ضعیف باشد)، تغییر می کند. در واقع آن چه پتانسیل بلور انجام می دهد. هموار کردن شکل گوشه هایی است که در ساختار نواری شبکه ی خالی وجود دارند.



شکل ۱۱-۵ (الف) منحنی های پاشندگی در مدل الکترون آزاد در منطقه ی تحویل یافته (ب) همان منحنی ها در منطقه ی گسترش یافته .

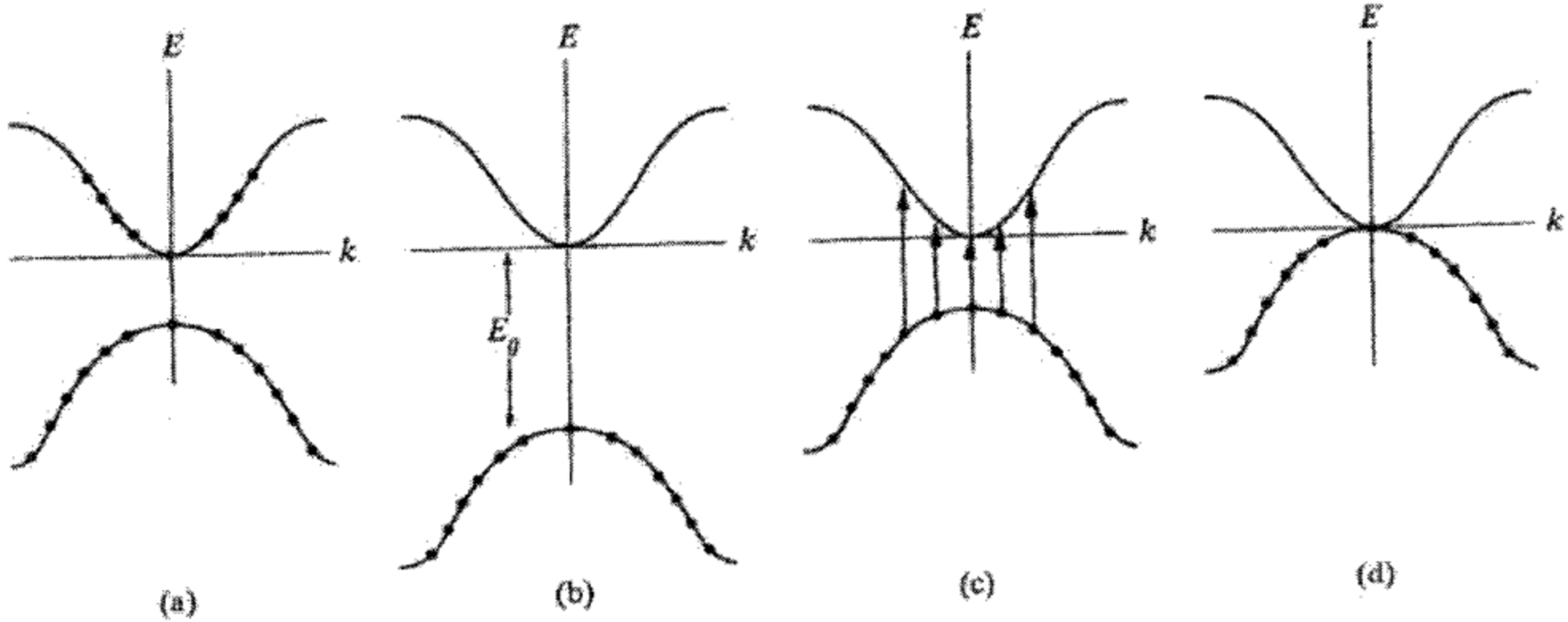
مطلب فوق را بدون اثبات بیان کردیم. صحت آن بر مبنای روش پریشیدگی قابل اثبات است

جامدات به دو دسته ی عمده تقسیم می شوند فلزات و عایق ها، فلزات یا رساناها جامداتی هستند که در اثر اعمال یک میدان الکتریکی جریان الکتریکی در آن ها ایجاد می شود. برعکس، اعمال یک میدان الکتریکی هیچ جریان الکتریکی در عایق ها ایجاد نمی کند. یک ملاک ساده برای تمایز این دو دسته از جامدات، تئوری نواری انرژی می باشد. این ملاک بر اساس عبارت زیر است: یک نوار که کاملاً پر است حتی در حضور یک میدان الکتریکی، هیچ جریان الکتریکی را هدایت نمی کند. در نتیجه یک جسم جامد در صورتی مانند یک فلز رفتار می کند که بعضی از نوارها، به طور جزیی اشغال شده باشند. اثبات این عبارت را بعداً (بخش ۱۳-۵) ارائه خواهیم کرد ولی در این جا آن را به عنوان یک واقعیت موجود می پذیریم.

