

دانشگاه شاهرود
پایه

فیزیک حالت جامد ۲

(رشته فیزیک)

دکتر امیرعباس صبوری دودران

امروزه کتاب‌خوانی و علم‌آموزی، نه تنها یک وظیفه‌ی ملی، که یک واجب دینی است.

مقام معظم رهبری

در عصر حاضر یکی از شاخصه‌های ارزیابی رشد، توسعه و پیشرفت فرهنگی هر کشوری میزان تولید کتاب، مطالعه و کتاب‌خوانی مردم آن مرز و بوم است. ایران اسلامی نیز از دیرباز تاکنون با داشتن تمدنی چندهزارساله و مراکز متعدد علمی، فرهنگی، کتابخانه‌های معتبر، علما و دانشمندان بزرگ با آثار ارزشمند تاریخی، سرآمد دولت‌ها و ملت‌های دیگر بوده و در عرصه‌ی فرهنگ و تمدن جهانی به‌سان خورشیدی تابناک همچنان می‌درخشد و با فرزندان نیک‌نهاد خویش هنرنمایی می‌کند. چه کسی است که در دنیا با دانشمندان فرزانه و نام‌آور ایرانی همچون ابوعلی سینا، ابوریحان بیرونی، فارابی، خوارزمی و ... همچنین شاعران برجسته‌ای نظیر فردوسی، سعدی، مولوی، حافظ و ... آشنا نباشد و در مقابل عظمت آنها سر تعظیم فرود نیاورد. تمامی این افتخارات ارزشمند، برگرفته از میزان عشق و علاقه فراوان ملت ما به فراگیری علم و دانش از طریق خواندن و مطالعه منابع و کتاب‌های گوناگون است. به شکرانه‌ی الهی، تاریخ و گذشته ما، همیشه درخشان و پر بار است. ولی اکنون در این زمینه در چه جایگاهی قرار داریم؟ آمار و ارقام ارائه‌شده از سوی مجامع و سازمان‌های فرهنگی در مورد سرانه‌ی مطالعه‌ی هر ایرانی، برایمان چندان امیدوارکننده نمی‌باشد و رهبر معظم انقلاب اسلامی نیز از این وضعیت بارها اظهار گله و ناخشنودی نموده‌اند.

کتاب، دروازه‌ای به سوی گستره‌ی دانش و معرفت است و کتاب خوب، یکی از بهترین ابزارهای کمال بشری است. همه‌ی دستاوردهای بشر در سراسر عمر جهان، تا آنجا که قابل کتابت بوده است، در میان دست‌نوشته‌هایی است که انسان‌ها پدید آورده و می‌آورند. در این مجموعه‌ی بی‌نظیر، تعالیم الهی، درس‌های پیامبران به بشر، و همچنین علوم مختلفی است که سعادت بشر بدون آگاهی از آنها امکان‌پذیر نیست. کسی که با دنیای زیبا و زندگی‌بخش کتاب ارتباط ندارد بی‌شک از مهم‌ترین دستاورد انسانی و نیز از بیشترین معارف الهی و بشری محروم است. با این دیدگاه، به‌روشنی می‌توان ارزش و مفهوم رمزی عمیق در این حقیقت تاریخی را دریافت که اولین خطاب خداوند متعال به پیامبر گرامی اسلام (ص) این است که «بخوان!» و در اولین

سوره‌ای که بر آن فرستاده‌ی عظیم‌الشان خداوند، فرود آمده، نام «قلم» به تجلیل یاد شده‌است: «إِقْرَأْ وَ رَبُّكَ الْأَكْرَمُ. الَّذِي عَلَّمَ بِالْقَلَمِ» در اهمیت عنصر کتاب برای تکامل جامعه‌ی انسانی، همین بس که تمامی ادیان آسمانی و رجال بزرگ تاریخ بشری، از طریق کتاب جاودانه مانده‌اند.

دانشگاه پیام‌نور با گستره‌ی جغرافیایی ایران‌شمول خود با هدف آموزش برای همه، همه‌جا و همه‌وقت، به‌عنوان دانشگاهی کتاب‌محور در نظام آموزش عالی کشورمان، افتخار دارد جایگاه اندیشه‌سازی و خردورزی بخش عظیمی از جوانان جویای علم این مرز و بوم باشد. تلاش فراوانی در ایام طولانی فعالیت این دانشگاه انجام پذیرفته تا با بهره‌گیری از تجربه‌های گرانقدر استادان و صاحب‌نظران برجسته کشورمان، کتاب‌ها و منابع آموزشی درسی شاخص و خودآموز تولید شود. در آینده هم، این مهم با هدف ارتقای سطح علمی، روزآمدی و توجه بیشتر به نیازهای مخاطبان دانشگاه پیام‌نور با جدیت ادامه خواهد داشت. به‌طور قطع استفاده از نظرات استادان، صاحب‌نظران و دانشجویان محترم، ما را در انجام این وظیفه‌ی مهم و خطیر یاری‌رسان خواهد بود. پیشاپیش از تمامی عزیزانی که با نقد، تصحیح و پیشنهادهای خود ما را در انجام این وظیفه‌ی خطیر یاری می‌رسانند، سپاسگزاری می‌نماییم. لازم است از تمامی اندیشمندانی که تاکنون دانشگاه پیام‌نور را منزلگاه اندیشه‌سازی خود دانسته و ما را در تولید کتاب و محتوای آموزشی درسی یاری نموده‌اند، صمیمانه قدردانی گردد. موفقیت و بهروزی تمامی دانشجویان و دانش‌پژوهان عزیز آرزوی همیشگی ما است.

