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

نوارهای انرژی

تاکنون راجع به تابع حالت بحث شد و در مورد انرژی چیزی گفته نشد. حال به طیف انرژی می پردازیم که از حل معادله ی شرودینگر (معادله ی ۱-۵) نتیجه می شود. در این راستا، معادله ی شرودینگر را به شکل متفاوتی بازنویسی می کنیم. با جای گزینی ψ_k از تابع بلوخ که به شکل رابطه ی (۳-۵) است و حذف ضریب $e^{ik.r}$ و پس از انجام عملیات لازم، به رابطه ی زیر می رسیم:

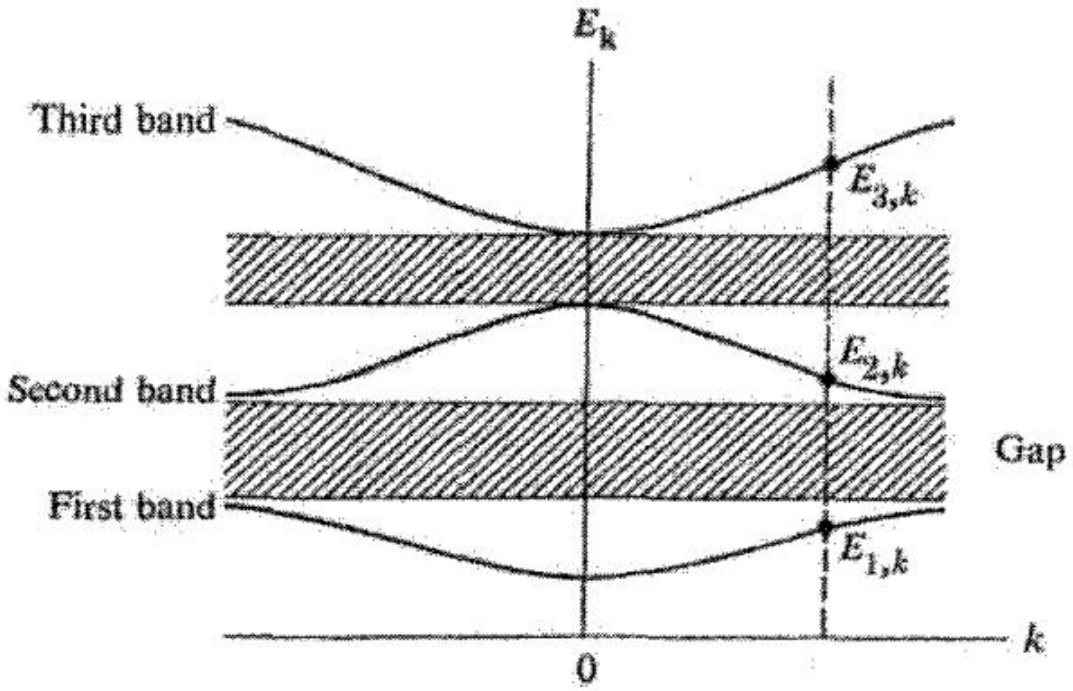
$$[-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla + ik)^2 + V(r)]u_k(r) = E_k u_k(r) \qquad (۵-۶)$$

که در واقع معادله ی موج برای تابع $u_k(r)$ است. این یک معادله ی ویژه مقدار ، شبیه معادله‌ی شرودینگر است. بنابراین می توان آن را به روش مشابه حل کرد. توجه کنید که عملگر داخل

پرانتز، تابع صریحی از u_k است. بنابراین هم ویژه تابع و هم ویژه مقدار به k بستگی دارند، به همین دلیل آن ها را با اندیس برداری k مشخص کردیم. یک تابع ویژه مقدار نه به یک حل بلکه به چندین حل منجر می شود. برای هر مقدار k چندین حل به دست می آید که مجموعه ای از انرژی‌های گسسته $E_{1,k}$، $E_{2,k}$ و... را تشکیل می دهند شکل (۵-۵)[1]. از آن جا که این انرژی ها به k بستگی دارند، با تغییر k در بازه ی مقادیر خود انرژی ، به صورت پیوسته تغییر می کنند. هم چنان که در شکل نشان داده شده است هر تراز به یک نوار انرژی، منجر می شود. بنابراین انرژی ویژه مقدار را به صورت $E_n(k)$ می نویسیم، که اندیس n ضریب نواری[2] نامیده می شود.