حال این مطلب را مثلاً برای Na به کار می بریم. از آن جا که نوارهای داخلی ۲p,۲s,۱s تماماً اشغال شده اند، نمی توانند سهمی در جریان الکتریکی داشته باشند بنابراین باید توجه خود را فقط

معطوف به بالاترین نوار اشغال شده یعنی نوار ظرفیت کنیم. در سدیم این نوار $3s$است . هم چنان که در بخش (۵-۵) ملاحظه شد، این نوار می تواند تعداد ۲Nc الکترون در خود جای دهد که N_c تعداد کل یاخته های واحد است. در Na که شبکه ی براوه bcc دارد، هر یاخته یک اتم دارد که یک الکترون ظرفیت (یا $3s$) دارد. بنابراین تعداد کل الکترون های ظرفیت N_c است و هم چنان که در شکل (۲۱-۵ ب) نشان داده شده است، هنگامی که این الکترون ها در نوار جای گیرند، تنها نیمی از نوار را پر می کنند. بنابراین سدیم هم چون یک فلز رفتار می کند زیرا نوار ظرفیت آن نیمه پر است.

به روش مشابهی نتیجه می گیریم که قلیایی های دیگر مانند K, Li و... نیز فلزند زیرا نوارهای ظرفیت آن ها که به ترتیب ۴s,۲s و... می باشد که تنها به طور جزیی پرشده اند. فلزات نجیب Au, Ag, Cu نیز به همان دلیل رسانا هستند. در Cu نوار ظرفیت (نوار ۴s) فقط تا نیمه پر است، زیرا هر یاخته در ساختار fcc خود تنها در یک الکترون ظرفیت سهیم است.



شکل ۲۱-۵ توزیع الکترون ها در نوار در (الف) یک فلز، (ب) یک عایق، (ج) یک نیمه رسانا و (د) یک شبه فلز.

به عنوان مثال از یک عایق خوب، الماس (کربن) را ذکر می کنیم. در این جا، نوار بالا از هیبریداسیون حالت های اتمی ۲s و ۲p ناشی می شود (بخش ۱۰-A) و منجر به دو نوار می شود که با یک گاف انرژی از هم جدا شده اند. از آن جا که این نوارها از حالت های s و p ناشی شده اند و یاخته ی واحد در این جا شامل دو اتم است هر کدام از این نوارها می توانند $8Nc$ الکترون را در خود جای دهند. در الماس هر اتم در ۴ الکترون سهیم است که در نتیجه در هر یاخته واحد، ۸ الکترون ظرفیت وجود دارد. بنابراین در این جا نوار ظرفیت کاملاً پر است و همان گونه که در بالا بیان شد این ماده عایق است.

موادی هستند که در موقعیتی بین فلزات و عایق ها جای می گیرند. اگر گاف بین نوار ظرفیت و نواری که بلافاصله بالای آن قرار دارد کوچک باشد، الکترون ها به سادگی تحریک حرارتی می شوند و از نوار ظرفیت به نوار بالا می روند. هر دو نوار نیمه پر هستند و هردو در رسانایی الکتریکی سهیم اند. چنین مواردی نیمه رسانا نام دارند. Ge و Si مثال هایی از این موادند که به

ترتیب دارای گاف هایی در حدود ۱و۰/۷ الکترون هستند. گاف انرژی الماس در حدود ۷eV است. به طور اجمال می توان گفت یک ماده که گاف آن کمتر از ۲eV باشد در دمای اتاق به صورت یک نیمه رسانا رفتار می کند.

رسانایی یک نیمه رسانای نوعی در مقایسه با رسانایی فلزات خیلی کم است، ولی هنوز چندین مرتبه‌ی بزرگی از رسانایی عایق بزرگ تر است. بنابراین بی مورد نیست که نیمه رساناها را به عنوان دسته ی جدیدی از مواد طبقه بندی کنیم، گرچه آن ها در دماهای خیلی پایین عایق هستند.

در بعضی از مواد گاف کاملاً از بین می رود و یا این که حتی دو نوار کمی هم پوشانی دارند. این مواد شبه فلز نامیده می شوند .(شکل ۲۱-۵ د) بهترین مثال شناخته شده Bi است ولی از مواد دیگر چون As, Sb و قلع سفید نیز می‌توان نام برد.

یک مسأله‌ی جالب در این مورد در عناصر دو ظرفیتی مانند Be, Mg, Zn و غیره ظاهر می گردد. مثلاً Be با یک اتم بریاخته، به ساختار hcp متبلور می شود. از آن جا که دو الکترون بر یاخته وجود دارد نوار ۲s می بایست کاملاً پر باشد ونتیجه ی آن یک عایق است. در واقع Be یک فلز است ولی با رسانایی کم. دلیل ظاهر شدن این پارادوکس این است که نوارهای ۲s و ۲p در Be تا حدودی هم پوشانی دارند، به طوری که الکترون ها از نوار ۲s به ۲p انتقال می یابند و نتیجه اش این است که نوارها، کاملاً پر نمی شوند. بنابراین Be یک فلز است. شرایط مشابهی برای فلز بودن Cu, Mg, Zn ودیگر فلزات دواتمی برقراراست.