دانشگاه پیام‌نور

فهرست مطالب

پیشگفتار	نه
فصل اول. ساختار الکترونی جامدات	۱
هدف کلی	۱
هدف‌های یادگیری	۱
مقدمه	۲
۱-۱ فلزات از منظر کلاسیکی	۲
۱-۱-۱ مدل درود	۴
۱-۱-۲ تقریب زمان واهلش	۶
۱-۱-۳ شکست‌های مدل درود	۱۰
۲-۱ فلزات از منظر کوانتومی	۱۴
۱-۲-۱ مدل الکترون آزاد	۱۵
۲-۲-۱ نوارهای انرژی در جامدات	۱۷
۳-۲-۱ الکترون در یک بلور ایده‌آل	۱۹
۴-۲-۱ شرط پراش الکترون‌های ظرفیت	۳۰
۵-۲-۱ برهم‌کنش الکترون با پتانسیل تناوبی ضعیف (مدل الکترون تقریباً آزاد)	۳۳
۳-۱ رویکرد دیگر در ساختار الکترونی جامدات برای الکترون‌های مغزی	۳۹
۱-۳-۱ مدل تنگ‌بست	۴۰
۲-۳-۱ جرم مؤثر حامل‌های بار	۵۱
۴-۱ سطح فرمی	۵۴
۱-۴-۱ اثر دوهااس - ون‌آلفن	۶۹
خلاصه فصل اول	۷۳
خودآزمایی چهارگزینه‌ای فصل اول	۷۴
خودآزمایی تشریحی فصل اول	۷۷

فصل دوم. نیم رساناها، نارساناها (دی الکتریک ها) و خواص نوری جامدات	۸۳
هدف کلی	۸۳
هدف های یادگیری	۸۳
مقدمه	۸۴
۱-۲ نیم رساناها	۸۴
۱-۱-۲ ساختار بلوری نیم رساناها	۸۴
۲-۱-۲ ساختار الکترونی نیم رسانا	۸۵
۳-۱-۲ محاسبه چگالی الکترون n و حفره p در نوارهای رسانش و ظرفیت	۹۳
۴-۱-۲ ناخالصی در نیم رسانا (نیم رساناهای غیرذاتی)	۹۸
۵-۱-۲ احتمال پرشدگی ترازهای ناخالصی های بخشنده و پذیرنده	۱۰۴
۶-۱-۲ پتانسیل شیمیایی نیم رساناهای غیرذاتی و اثرات دما بر آن	۱۰۶
۷-۱-۲ خواص ترابرد الکتریکی در نیم رساناها	۱۰۹
۸-۱-۲ حامل های اقلیت در نیم رساناها	۱۱۲
۹-۱-۲ اثر هال در نیم رسانا	۱۱۳
۲-۲ نارساناها (دی الکتریک ها)	۱۱۸
۱-۲-۲ خواص دی الکتریکی مواد	۱۱۸
۲-۲-۲ دی الکتریکی با اتم های قطبیده ذاتی و غیرذاتی در حضور میدان الکتریکی	۱۲۱
۳-۲-۲ محاسبه قطبش الکتریکی یک دی الکتریک	۱۲۳
۴-۲-۲ قطبش پذیری یونی یک دی الکتریک یونی در حضور میدان الکتریکی	۱۲۵
۵-۲-۲ فروالکتریک ها	۱۲۶
۳-۲ خواص نوری مواد	۱۲۷
۱-۳-۲ رفتار مواد در معرض نور مرئی	۱۲۷
۲-۳-۲ پدیده جذب از نقطه نظر ساختار نواری جامدات	۱۴۱
۴-۲ اکسیتون ها	۱۵۱
۱-۴-۲ اکسیتون های آزاد (اکسیتون وانیر)	۱۵۱
۲-۴-۲ اکسیتون فرنگل	۱۵۵
خلاصه فصل دوم	۱۶۴
خودآزمایی چهارگزینه ای فصل دوم	۱۶۴
خودآزمایی تشریحی فصل دوم	۱۶۹