تعداد نوارها زیاد (معمولاً بی نهایت) است، ولی فقط پایین ترین نوارها توسط الکترون ها اشغال می‌شوند. هر نوار یک ناحیه ی انرژی معینی را می پوشاند که چون در فضای k رسم شود از پایین‌ترین تا بالاترین مقادیر گسترش دارد. بازه هایی از انرژی که نوارهای انرژی را از هم جدا کرده‌اند، گاف های انرژی اند که نواحی انرژی ممنوعه ای هستند که الکترون ها نمی‌توانند این نواحی را اشغال کنند.

۱- به بیان دیگر انرژی تابع چند مقداره ای از k است



شکل ۵-۵ گاف ها و نوارهای انرژی، ناحیه هاشور زده نمایانگر گاف های انرژی است.

از آن جا که k یک کمیت برداری است، دیاگرام شکل (۵-۵) ترسیمی از نوارهای انرژی، در فقط یک جهت به خصوص از فضای k است. اگر این نوارها در جهت های گوناگون k رسم شوند، در حالت کلی شکل آن ها تغییر خواهد کرد. بنابراین برای نمایش کامل نوارها لازم است مقادیر انرژی را در فضا k تعیین نماییم.

پتانسیل بلور

حال به پتانسیل بلور $V(r)$ می پردازیم که بر الکترون اعمال می‌شود. این پتانسیل ترکیبی از دو جزء است؛ برهم کنش الکترون با مغزهای یونی که شبکه را تشکیل می دهند، و برهم کنش الکترون با الکترون های بلوخ که داخل شبکه حرکت می کنند. مثلاً در سدیم فلزی یک الکترون در نوار ۳s با یون های Na^+ برهم کنش می کند و ساختار bcc را تشکیل می دهد. این الکترون با الکترون های دیگر این نوار نیز بر هم کنش دارد. بنابراین می‌توانیم $V(r)$ را به صورت مجموع دو جمله بنویسیم:

$$V(r) = V_i(r) + V_e(r) \qquad (۵-۷)$$

که جمله ی اول سمت راست نمایان گر برهم کنش یا مغز های یونی و جمله‌ی دوم نمایان گر برهم کنش با الکترون ها است.

قسمت یونی را می توان به صورت زیر نوشت:

$$V_i(r) = \sum_j \upsilon_i(r - R_j) \qquad (۵-۸)$$

همان گونه که در شکل (۶-۵ الف) نشان داده شده است، $\upsilon_i(r-R_j)$ پتانسیل یک یون است که در نقطه ای به بردار شبکه ی R_j جای گزیده شده است؛ و جمع روی تمام یون ها است. واضح است که پتانسیل $v_i(r)$ همان خاصیت تناوبی شبکه را دارد.

اثر استتار (حفاظت)-Screening effect

پتانسیل الکترونی $V_e(r)$ که اصطلاحاً اندرکنش الکترون ـ الکترون نیز نامیده می شود، خصوصیاتی دارد که بررسی آن را بسیار مشکل می کند. نخست این که ما تنها در صورتی می‌توانیم این جمله را محاسبه نماییم که حالت های الکترون های دیگر را بدانیم. ولی این حالت ها از ابتدا معلوم نیستند. در واقع حالت های بسیاری هستند که می خواهیم آن ها را به دست

