الفصل الثامن:

نظرية الانطقة (الحزم) و التوصيل الفائق (المفرط)

تخبرنا ميكانيكا الكم، أنه توجد مدارات (اغلفة) تكون فيها كثافة الاحتمال مسموحة للالكترون. حيث تم تعريف هذه الأغلفة بواسطة مجموعة من الأعداد الكمية تدل على متغيرات الحركة الإلكترونية ومنها:

١- العدد الكمي الأساسي، (principal quantum number, **n**)، والذي يرتبط بطاقة الإلكترون أو حجم الغلاف. ويأخذ القيم n=1,2,3... ويرمز لها بالرموز K, L, M, N

٢- العدد الكمي المدارى (orbital quantum number, $\boldsymbol{\ell}$) ويرتبط بالعزم الزاوي للمدارات الفرعية الموجودة ضمن الغلاف الواحد ويأخذ القيم $\ell = 0,1,2 \ldots (n-2), (n-1)$, ويرمز إلى المدارات الفرعية بالرموز s, p, d, f

٣- العدد الكمي المغناطيسي، (magnetic quantum number, $\boldsymbol{m}$) ويحدد عدد حالات الطاقة (الإلكترونات) في المدار الفرعي و يأخذ القيم $-\boldsymbol{\ell}, \ldots -2, -1, 0, 1, 2 \ldots \boldsymbol{\ell}$.

٤- العدد الكمي المغزلي (spin quantum number, $\boldsymbol{s}$) و ينشأ من العزم المغزلي الذاتي للإلكترون و يأخذ القيم $\left(\pm\frac{1}{2}\right)$ بناء على اتجاه الدوران.

وهكذا نجد أن هذين العددين ($\boldsymbol{s}$, $\boldsymbol{m}$) يصفان حالات طاقة الإلكترون الموجود خلال المدارات الفرعية.

تنشأ هذه الأعداد الكمية الأربعة من حل معادلة شرودنجر (Schrödinger) و مبدأ باولى (Pauli) لاستبعاد وجود أكثر من إلكترون له نفس الأعداد الكمية الأربعة فى نفس الوقت.

تسمى الإلكترونات التي تحتل المدارات الخارجية بإلكترونات التكافؤ (valence electrons) وتكون هذه الإلكترونات هي المسئولة عن الربط بين الذرات لتكوين جزيئات أو بلورات.

تستخدم الأعداد والرموز السابقة لوصف حالات (مستويات) الطاقة الإلكترونية فى الذرة حيث يدل كل رمز على حالة طاقة معينة.

حالات الطاقة في المدارات الإلكترونية

العدد الكمي الرئيسي، n	رمز المدار	قيم l	اسم المدار الفرعي	عدد المدارات الفرعية	عدد الإلكترونات في المدار	
					الفرعي	الرئيسي
1	K	0	s	1	2	2
2	L	0 1	s p	1 3	2 6	8
3	M	0 1 2	S p d	1 3 5	2 6 10	18
4	N	0 1 2 3	s p d f	1 3 5 7	2 6 10 14	32

رأينا في الفصل السابق مدى النجاح الذي حققه نموذج الالكترون الحر فى تفسير العديد من الخصائص الطبيعية للمواد الصلبة مثل التوصيل الكهربائي والتوصيل الحراري وبعض الخصائص الاخرى وبالرغم من ذلك لم يتمكن هذا النموذج من تفسير الفروق فى الخصائص الكهربائية بين المعادن والمواد العازلة وأشباه الموصلات. بالاضافة إلى هذا لم يتمكن نموذج الالكترون الحر من تفسير ظهور قيم موجبة لمعامل هال وكذلك العلاقة بين الكترونات التوصيل في الفلز والكترونات التكافؤ في الذرات الحرة .