فصل سوم. خواص مغناطیسی جامدات	۱۷۳
هدف کلی	۱۷۳
هدف های یادگیری	۱۷۳
۱-۳ خواص مغناطیسی گاز الکترونی بدون برهم کنش در حضور میدان B	۱۷۶
۱-۱-۳ گشتاور مغناطیسی	۱۷۶
۲-۱-۳ مغناطش الکترون های سرگردان در فلز	۱۷۸
۲-۳ اثرات میدان مغناطیسی بر الکترون های شبه مغزی مواد	۱۹۵
۱-۲-۳ رفتار پارامغناطیسی الکترون های شبه مغزی در حضور میدان B	۱۹۶

۲۱۳	۲-۲-۳ قانون هوند
۲۱۷	۳-۳ مغناطش یک سیستم با برهم کنش
۲۱۷	۱-۳-۳ نظریه هایزنبرگ
۲۱۷	۱-۳-۳ برهم کنش گشتاور دوقطبی های مغناطیسی
۲۱۹	۲-۳-۳ انرژی تبادل
۲۲۶	۳-۳-۳ فرومغناطیس
۲۳۰	۴-۳-۳ پادفرومغناطیس
۲۳۱	۵-۳-۳ محاسبه مدل میدان متوسط وایس برای یک پادفرومغناطیس
۲۳۴	۶-۳-۳ فری مغناطیس
۲۳۵	۷-۳-۳ امواج اسپینی فرومغناطیسی
۲۴۰	۸-۳-۳ امواج اسپینی پادفرومغناطیسی
۲۴۲	۹-۳-۳ جامدهای پارامغناطیسی
۲۵۲	خلاصه فصل سوم
۲۵۲	خودآزمایی چهارگزینه ای فصل سوم
۲۵۶	خودآزمایی تشریحی فصل سوم
۲۶۱	فصل چهارم. خواص آبرسانایی
۲۶۱	هدف کلی
۲۶۱	هدف های یادگیری
۲۶۲	مقدمه
۲۶۲	۱-۴ فلزات بهنجار و آبرساناها
۲۶۶	۲-۴ شدت میدان مغناطیسی بحرانی - اثر مایسنر
۲۶۸	۳-۴ آبرسانای نوع اول و دوم
۲۷۰	۴-۴ معادلات لندن
۲۷۸	۵-۴ تله افتادن شار مغناطیسی در داخل یک آبرسانای حفره دار
۲۷۸	۱-۵-۴ شار کوانتیزه در داخل یک حلقه آبرسانا
۲۸۰	۶-۴ مدل BCS
۲۸۲	۱-۶-۴ اثرات جرم ایزوتوپی در آبرساناها
۲۸۴	۲-۶-۴ تونل زنی آبرساناها
۲۸۴	۳-۶-۴ رفتار ظرفیت گرمایی در آبرسانا
۲۸۷	خلاصه فصل چهارم
۲۸۸	خودآزمایی چهارگزینه ای فصل چهارم
۲۹۰	خودآزمایی تشریحی فصل چهارم
۲۹۱	پاسخنامه خودآزمایی های چهارگزینه ای فصل ها
۲۹۳	جداول
۲۹۵	منابع

پیشگفتار

در رابطه با فیزیک حالت جامد به دلیل گستردگی و نیز ارتباط مستقیم آن با ریاضیات پیشرفته، الکترومغناطیس، اپتیک، بلورشناسی، شیمی و... به سختی می‌توان کتابی در حجم کم نوشته شود که اولاً مطالب ساده بیان شود، ثانیاً پیوستگی مطالب در آن رعایت شود. از این رو در نگارش این کتاب بسیار تلاش نمودم تا خودخوان بودن این کتاب تأمین شود ولی این کتاب به دلایل گفته شده دارای کم‌وکاستی‌هایی است که از استادان محترم و دانشجویان عزیز تقاضا دارم با خواندن آن هرگونه انتقاد و یا اشکالاتی چه محتوایی و چه نگارشی را به آدرس ایمیل داده شده، ارسال کرده تا در ویرایش‌های بعدی، برطرف شود. لازم به ذکر است با توجه به اینکه این درس یکی از دروس اختیاری در مقطع کارشناسی است، در هنگام نگارش کتاب فرض شده است دانشجویان، با دروس ریاضی فیزیک ۱ و ۲، مکانیک کوانتومی ۱ و ۲، الکترومغناطیس ۱ و ۲، ترمودینامیک و مکانیک آماری آشنا هستند.

در مقطع کارشناسی رشته فیزیک، دانشجویان گرایش فیزیک حالت جامد، درس تخصصی سه واحدی با عنوان فیزیک حالت جامد ۱ را می‌گذرانند. در کتاب فیزیک حالت جامد ۱ ما با موضوعاتی مانند: بلور، متشکل از اتم‌ها در یک شبکه با یک آرایش منظم، ساختارهای مختلف بلور، انواع پیوندهای اتمی، ارتعاشات شبکه‌ای، خواص گرمایی جامدات، نظریه الکترون‌های آزاد و اثرات پتانسیل یون‌های شبکه بر ساختار الکترونی جامدات آشنا شدیم.

