٤ـ عدد الحالات فى حزمة الطاقة NUMBER OF STATES IN THE BAND

لحساب عدد الحالات فى حزمة الطاقة سوف نعتبر حالة البعد الواحد بغرض التبسيط. فى هذه الحالة تكون دالة بلوخ على الصورة، $\psi_k(x) = e^{ikx}\, u_k(x)$.

وإذا إفترضنا أن هذه الدالة تحقق شرط الحدود الدورية فإن ذلك يؤدى إلى أن القيم المسموحة لـ k تكون على الصورة، $k = n\dfrac{2\pi}{L}$,

حيث $n = 0, \pm 1, \pm 2, ...$ الخ. لاحظ أن $u_k(x)$ دالة دورية بذاتها، ولهذا فإن الشرط $u_k(x+L) = u_k(x)$ يتحقق بشكل تلقائى. وكما درسنا آنفاً، فإن القيم المسموحة لـ k تكون شبكة منتظمة لها مسافة بينية مقدارها $2\pi/L$. يمكن الحصول على عدد الحالات داخل المنطقة الاولى التى لها طول $2\pi/a$ على الصورة، $\left(\dfrac{2\pi}{a}\right)\Big/\left(\dfrac{2\pi}{L}\right) = \dfrac{L}{a} = N$,

حيث N هو عدد خلايا الوحدة وهذا يتفق مع التأكيد السابق. وهذا يبين أن كل حزمة تحتوى على N من المستويات فى المنطقة الأولى. وحيث أنه طبقا لمبدأ باولى للاستبعاد أن كل مستوى يملئ بعدد إثنين من الالكترونات متعاكسين فى اللف فإن أقصى عدد يمكن أن يشغل الحزمة الواحدة هو 2N من الالكترونات.

٥ – الكتلة الفعالة Effective mass:

عندما يتعرض الالكترون داخل البلورة الى قوة خارجية نتيجة تسليط مجال كهربائي، فأن هذه القوة ستمثل معدل التغير في زخم البلورة $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ وان الالكترون يتحرك بتعجيل مقداره يعطى بما يلي:

$$a_i = \frac{dv_i}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i \partial k_j}F_j \quad .... (1)$$

و بمقارنة العلاقة اعلاه بقانون نيوتن الثاني: $\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{1}{m}\vec{F}$ ، حيث من الواضح من العلاقتين انه لا يمكن تطبيق معادلة قانون نيوتن بشكلها الحالي، لان الالكترون داخل البلورة يعاني من تاثيرات قوى اخرى اضافة الى القوة الناتجة بسبب المجال الكهربائي. لذا، يجب استخدام مفهوم اخر وهو ان تكون كتلة الالكترون متغيرة و يرمز لها بالرمز m^*، ومعادلة قانون نيوتن تصبح بالشكل: $\vec{a} = \frac{1}{m^*}\vec{F}$ بحيث عند مقارنتها مع بالعلاقة (1) اعلاه نجد ان:

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2}\,\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i \partial k_j} \;\ldots\ldots \quad (2)$$

حيث نلاحظ ان الكتلة العددية الثابتة القيمة قد استبدلت بالكتلة الفعالة m^*. وانه لغاية في الاهمية استخدام مفهوم الكتلة الفعالة لمعرفة مسار الالكترون خلال حزمة الطاقة في بلورة نقية جدا.

كذلك، لكي نفهم سبب مرور التيار في البلورة على اساس تكون الحزم فلابد من الاشارة الى ما يلي:

١-اذا كانت الحزمة مملوءة جزئيا فان الالكترونات تنزاح باتجاه المجال المسلط، وبذلك تكون الكتلة الفعلية موجبة و عدد الالكترونات التي تتحرك باتجاه المجال اكثر من عدد الالكترونات المتحركة بعكس اتجاه المجال، لذلك يتولد التيار في البلورة.

٢-عندما تكون الحزمة مملوءة كليا، فان الالكترونات لا تنزاح و عليه فلا يتولد تيار (التيار يساوي صفر)، اي ان متجه الموجة $(\vec{k} = 0)$.

٦-مفهوم الفجوات الموجبة:

عندما تكون حزمة الطاقة مملوءة كليا ماعدا الحالة الالكترونية التي تمتلك متجه موجة $\vec{k} \neq 0$، فيمكن القول انه توجد فجوة hole عند تلك الحالة ومتجه موجتها يساوي $\overrightarrow{k'}$. وان هذه الفجوة تتحرك في المجال بكتلة فعالة معاكسة للكتلة الفعالة للالكترون، اي ان: $m_h^*(\vec{k}) = -m_e^*(\vec{k})$

ان الفجوات تتولد عند الحافات العليا لحزمة الطاقة حيث تكون الكتلة الفعالة للالكترونات ذات اشارة سالبة، وعندها فان كتلة الفجوات تكون موجبة.