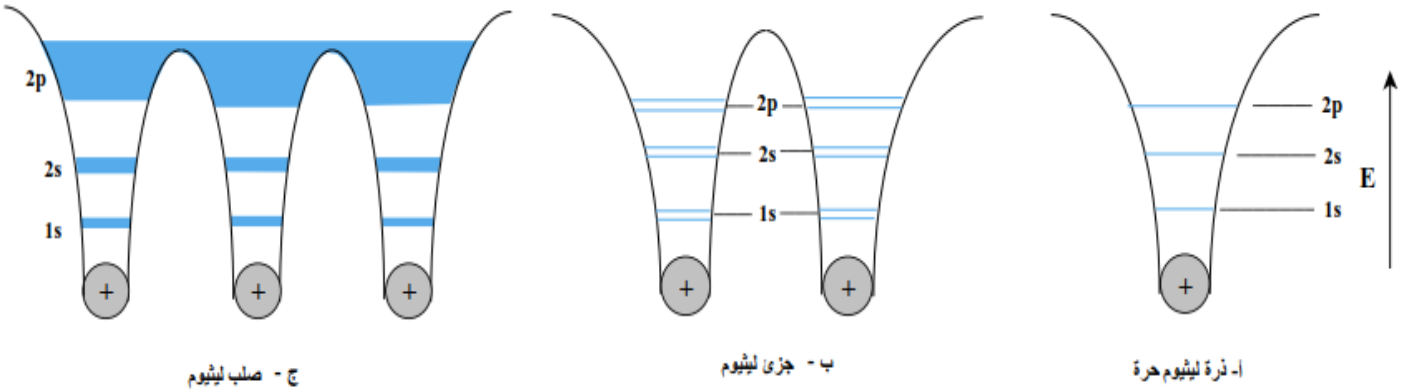
فى الفصل السابق، تكلمنا عن حركة الالكترون فى الصلب مستخدمين نموذج الالكترون الحر والذي يعتبر نموذج مبسط جدا نظرا لاهمال جهد البلورة. ولكن لا يمكن غض النظر عن هذا الجهد عند شرح النتائج العملية بطريقة كمية أو عند الحديث عن بعض الخصائص الالكترونية للصلب. لذلك باتت الحاجة ملحة إلى نموذج جديد أو نظرية جديدة تأخذ تأثير جهد البلورة فى الاعتبار فكانت نظرية حزم الطاقة للمواد الصلبة.

١- منشأ حزم الطاقة

لفهم منشأ حزم الطاقة فى المواد الصلبة نجد أنه من المفيد أن نستعرض طيف الطاقة لالكترون فى الذرة الحرة وسنرى كيف أن هذا الطيف يتعدل بالتدريج عند اضافة الذرات بعضها إلى بعض لتكوين جسم صلب. لبيان ذلك، سنعتبر الليثيوم كمثالا محددا.

فى ذرة الليثيوم الحرة يدور الالكترون فى بئر جهد، كما هو مبين بالشكل ادناه عند حل معادلة شرودينجر نحصل على سلسلة من مستويات الطاقة المتفردة يرمز لها بالرموز $1s^2 2s^1$ 2p حيث تحتوي ذرة الليثيوم على ٣ الكترونات.

نعتبر حالة ذرتي ليثيوم يكونان جزيئة ليثيوم، Li_2 وفى هذه الحالة فإن الجهد الذي يرى بواسطة الالكترون يكون عبارة عن بئر جهد مزدوج، كما يبين الشكل ب. حيث أن كل مستوى ذرى من المستويات $1s^2, 2s^1$ قد إنشق إلى مستويين متقاربين. والان يمكننا الحديث عن مستويات الطاقة $1s^2\ 2s^1$ 2p فى الجزيئة بنفس الطريقة ولكن آخذين فى الاعتبار أن كل مستوى من هذه المستويات يتكون من مستويين فرعيين.