در نگارش کتاب حالت جامد ۲ سعی شده است اولاً پیوستگی لازم را با کتاب حالت جامد ۱ داشته باشد و ثانیاً در جهت معرفی دیگر خواص فیزیکی جامدات گام

بردارد. شناخت هر چه بهتر ساختار الکترونی جامدات، این توانمندی را در اختیار ما می‌گذارد که بتوانیم ویژگی‌های دیگر جامدات مانند: خواص اپتیکی، خواص مغناطیسی، خواص آبرسانایی.... را توصیف کنیم. علاوه بر فلزات، آشنایی با دیگر مواد مانند نیم‌رساناهای ذاتی و غیرذاتی، دی‌الکتریک‌ها و آبرساناها از تلاش‌های دیگر این کتاب است. این کتاب از چهار فصل تشکیل شده است. فصل اول، در ادامه رویکرد نواری جامدات از کتاب حالت جامد ۱، به ساختار الکترونی جامدات می‌پردازد. این فصل به معرفی ساده‌ترین مدل برای الکترون‌های رسانش فلزات (مدل الکترون تقریباً آزاد) و روش تنگ‌بست برای الکترون‌های مقید به هسته اتم‌های شبکه بلوری پرداخته است. فصل دوم، به ساختار الکترونی نیم‌رساناها به عنوان کاربردی‌ترین مواد در صنعت الکترونیک، توجه شده است. با توجه به اندازه گاف انرژی بین نوار ظرفیت و رسانش این دسته از مواد (از مرتبه تقریباً $2\text{eV} - 0.5\text{eV}$) نه فقط دارای خواص جذبی و عبوری نور مرئی است بلکه در دماهای پایین رفتاری عایق‌گونه و در دماهای بالا رفتاری فلزگونه از خود نشان می‌دهند. دسته‌ی دیگر از مواد، نارساناها (عایق‌ها) هستند، با گاف انرژی نسبتاً بزرگی که برای یک بلور ایده‌آل از آن، جذب نور مرئی نخواهیم داشت و در مقابل عبور نور مرئی کاملاً شفاف هستند (مانند الماس). در فصل سوم با در نظر گرفتن خواص الکترونی جامدات و به‌کارگیری روش ساختار نواری مواد (فصل‌های ۱ و ۲) به خواص مغناطیسی برخی از مواد می‌پردازد که منجر به دسته‌بندی آن‌ها از لحاظ مغناطیسی (فرومغناطیس، فری‌مغناطیس و پادفرومغناطیسی) می‌شود. این دسته از مواد در حضور میدان مغناطیسی رفتارهای پارامغناطیسی یا دیامغناطیسی از خود نشان می‌دهند. با برانگیختگی مغناطیسی این دسته از مواد می‌توان امواج اسپینی (مگنون) ایجاد کرد. از دیگر خواص جالب برخی از مواد، خواص آبرسانایی است که موضوع فصل ۴ این کتاب است. در صورت دستیابی به خواص آبرسانایی در محدوده دمای اتاق که از آرزوهای بشر امروزی است، می‌توان انقلاب بزرگی در صنعت پدید آورد.

در داخل هر فصل به نکات مهمی به‌طور مشخص و مجزا اشاره شده و برخی دیگر از آن‌ها در پاورقی و پیوست‌ها جهت تکمیل مطالب، آورده شده است که به خوانندگان محترم توصیه می‌شود به آن‌ها توجه نمایند.

لازم است از جناب آقای دکتر علیرضا صفارزاده که با وسعت نظر و نکته‌سنجی ارزشمندشان من را مرهون لطف خود قرار دادند و از رهنمودهای ایشان به کرات در کتاب

استفاده کرده‌ام و و نیز از کلیه همکاران محترم تدوین مخصوصاً مدیریت محترم تدوین جناب آقای دکتر مهران فرج‌اللهی و معاون محترم تدوین جناب آقای حمیدرضا فرنیا و کارشناسان محترم تدوین سرکار خانم آزیتا ابراهیم‌نیا و سرکار خانم فاطمه بنی‌جمالی به خاطر زحمات بی‌دریغشان در راستای چاپ این کتاب، کمال سپاسگزاری و امتنان را دارم. این کتاب را به همسر و فرزندانم به خاطر صبوری‌شان در طی نگارش این کتاب تقدیم می‌دارم.