٧- كثافة الحالات في ثلاثة ابعاد:

لإيجاد كثافة الحالات في ثلاثة ابعاد نفرض ان لدينا بلورة مكعبة طول ضلعها يساوي L. ونفرض أن توزيع أنماط الاهتزاز المسموحة في الفضاء متجه k مشابهة لتوزيع انماط الاهتزاز في سلسلة الخطية احادية الذرات طولها L على طول المحاور الديكارتية للفضاء k أي (k_x, k_y, k_z). ان هذا يعني تطبيق الشروط الحدودية الدورية على N^3 من الذرات داخل المكعب وبذلك فأن متجه الموجة k في الفضاء يمتلك المركبات k_x, k_y, k_z. فلإيجاد كثافة الحالات يجب أن نعبر عن الحركة الموجية في الابعاد الثلاثة على هذا النحو:

$$U(x,y,z) = U_0 e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \qquad \text{eq. 1}$$

$$U(x+L, y+L, z+L) = U_0 e^{i(k_x(x+L) + k_y(y+L) + k_z(z+L))}$$

$$U(x+L, y+L, z+L) = U_0 e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}\, e^{i(k_x L + k_y L + k_z L)} \qquad \text{eq. 2}$$

باستخدام الشروط الحدودية الدورية وبالاستعانة بـ: eq. 1 و eq.2

$$U(x+L, y+L, z+L) = U(x,y,z)$$

$$U_0 e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}\, e^{i(k_x L + k_y L + k_z L)} = U_0 e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$$

وبعد اجراء الاختصارات نحصل على:

$$e^{i(k_x L + k_y L + k_z L)} = 1$$

أي ان:

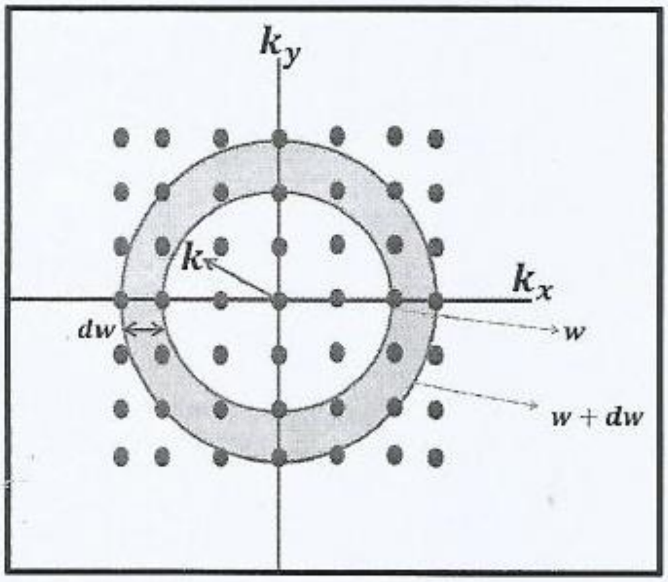
$$k_x = \frac{2\pi n}{L}$$

$$k_y = \frac{2\pi m}{L}$$

$$k_z = \frac{2\pi l}{L}$$

حيث ان n و m و l ثلاثة اعداد صحيحة وان المسافة بين كل نقطتين متجاورتين تساوي $\frac{2\pi}{L}$.

فاذا رسمنا القيم المسموحة بها لـ k_x و k_y و k_z في الفضاء k فسوف يشكلان شبيكة ذات ثلاثة ابعاد وكما مبين في الشكل ادناه. ان كل نقطة في الشبيكة تمثل نمطاً اهتزازياً واحداً. ان الهدف الاساس الان هو ايجاد عدد الانماط في داخل كرة نصف قطرها يساوي k. ان حجم هذه الكرة



القيم المسموحة لـk للموجة تنتقل في ثلاثة ابعاد. القشرة الدائرية المضللة تستخدم لحساب عدد الانماط

يساوي $\frac{4}{3}\pi k^3$. وبما ان كل نقطة في الشبيكة تشغل حجماً مقداره $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ فعليه يكون عدد الانماط الكلية داخل هذه الكرة هو :

$$N_{Tmodes} = \frac{\frac{4}{3}\pi k^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{4}{3}\pi k^3 \frac{V}{(2\pi)^3} \qquad \text{eq. 3}$$

حيث انه $L^3 = V$ يساوي حجم البلورة.