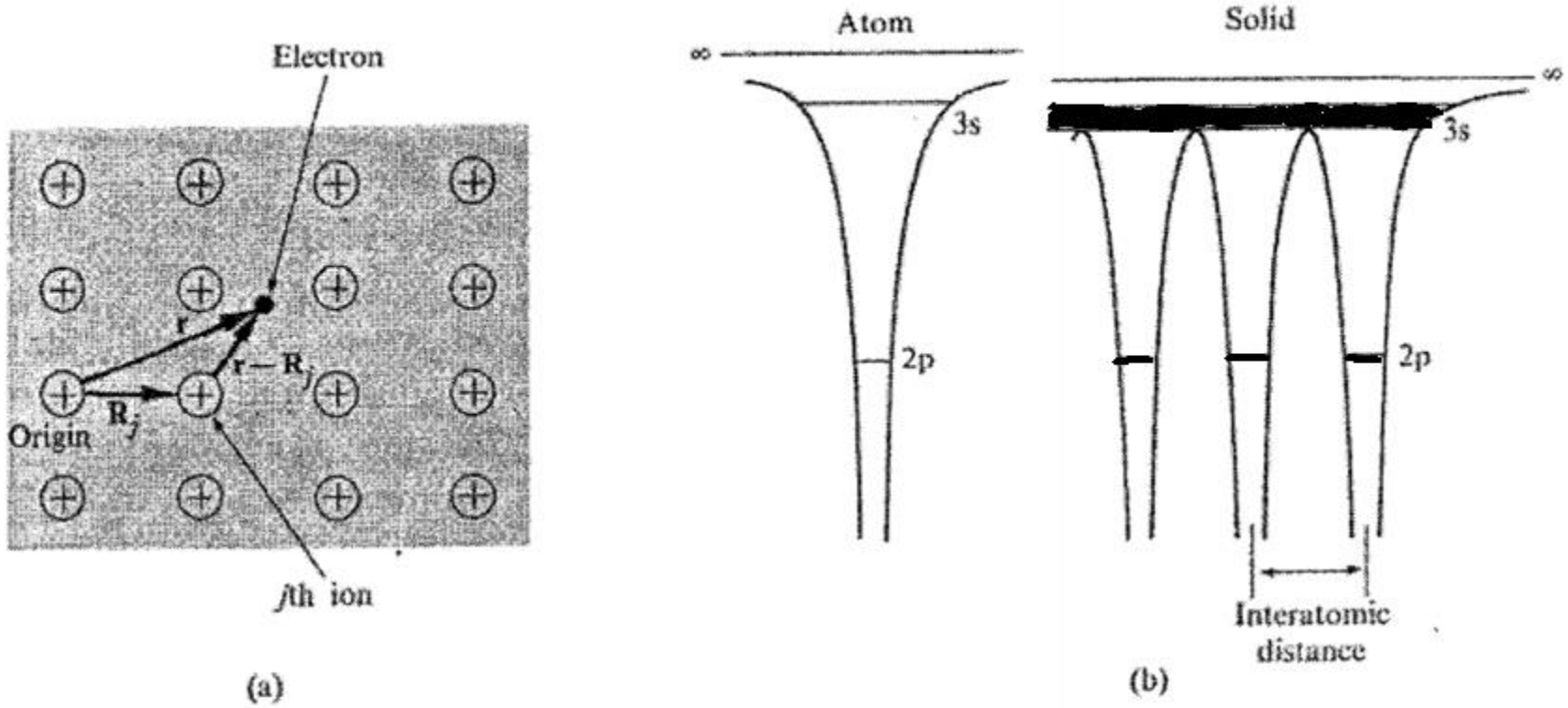
آوریم. دوم آن که پتانسیل $V_e(r)$ کاملاً تناوبی نیست. زیرا الکترون ها در درون شبکه مداوم در حال حرکت هستند. سوم آن که همان گونه که در بالا انجام شد، در یک بررسی کامل باید دینامیک همه‌ی الکترون ها به طور هم زمان (و نه یک الکترون در یک لحظه) در نظر گرفته شود. این یک نمونه‌ای از مسائل بس ذره ای است که اغلب در فیزیک حالت جامد بررسی می‌شود.

در مواجهه با این مشکلات، خوشبختانه بنابر دلایلی که در بخش ۳-۴ گفته شد برهم کنش الکترون ـ الکترون ، کاملاً ضعیف است. و به خاطر این واقعیت، مشکلات فوق به اندازه ای که در ابتدا جلوه می کرد جدی نیستند. نتیجه ی مهم این برهم کنش این است که الکترون ها به گونه‌ای توزیع می شود که عمدتاً در اطراف یون ها قرار گیرند و این یون ها را از الکترون‌های دیگر محافظت می کنند. این یک اثر اضافه ای دارد که بر هم کنش الکترون ـ یون راحتی در بلند برد ضعیف می‌سازد که یک شرط مناسب دیگر است.