امیرعباس صبوری‌دودران^۱

پاییز ۹۶

1. sabouri@pnu.ac.ir

فصل اول

ساختار الکترونی جامدات

هدف کلی

از ساده‌ترین ویژگی‌های مواد که به‌سادگی قابل آزمایش هستند، می‌توان به رسانندگی الکتریکی و حرارتی اشاره کرد. در کتاب فیزیک حالت جامد ۱ برای آشنایی با ساختار الکترونی فلزات از ساده‌ترین مدل (مدل الکترون آزاد) آغاز می‌شود و سپس به معرفی نظریه نواری، می‌پردازد. از هدف‌های مهم این کتاب استفاده از این نظریه برای توصیف ساختار الکترونی جامدات (فلزات، نیم‌رساناها، دی‌الکتریک‌ها و...) همراه با خواص فیزیکی‌شان (خواص نوری، مغناطیسی و ترابرد...) است. بنابراین فراگیری هر چه عمیق‌تر این نظریه، ما را در شناخت بهتر جامدات یاری می‌سازد.

هدف‌های یادگیری

دانشجو پس از مطالعه این فصل باید،

۱. با ساختار الکترونی فلزات ساده و مدل‌های ساده برای توصیف خواص الکترونی آن‌ها مانند مدل درود، تقریب الکترون آزاد (گاز الکترونی بدون برهم‌کنش)، موفقیت‌ها و شکست‌های این مدل‌ها آشنا شود.
۲. با نظریه نواری جامدات و تابع موج بلوخ به‌عنوان تابع موج الکترون در بلور در حضور یک پتانسیل تناوبی آشنا شود.
۳. با روش الکترون تقریباً آزاد با نوار رسانش فلزات آشنا شود.
۴. با روش تنگ‌بست برای توصیف نوار انرژی الکترون‌های ظرفیت آشنا شود.
۵. با جرم مؤثر الکترون با استفاده از نظریه نواری در بلور آشنا شود.
۶. با سطح فرمی گاز الکترونی بدون برهم‌کنش در حضور پتانسیل شبکه آشنا شود.

مقدمه

در ابتدای قرن بیستم، درود توانست رسانندگی فلزات را به‌طور کلاسیکی تخمین بزند و سپس با آغاز نگرش کوانتومی و ارائه نظریه نواری جامدات شناخت مواد روزه‌روز پیشرفت کرد. مدل الکترون آزاد از ساده‌ترین مدل‌هایی است که به‌خوبی قادر است تا حدودی جامدات فلزی گروه اول و دوم جدول تناوبی را توصیف نماید، ولی برای دیگر گروه‌های جدول تناوبی نمی‌تواند توصیف خوبی ارائه دهد. از این‌رو، به‌دلیل سادگی مدل الکترون آزاد و کاربرد نسبتاً خوب آن در فلزات ساده^۱، ابتدا به آن خواهیم پرداخت. در ادامه، با گسترش این مدل به نظریه نواری، سعی بر آن دارد که به برخی از سؤالاتی که توسط مدل الکترون آزاد بی‌پاسخ مانده است، پاسخ داده شود. از نتایج مهم نظریه نواری، می‌توان به طبقه‌بندی و توصیف ساختار الکترونی و رسانندگی مواد اشاره کرد. از این‌رو در این فصل علاوه بر مروری بر فصول ۶ و ۷ از کتاب حالت جامد^۱، به تکمیل آن‌ها تا جایی که ظرفیت این کتاب اجازه دهد خواهیم پرداخت. در ادامه این فصل، بعد از معرفی نظریه درود به دو رویکرد مهم دیگر مانند الکترون تقریباً آزاد و تنگ‌بست خواهیم پرداخت. در راستای معرفی این رویکردها، با کمیت‌های مهمی مانند چگالی حالات انرژی، نوار انرژی، جرم مؤثر الکترون، گاف انرژی و... نیز آشنا خواهیم شد.

در پیوست این فصل برای آشنایی دانشجویان با نحوه محاسبات چگالی حالات انرژی برحسب انرژی برای یک نوار انرژی سهمی‌گون می‌پردازد که در فصل دوم از این تابع چگالی حالات به‌کار استفاده شده است.

۱-۱ فلزات از منظر کلاسیکی

کشف الکترون به بیش از یک قرن پیش بر می‌گردد که از آن زمان مطالعات و تحقیقات در زمینه فیزیک حالت جامد آغاز شد. این ذره باردار، ساده‌ترین پدیده قابل مشاهده به نام رسانندگی الکتریکی در جامدات را توضیح می‌دهد. در اینجا، این سؤال مطرح می‌شود که اگر همه مواد الکترون دارند، پس چرا برخی رسانا و برخی نارسانای الکتریکی هستند؟ این ویژگی رسانا یا نارسانا بودن مواد، می‌تواند خاصیتی باشد که

۱. عضو گروه عناصر واسطه در جدول تناوبی نباشند. در این گروه که دارای اوربیتال‌های d یا f قسمتی‌پر است رفتارهای ویژه‌ای مانند همبستگی قوی الکترونی از خود نشان می‌دهند که بررسی آن در ظرفیت این کتاب نیست.