ان eq. 3 تعطي عدد جميع الموجات المسموح لها والتي قيمة المتجه اقل من القيمة المعينة والتي تنتقل في جميع الاتجاهات وبأخذ المشتقة لـ eq. 3 بالنسبة الى k نحصل على:

$$dN_{TM} = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk \qquad \text{eq. 4}$$

وبذلك فهي تعطي عدد الانماط في القشرة الكروية المحصورة بين k و $k + dk$ وكما موضح بالشكل اعلاه.

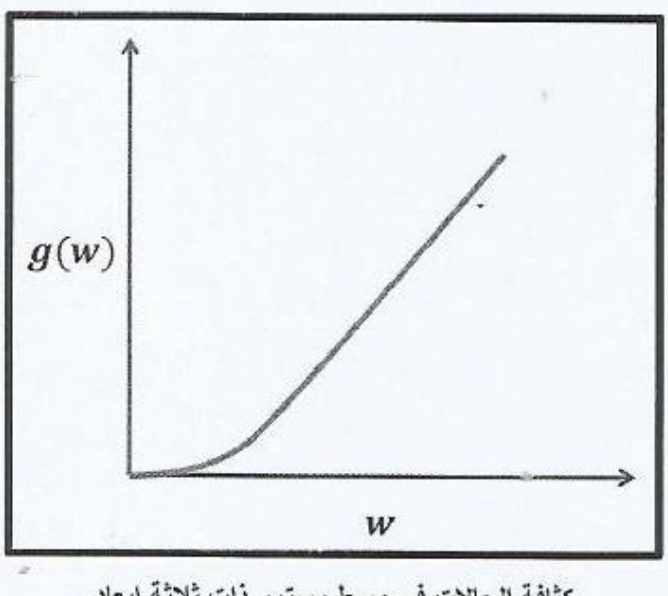
ولقد سبق أن عرفنا كثافة الحالات بـ $g(w)dw$ والتي تمثل عدد الانماط الواقعة بين w و $w + dw$ وهذا العدد يمكن أن نحصل عليه بتحويل المتغير k الى w والذي يمكن ان يتم باستخدام علاقة $w = v_{ph}k$ وعليه تصبح eq. 4 بالصيغة التالية:

$$g(w)dw = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{w}{v_{ph}}\right)^2 \frac{dw}{v_{ph}} \qquad \text{eq. 5}$$

وعليه فأن عدد الانماط $g(w)$ هي

$$g(w) = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{w^2}{{v_{ph}}^3} \qquad \text{eq. 6}$$

وسنستخدم هذه المعادلة في النموذج ديباي للحرارة النوعية. من خلال eq. 6 نرى $g(w)$ تزداد مع w^2 (الشكل ادناه)خلافاً للحالة $g(w)$ في بعد واحد حيث تكون فيها $g(w)$ كمية ثابتة.



كثافة الحالات في وسط مستمر ذات ثلاثة ابعاد

٨- كثافة الحالات للشبيكة: Density of States for Lattice

تعرف كثافة الحالات $g(w)$ بأن $g(w)dw$ تمثل عدد الانماط في مدى التردد w و $w+dw$ وهذه الدالة تلعب دوراً مهماً في بعض الظواهر الفيزيائية المتعلقة باهتزازات الشبيكة وعلى الخص الحرارة النوعية. في هذا البند سنناقش الدالة المناسبة للشبيكة الحقيقة ومن الممكن استخدام هذه النتيجة للحصول على النتيجة الدقيقة للحرارة النوعية. لقد تم اشتقاق معادلة كثافة الحالات $g(w)$

والمتمثلة بالعلاقة التالية:

$$g(w) = \frac{2L}{\pi a w_m \left|\cos\frac{ka}{2}\right|}$$

ويمكن كتابة المعادلة اعلاه بالشكل التالي:

$$g(w) = \frac{2L}{\pi a w_m \left|\sqrt{1-\sin^2\frac{ka}{2}}\right|}$$

$$g(w) = \frac{2L}{\pi a w_m \left|\sqrt{1-\frac{w^2}{w_m^2}}\right|} = \frac{2L}{\pi a \left|\sqrt{w_m^2 - w^2}\right|}$$

حيث ان $g(w)$ عند $w=0$ ثم تزداد بزيادة w حتى تصل الى اللانهاية عند $w = w_m$ وعندما تكون $w > w_m$ فأن $g(w)$ تتلاشى لان هذه القيمة خارج منطقة برليون.