بنابراین می‌توان یک عبارت تقریبی برای پتانسیل به صورت زیر نوشت:

$$V(r) = \sum_j \upsilon_s(r - R_j) \qquad (۵-۹)$$

که $\upsilon_s(r - R_j)$ پتانسیل یون حفاظت شده است که در مکان شبکه ای R_j قرار گرفته است. دقیقاً به خاطر اینکه این پتانسیل تناوبی است، شرط قضیه ی بلوخ را برآورده می کند . شکل (۶-۵ ب) پتانسیل بلور را برای Na نشان می دهد.



شکل ۶-۵ (الف) بر هم کنش یک الکترون با مغزهای یونی. نقاط کوچک نمایان گر الکترون ها هستند. (توزیع الکترون ها به طور صحیح نشان داده نشده است. در واقع الکترون ها تمایل دارند که اطراف یون ها جمع شوند.) (ب) طیف یک اتم سدیم (سمت چپ)، و یک سدیم جامد (سمت راست) [J. C. Slater, Physics Today 21,43(1963)] به پهن شدگی تراز ۳S و تبدیل آن به نوار ۳S در جامد، و این که این نوار تقریباً به طور کامل بالای سدهای پتانسیل اتم ها قرار دارد توجه کنید. این امر به سبب جای گزیده نشدن الکترون در این نوار می باشد. برعکس، سدهای پتانسیل، الکترون ها ی نوار یا تراز ۲p را وادار می کنند که جای گزیده شوند.

در بحث پیرامون پتانسیل بلور فرض شده است که یونها ساکن اند، این تقریب چقدر درست است؟

در بحث پیرامون پتانسیل بلور، به طور ضمنی فرض کردیم که اتم ها در جای گاه های شبکه ای خود ساکن اند ولی در واقع این طور نیست. همان گونه که در فصل ۳ بحث شد، الکترون ها در نتیجه‌ی برانگیختگی حرارتی خود پیوسته در حالت نوسانی هستند. بنابراین واضح است که فرض ما از شبکه ی ساکن یک فرض تقریبی است و حالا سئوال این است که چقدر این تقریب برقرار است؟ می توان به این سئوال با اشاره به این نکته پاسخ گفت که ساختار های نواری که بر مبنای شبکه‌ی ساکن محاسبه می شوند، به جز در دماهای نزدیک به نقطه ی ذوب جسم جامد، معمولاً با تجربه سازگاری خوبی دارند. دلیل این که تقریب شبکه ی ساکن این چنین خوب برقرار است این است که در تمام دماها حتی تا نقطه ذوب، دامنه ی ارتعاشات شبکه خیلی کوچک تر از فاصله ی بین اتمی است[1]. بنابراین هم چنان که در مورد الکترون نیز دیده شد، تغییر شکل شبکه قابل ملاحظه نیست.

۱– میانگین دامنه ارتعاشات اتمی مربوط به برانگیختن حرارتی در نقطه ی ذوب حدود ۵٪ فواصل بین اتمی است.

تقارن نواری در فضای K، مناطق بریلوئن

ویژه مقدار انرژی $E_n(k)$ برای نوارها (هنگامی که این نوارها در فضای k رسم شوند). خواص تقارنی بسیار مفیدی دارند. قبل از پرداختن به این موضوع، چند کلمه‌ای راجع به مناطق بریلیون بیان می کنیم.