بتوان توسط آن، مواد را دسته‌بندی کرد. در این فصل ابتدا به بررسی خواص فلزات خواهیم پرداخت، که اهم دلایل آن عبارت‌اند از:

(الف) دوسوم از عناصر جدول تناوبی فلز هستند.

(ب) فلزات در سمت چپ جدول تناوبی قرار دارند. پوشش الکترونی این عناصر را می‌توان به دو قسمت تقسیم کرد: (۱) آخرین تراز انرژی قسمتی پر با تک‌الکترونی که می‌توانند به راحتی آن را از دست دهند و به‌طور یکنواخت در فضای بین یونها توزیع شوند (گروه قلیایی)، (۲) پوشش الکترونی با ترازهای انرژی کاملاً پر (گروه قلیایی خاکی). به عنوان مثال، جامد لیتیم با فاصله بین‌اتمی ۳ آنگستروم و شعاع یونش ۰/۵ آنگستروم، دارای فضای خالی^۱ بسیار در بین یونها است. از این رو الکترون‌های رسانش قادر هستند در فضای یونی آزادانه حرکت کنند و به مانند کلافی، یونها را در برگیرند تا سیستم را به حداقل انرژی تقلیل و مجموعه پایداری را تشکیل دهند. این نوع پیوند در مقایسه با پیوندهای کووالانسی که بسیار جایگزیده و جهت‌مند هستند، جایگزیده و جهت‌مند نیستند، از این رو نقش پیوندی ضعیف‌تری را بازی می‌کنند که باعث خاصیت چکش‌خواری در فلزات شده است.

(ج) با تشکیل ساختار بلوری فشرده و افزایش چگالی الکترونی، رسانندگی فلزات افزایش می‌یابد. از این رو ساختار بلوری فلزات به گونه‌ای است که دارای بیشترین تعداد اتم در سلول واحد با بیشترین همسایه برای هر اتم هستند. این گونه ساختارها عبارت‌اند از: شش‌وجهی پکیده HCP^۲، مکعبی مرکز سطحی FCC^۳ و مکعبی مرکز حجمی BCC^۴.

(د) هسته‌های یونی فلزات بسیار کوچک هستند و در فضای بلور به‌طور منظم جای گرفته‌اند. الکترون‌های ظرفیت^۵ (رسانش) در این فضا پراکنده هستند و این الکترون‌های تقریباً آزاد، بار هسته‌های یونی را به مقدار $e(Z - Z_c)$ می‌بینند که در اینجا e مقدار بار الکترون، Z عدد اتمی (تعداد کل الکترون‌ها) و Z_c تعداد الکترون‌های جایگزیده هستند که هسته را استتار کرده‌اند (الکترون‌های مغزی).

۱. فضای خالی از حضور یونها که توسط الکترون‌ها اشغال شده است.

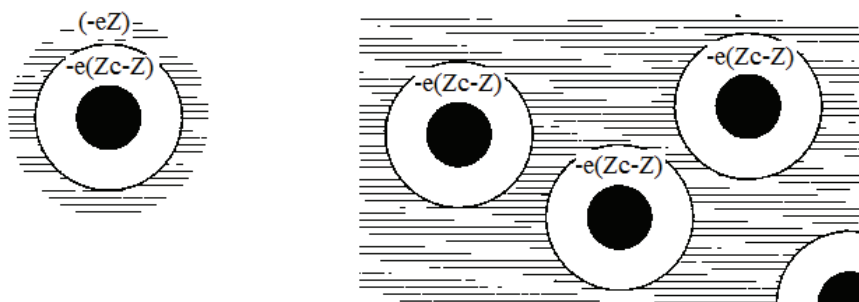
2. Hexagonal close-packed Structure

3. Face-centered Cubic Structure

4. Body-centered Cubic Structure

۵. در مفهوم فلزی، به آن‌ها الکترون رسانشی می‌گویند.

مطابق شکل (۱-۱)، بخش سیاه مربوط به هسته اتم، بخش سفید الکترون‌هایی که به هسته مقید هستند (الکترون‌های مغزی) و بخش هاشور خورده، فضایی است که الکترون‌های ظرفیت (رسانش) تقریباً آزادانه در آن حرکت می‌کنند و نسبت به بقیه الکترون‌ها در فاصله دورتری از هسته قرار دارند، از این رو، سهم اثرات کولنی بار هسته بر روی این دسته الکترون‌ها (به دلیل استتار هسته توسط الکترون‌های مغزی و دوری از یون‌ها) کاهش می‌یابد.



شکل ۱-۱. نمایش طرحواره سه ناحیه مختلف شامل: هسته (بخش سیاه)، الکترون‌های جایگزیده استتارکننده هسته که الکترون‌های مغزی نامیده می‌شوند (بخش سفید) و الکترون‌های ظرفیت و رسانش (بخش هاشورخورده).