ماده ای که تعداد الکترون های ظرفیت بر یاخته ی واحد آن فرد است، الزاماً یک فلز است. زیرا تعداد زوجی الکترون لازم است تا یک نوار پرشود. ولی هنگامی که تعداد الکترون ها زوج باشد، ماده ممکن است یا عایق و یا فلز باشد و این بسته به آن است که آیا نوارها مختلف اند و یا هم پوشانی دارند.

Periodic Table of the Elements

Atomic Number	6
Symbol	C
Name	Carbon
Average Atomic Mass	12.0107

Hydrogen
Semiconductors (also known as metalloids)

Metals
- Alkali metals
- Alkaline earth metals
- Transition metals
- Other metals

Nonmetals
- Halogens
- Noble gases
- Other nonmetals

	Group 1	Group 2	Group 3	Group 4	Group 5	Group 6	Group 7	Group 8	Group 9	Group 10	Group 11	Group 12	Group 13	Group 14	Group 15	Group 16	Group 17	Group 18
1	1 H Hydrogen 1.007 94																	2 He Helium 4.002 60
2	3 Li Lithium 6.941	4 Be Beryllium 9.012 182											5 B Boron 10.811	6 C Carbon 12.0107	7 N Nitrogen 14.0067	8 O Oxygen 15.9994	9 F Fluorine 18.998 4032	10 Ne Neon 20.1797
3	11 Na Sodium 22.989 769 28	12 Mg Magnesium 24.3050											13 Al Aluminum 26.981 5386	14 Si Silicon 28.0855	15 P Phosphorus 30.973 762	16 S Sulfur 32.065	17 Cl Chlorine 35.453	18 Ar Argon 39.948
4	19 K Potassium 39.0983	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.955 912	22 Ti Titanium 47.867	23 V Vanadium 50.9415	24 Cr Chromium 51.9961	25 Mn Manganese 54.938 045	26 Fe Iron 55.845	27 Co Cobalt 58.933 195	28 Ni Nickel 58.6934	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.409	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.64	33 As Arsenic 74.921 60	34 Se Selenium 78.96	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.798
5	37 Rb Rubidium 85.4678	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.906 85	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.906 38	42 Mo Molybdenum 95.94	43 Tc Technetium (98)	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 102.905 50	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.8682	48 Cd Cadmium 112.411	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.710	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.60	53 I Iodine 126.904 47	54 Xe Xenon 131.293
6	55 Cs Cesium 132.905 4519	56 Ba Barium 137.327	57 La Lanthanum 138.905 47	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.947 88	74 W Tungsten 183.84	75 Re Rhenium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.217	78 Pt Platinum 195.084	79 Au Gold 196.966 569	80 Hg Mercury 200.59	81 Tl Thallium 204.3833	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.980 40	84 Po Polonium (209)	85 At Astatine (210)	86 Rn Radon (222)
7	87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium (226)	89 Ac Actinium (227)	104 Rf Rutherfordium (261)	105 Db Dubnium (262)	106 Sg Seaborgium (266)	107 Bh Bohrium (264)	108 Hs Hassium (277)	109 Mt Meitnerium (268)	110 Ds Darmstadtium (271)	111 Rg Roentgenium (272)	112 Uub* Ununbium (285)		114 Uuq* Ununquadium (289)		116 Uuh* Ununhexium (292)		

- The systematic names and symbols for elements greater than 111 will be used until the approval of trivial names by the IUPAC.

The discoveries of elements with atomic numbers 112, 114, and 116 have been reported but not fully confirmed.

58 Ce Cerium 140.116	59 Pr Praseodymium 140.907 65	60 Nd Neodymium 144.242	61 Pm Promethium (145)	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.964	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.925 35	66 Dy Dysprosium 162.500	67 Ho Holmium 164.930 32	68 Er Erbium 167.259	69 Tm Thulium 168.934 21	70 Yb Ytterbium 173.04	71 Lu Lutetium 174.967
90 Th Thorium 232.038 06	91 Pa Protactinium 231.035 88	92 U Uranium 238.028 91	93 Np Neptunium (237)	94 Pu Plutonium (244)	95 Am Americium (243)	96 Cm Curium (247)	97 Bk Berkelium (247)	98 Cf Californium (251)	99 Es Einsteinium (252)	100 Fm Fermium (257)	101 Md Mendelevium (258)	102 No Nobelium (259)	103 Lr Lawrencium (262)

The atomic masses listed in this table reflect the precision of current measurements. (Each value listed in parentheses is the mass number of that radioactive element's most stable or most common isotope.)

خلاصه آنچه که در کلاس در مورد چگالی آب گفته شد

$$1\,mL = cm^3 = 1\,cc$$

۱ سی سی = ۱ سانتی متر مکعب = ۱ میلی لیتر

$$\text{چگالی آب} = 1\,\frac{gr}{cm^3} = 1\,\frac{gr}{cc} = 1\,\frac{kg}{L} = 1000\,\frac{kg}{m^3}$$