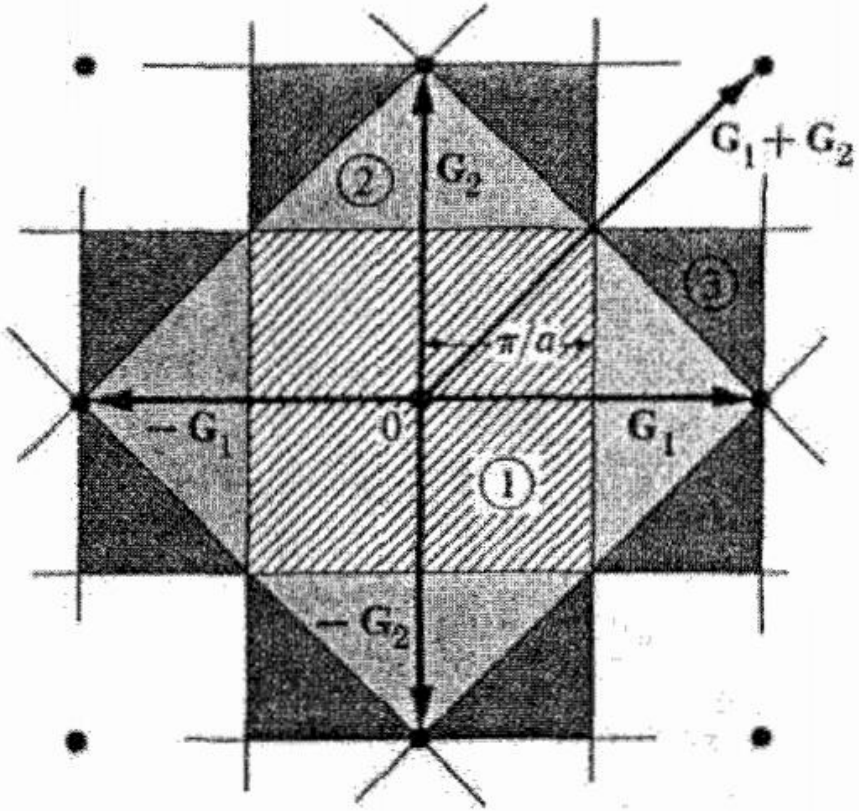
مناطق بریلوئن

راجع به مناطق بریلیون ابتدا در بخش (۶-۲) مربوط به پراش براگ صحبت کردیم. هنگامی که صفحات عمود منصف بردارهای شبکه ی وارون را رسم کنیم، نواحی محصور بین این صفحات مناطق مختلف بریلیون را تشکیل می دهند.

شبکه‌ی مربعی که شبکه‌ی وارون آن نیز یک شبکه ی مربعی به ضلع $\frac{۲\pi}{a}$ است را در نظر می گیریم شکل (۷-۵) بردارهای وارون آن ها، $G_۱, -G_۱, G_۲, -G_۲$ و هم چنین عمود منصف های آن ها در این شکل نشان داده شده است. کوچک ترین ناحیه ی اطراف مبدأ (سطح هاشور زده)، اولین منطقه ی بریلیون است. سطح سایه دار (مرکب از چهار قطعه، به شکل نیم لوزی، محصور بین عمود منصف های $G_۱, G_۲$ و $G_۱ + G_۲$ غیره...) منطقه‌ی دوم بریلیون را تشکیل می‌دهند.