در ادامه به اولین مدل و ساده‌ترین مدل که درست سه سال بعد از کشف الکترون در سال ۱۹۰۰ ارائه شد، می‌پردازیم.

۱-۱-۱ مدل درود

سوالات بسیاری در خصوص رسانندگی مواد در زمان‌های بسیار دور مطرح شده بود که بی‌پاسخ مانده بود. در ابتدای قرن بیستم درست سه سال بعد از کشف الکترون، الکترون به عنوان ذره‌ای با بار الکتریکی منفی، عامل رسانندگی در مواد معرفی شد (درود^۱). در آن دوره از زمان، چارچوب تفکرات فیزیک‌دانان از نوع نیوتونی بود و الکترون را به عنوان یک ذره کاملاً کلاسیکی می‌پنداشتند. از جمله سؤالات بی‌پاسخ در آن دوره، محاسبه سرعت الکترون و رسانندگی متناهی در فلزات در حضور میدان

1. P. Drude, *Annalen der Physik*, 1. 566 and 3, 369 (1900)

الکتریکی بود. برای اولین بار درود برای توجیه عدم رسانندگی نامتناهی فلزات، حضور یون‌ها در جامدات و برخورد الکترون‌ها با یون‌ها را عامل دانست.^۱ او الکترون را مانند گلوله‌ای سخت و بسیار کوچک باردار در نظر گرفت که در حضور میدان الکتریکی شتاب می‌گیرد و در نهایت می‌تواند در اثر برخوردهای پی‌درپی با یون‌های شبکه، در طی مسیر حرکت خود، با یک سرعت متوسط (سرعت سوق) حرکت کند.

مدل درود مانند هر مدل دیگری دارای مفروضاتی است که عبارت‌اند از:
الف) الکترون‌های متحرک فقط با هسته‌های یونی که در فضا جایگزیده هستند، برخورد انجام می‌دهند.

ب) الکترون‌ها در بین برخوردها هیچ‌گونه برهم‌کنشی با یکدیگر و با یون‌ها ندارند.

ج) برخورد از نوع لحظه‌ای است که باعث تغییر جهت سرعت الکترون‌ها می‌شود. جهت پراکندگی کاملاً تصادفی فرض می‌شود.

د) تعادل گرمایی الکترون با محیط پیرامونش فقط در لحظه برخورد با یون‌های شبکه است که با سرعتی معادل با انرژی گرمایی یون‌ها از آن‌ها جدا می‌شود. احتمال برخورد یا آهنگ برخورد الکترون‌ها با هسته‌های یونی در واحد زمان برابر $\frac{1}{\tau}$ است که در اینجا τ متوسط زمان برخورد الکترون در برخورد پی‌درپی با یون‌ها است که آن را می‌توان برابر با زمان واهلش^۲ الکترون در نظر گرفت.

نکته ۱-۱. همانطور که در زیرنویس صفحه قبل به آن اشاره شد. در یک بلور ایده‌ئال در دمای صفر مطلق یون‌های شبکه عامل پراکندگی نیستند ولی عدم وجود یک بلور ایده‌ئال باعث می‌شود تا برخی عوامل از جمله ناخالصی‌ها، دررفتگی‌ها، ناکاملی‌ها و ارتعاشات شبکه‌ای، عوامل پراکندگی باشند. از این‌رو با یک بازنگری در روابط درود و معرفی یک زمان واهلش برای هر یک از این عوامل پراکندگی، می‌توان به درستی از روابط درود در توصیف کمیت‌های فیزیکی استفاده کرد.

۱. ولی براساس نظریه نواری نشان داده می‌شود که در دمای صفر مطلق، الکترون‌ها توسط یون‌های یک شبکه‌ی منظم ایده‌ئال پراکنده نمی‌شوند. به زبان ساده‌تر الکترون‌های رسانش در یک بلور ایده‌ئال، یون‌های منظم بلور را نمی‌بینند تا پراکنده شوند. در اینجا فرض پراکندگی اسپینی را نیز در نظر گرفته نشده است.