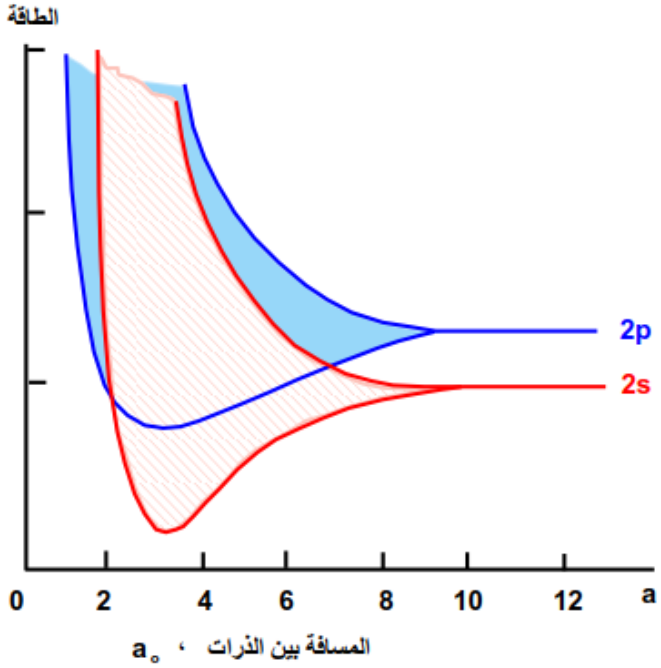
مخطط يبين تحول شكل طيف الطاقة من ذرة الليثيوم إلى جزيئة ثم إلى حالة معدنية (مادة صلبة)

يعتمد مقدار الانشقاق على مسافة التفاعل بين نويات الذارت فى الجزيئة، حيث يكون الانشقاق أكبر كلما اقتربت المسافة بين النويات والعكس صحيح. كما يعتمد الانشقاق على نوع المدار الذري 2p 2s 1s حيث يكون الانشقاق فى المستوى 2p أكبر منه فى حالة المستوى 2s والذي بدوره يكون اكبر منه فى حالة المستوى 1s. و بالتالى يمكن النظر إلى الليثيوم الصلب كما لو كان جزيئ ليثيوم ضخم يحتوي على عدد كبير جدا من الذارت.

ولمعرفة شكل طيف الطاقة فى الحالة الصلبة نتخيل أن كل مستوى طاقة فى الذرة انشق إلى عدد N من المدارات الفرعية المتقاربة، حيث N هو عدد الذرات فى الصلب. فإن المستويات الفرعية المنبثقة تكون

متناهية القرب من بعضها البعض وتكّون حزمة من الطاقة (شريط أو نطاق طاقة energy band). و أن طيف الطاقة فى الحالة الصلبة يتكون من مجموعة من حزم الطاقة يفصل فيما بينها ما يسمى بفجوات طاقة energy gaps. فجوات الطاقة هذه هى مناطق (حزم) طاقة ممنوعة، أى لا يمكن أن تشغل بالالكترونات، تماما مثل المناطق التى تفصل بين مستويات الطاقة المتفردة فى الذرة الحرة والتى تعتبر مناطق محرمة على الالكترونات.

يعتبر أتساع مستويات الطاقة المنفردة (نتيجة الانشقاق) لتكوين حزم الطاقة من اهم الخصائص الاساسية للجسم الصلب. ويمكن القول أن حزمة الطاقة الاعلى تكون أكبر اتساعا وذلك بسبب أن مستوى الطاقة الاعلى (الذي كوّن هذه الحزمة) يكون ذو نصف قطر أكبر وبالتالى يتأثر بقوة جذب اصغر، وعلى النقيض، فإن مستويات الطاقة السفلى المقابلة لمدارات تكون مرتبطة بقوة كبيرة جدا نتيجة صغر نصف قطر المدار. يبين الشكل التالي حزم الطاقة 2s و 2p لفلز الليثيوم مرسومة كدالة لثابت الشبيكة a. نلاحظ من الرسم أن اتساع الحزمة يزداد مع تناقص a.



مخطط حزم الطاقة فى بلورة الليثيوم.