مثلا نیم لوزی سمت راست بین G1 و G1 + G2 و G1 - G2 واقع شده است

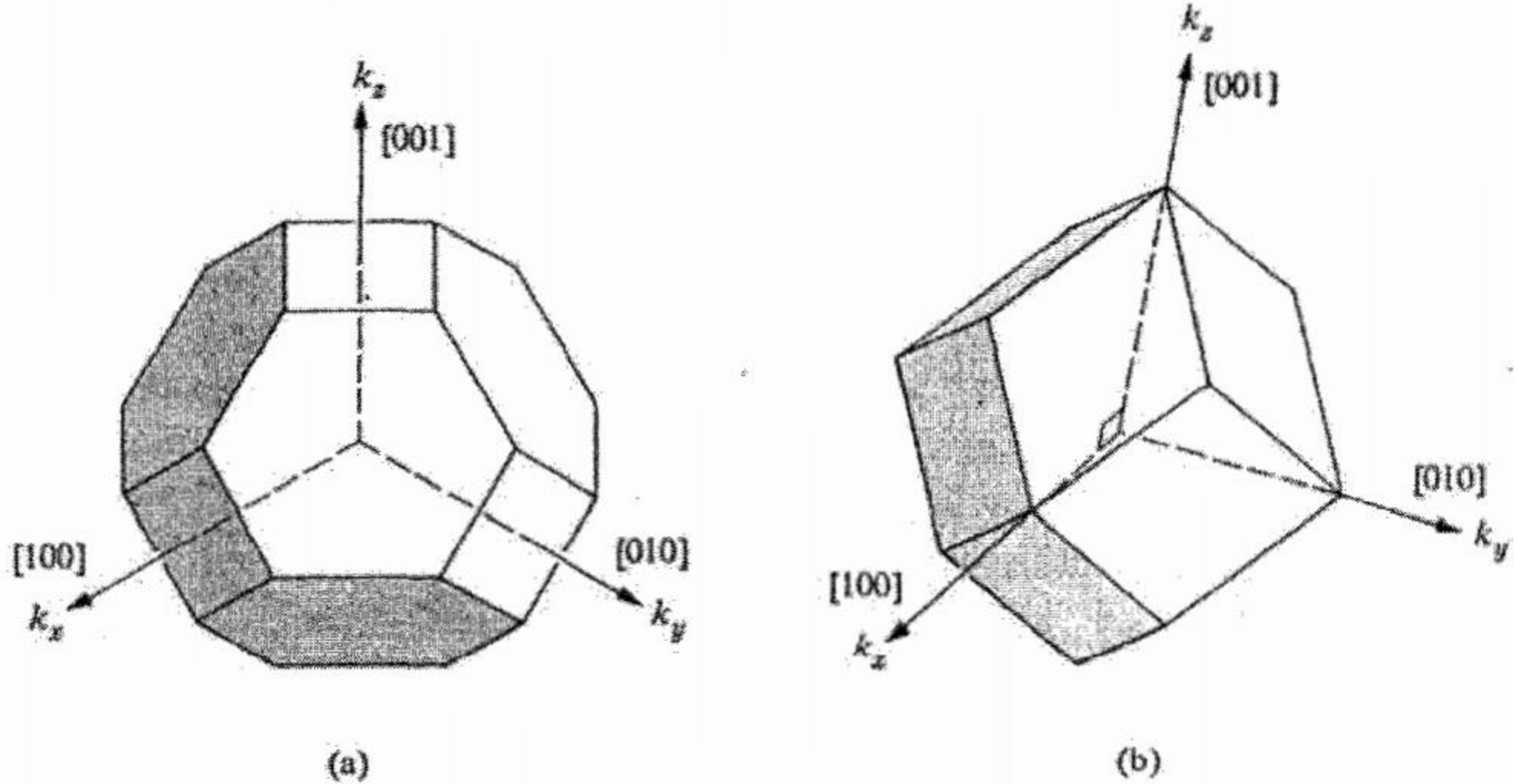
مشابه سطح تیره رنگ در شکل (هشت قسمت) منطقه ی سوم را تشکیل می دهد. چنان چه مرتبه‌های بالاتر عمود منصف ها منظور شوند، مناطق بالاتر بریلیون ایجاد می‌شوند، که ممکن است شکل‌های کاملاً پیچیده‌ای داشته باشند.



شکل ۷-۵ اولین منطقه ی بریلیون مربوط به شبکه ی مربعی. اولین منطقه (ناحیه ی هاشور زده) دومین منطقه (ناحیه ی سایه دار) و سومین منطقه (ناحیه تیره). اعداد نمایان گر اندیس مناطق بریلیون هستند.

به هر جهت بدون توجه به پیچیدگی مناطق، تمام مناطق بریلیون مساحت های یک سانی دارند. می توان در شکل ملاحظه کرد که منطقه‌ی دوم همان مساحت منطقه ی اول یعنی $(\frac{۲\pi}{a})^۲$ را دارد و برای منطقه سوم نیز همین طور است. و می‌توان نشان داد که مساحت تمام مناطق یک سان است و این منحصر به شبکه ی مربعی نیست.

در سه بعد، مناطق بریلیون حجم های سه بعدی هستند، شکل (۸-۵) اولین منطقه را برای شبکه های fcc و bcc نشان می دهد مناطق بالاتر در این شبکه ها شکل های پیچیده ای دارند که تجسم آن‌ها مشکل است و در این جا به آن ها نمی پردازیم.



شکل ۸-۵ اولین منطقه ی بریلیون برای (الف) یک شبکه fcc و (ب) یک شبکه ی bcc

حال راجع به رابطه ی بین مناطق بریلیون و ساختار نواری بحث می کنیم.

خواص تقارنی

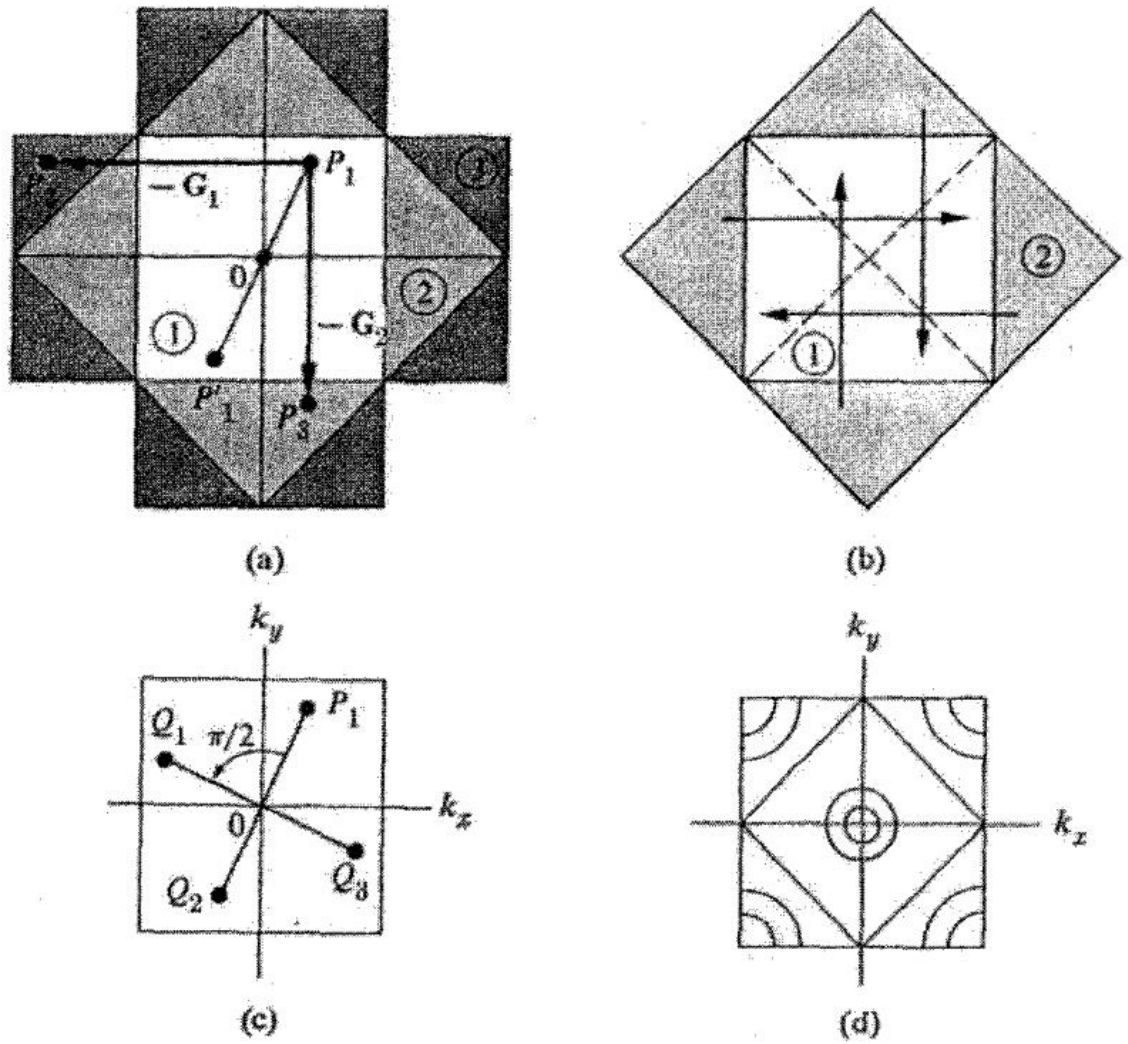
می‌توان نشان داد که هر نوار انرژی $E_n(k)$ خواص تقارنی زیر را برآورده می کند.

i)، $$E_n(k+G) = E_n(k) \qquad (۵-۱۰)$$

ii)، $$E_n(-k) = E_n(k) \qquad (۵-۱۱)$$

iii)، $E_n(k)$ همان تقارن دورانی شبکه ی مستقیم را دارد.

خاصیت (i) دلالت می کند که $E_n(k)$ تناوبی است، و دوره ی تناوب آن مساوی دوره‌ی تناوب بردار شبکه‌ی وارون است. به بیان دیگر هر دو نقطه ای که در فضا k با یک جابه جایی که مساوی یک بردار شبکه‌ی وارون است به هم مربوط اند و انرژی یکسانی دارند. برای مثال در شکل (۹-۵ الف) در نقاط P_1، P_2 و P_3 انرژی یک سانی دارند. زیرا P_2 با انتقالی مساوی $-G_1$ به P_1 مربوط است، P_3 با انتقال $-G_2$ به P_1 مربوط است و هردو $-G_1$ بردارهای شبکه ی وارون‌اند.



شکل ۹-۵ (الف) تقارن انتقالی انرژی E(k) در فضای k برای یک شبکه ی مربعی. (ب) نگاشت منطقه ی دوم در داخل منطقه ی اول (ج) تقارن دورانی E(k) در فضای k برای یک شبکه ی مربعی. (د) پربندهای انـرژی در اولین منطقه.

شکل (۹-۵ب) نشان می‌دهد که چگونه می‌توان با استفاده از این تقارن انتقالی، قطعات مختلف منطقه دوم را توسط بردارهای شبکه ی وارون دقیقاً به منطقه ی اول انتقال داد. هردو سطحی که با پیکان به هم مرتبط شده‌اند معادل اند. اولین و دومین منطقه معادل اند. همین طور مناطق مرتبه های بالاتر را می‌توان به طور مناسب به منطقه ی اول انتقال داد. از آن جا که منطقه ی اول بریلیون حاوی کلیه اطلاعات لازم است، می توانیم توجه خود را فقط معطوف و محدود به منطقه‌ی اول نماییم.

خاصیت وارونی (ii) نشان می دهد که نوار نسبت به وارونی حول مبدأ $k = 0$ متقارن است. بنابراین در شکل (۹-۵الف) انرژی در نقطه ی P'_1 مساوی انرژی در نقطه P_1 است.

خاصیت (ii) بیان می کند که نوار همان تقارن شبکه‌ی مستقیم را دارد. مثلاً در یک شبکه‌ی مربعی انرژی نیز باید تقارن دورانی مربع را داشته باشد. از آن جا که این شبکه نسبت به دوران $\pi/2$ (و مضاربی از آن) متقارن است، نتیجه می‌شود که در شکل (۹-۵ ج) انرژی ها در نقاط Q_1 و Q_2 و Q_3 مساوی انرژی در نقطه ی P_1 زیرا این نقاط را توسط تقارن های دورانی می توان از P_1 به دست آورد [توجه کنید که Q_2 مشابه P_1 در شکل (۹-۵ الف) است؛ این برای یک شبکه‌ی مربعی است ولی برای شبکه های دیگر برقرار نیست].

در شکل (۹-۵د) پربندهای انرژی یک نوار در منطقه ی اول بریلیون برای یک شبکه‌ی مربعی رسم شده است. این شکل خواص تقارنی مختلفی را که در بالا توصیف شد برآورده می کند.

خواص تقارنی بسیار مهم هستند زیرا می توان از آن ها برای تسهیل در تعیین نوارهای انرژی استفاده کرد . مثلاً، با وجود تقارن وارونی فقط لازم است نوار انرژی را در نیمی از منطقه بدانیم و تقارن دورانی معمولاً این امکان را فراهم می کند که کاهش منطقه حتی بیشتر هم گردد. مثلاً در مورد یک شبکه ی مربعی فقط لازم است یک هشتم منطقه مشخص گردد و باقی مانده را می توان با استفاده از خواص تقارنی کامل کرد.

توجه کنید خواص تقارنی که در بالا بحث شد مربوط به یک نوار است . این خواص برای هر نواری برقرار است ولی یک نوار را به نوار دیگر مربوط نمی کند.