۲-۱-۱ تقریب زمان واهلش

در درس الکترومغناطیس دیدیم، می‌توان چگالی جریان الکتریکی $\vec{J}$ یک رسانا را برحسب سرعت متوسط ذرات $\langle \vec{v} \rangle$ و چگالی بار الکتریکی الکترون‌ها ($\rho = n(-e)$) به صورت زیر نوشت:

$$\vec{J} = \rho \langle \vec{v} \rangle = -ne \frac{\langle \vec{p} \rangle}{m_e} \quad (1-1)$$

که در آن m_e جرم الکترون، n چگالی الکترون و $\langle \vec{p} \rangle$ متوسط اندازه حرکت هستند. تحول زمانی $\vec{p}$ در بازه زمانی dt تحت اثر نیروی خارجی $\vec{f}(t)$ را در نظر بگیرید. احتمال برخورد و عدم برخورد در طی بازه زمانی t و $t+dt$ به ترتیب برابر dt/τ و $(1-dt/\tau)$ است. متوسط اندازه حرکت الکترون در زمان $(t+dt)$ با فرض اینکه در بازه زمانی dt برخوردی صورت نپذیرد، برابر است با:

$$\langle \vec{p}(t+dt) \rangle = \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right) \left(\langle \vec{p}(t) \rangle + \frac{\partial \langle \vec{p}(t) \rangle}{\partial t} dt + O(dt)^2 \right) \quad (2-1)$$

داخل پراکنش دوم سمت راست عبارت (۲-۱) همان بسط تیلور اندازه حرکت است که در ضریب احتمال عدم پراکندگی $(1 - \frac{dt}{\tau})$ ضرب شده است.

با استفاده از تعریف متوسط نیرو به صورت $\langle \vec{f}(t) \rangle = \frac{\partial \langle \vec{p}(t) \rangle}{\partial t}$ در رابطه (۲-۱)، تغییرات متوسط اندازه حرکت تا مرتبه $O(dt)^2$ قبل از برخورد برابر است با:

$$d\langle \vec{p} \rangle = \langle \vec{p}(t+\delta t) \rangle - \langle \vec{p}(t) \rangle = \left(\langle \vec{f}(t) \rangle - \frac{\langle \vec{p}(t) \rangle}{\tau} \right) dt + O(dt)^2 \quad (3-1)$$

که با تقسیم طرفین رابطه (۳-۱) به dt ، عبارت $d\langle \vec{p} \rangle / dt$ برابر با نیروهای متوسط خارجی $\langle \vec{f}(t) \rangle$ وارد بر الکترون و نیروی اتلافی $-\frac{\langle \vec{p}(t) \rangle}{\tau}$ ناشی از برخورد الکترون با عوامل پراکندگی می‌باشد که در اینجا درود عامل پراکندگی را به اشتباه، یون‌های شبکه می‌دانست. با در نظر گرفتن $dt \rightarrow 0$ می‌توان از جملات مرتبه $(dt)^2$ به بالا صرف نظر کرد (رابطه (۴-۱)).

$$\frac{d\langle \vec{p}(t) \rangle}{dt} = \langle \vec{f}(t) \rangle - \frac{\langle \vec{p}(t) \rangle}{\tau} \quad (4-1)$$

نکته ۱-۲. اگر به زمان برخورد در عبارت (۴-۱) به عنوان طول عمر یک فرایند نگاه شود در این صورت رفتار یک سیستم با طول عمر τ نسبت به یک سیستم بدون طول عمر، متفاوت می شود.

نکته ۱-۳. نکته مهم دیگر نهفته شده در رابطه (۴-۱) این است که این پراکندگی ها (الکترون با عوامل پراکندگی) سیستم را به سمت یک حالت پایا هدایت می کنند. از این رو عدم وجود پراکندگی در سیستم نمی تواند در حضور میدان های خارجی شرایط پایایی را ایجاد کند. بنابراین در یک بازه زمانی کوچک در مقایسه با زمان τ ($dt \ll \tau$)، شرایط پایا برقرار نمی شود و قانون دوم نیوتون در بازه زمانی کوچک dt شکل $\frac{d\langle \vec{p}(t) \rangle}{dt} = \langle \vec{f}(t) \rangle$ را خواهد داشت.

سیستم یک گاز الکترونی بدون برهم کنش را که تحت اثر میدان الکتریکی $\vec{E}$ قرار دارد، در نظر بگیرید. نیروی اعمالی بر هر الکترون برابر $\vec{f}(t) = -e\vec{E}$ است که در حالت پایا متوسط تغییرات زمانی اندازه حرکت $\frac{d\langle \vec{p}(t) \rangle}{dt}$ برابر با صفر می شود.^۱ از این رو با توجه به رابطه (۴-۱)، متوسط اندازه حرکت الکترون در بلور به صورت زیر نتیجه می شود:

$$-\frac{\langle \vec{p}(t) \rangle}{\tau} - e\vec{E} = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle \vec{p}(t) \rangle = -\tau e\vec{E} \quad (5-1)$$

بنابراین

$$\langle \vec{V} \rangle = \frac{-e\vec{E}\tau}{m}, \quad \langle \vec{J} \rangle = -ne\langle \vec{V} \rangle \quad (6-1)$$

با استفاده از قانون اهم، $\vec{J} = \sigma \vec{E}$ ، رسانندگی الکتریکی به صورت رابطه زیر به دست می آید:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m_e} \quad (7-1)$$

بر اساس رابطه (۷-۱) و با در نظر گرفتن مقدار رسانش الکتریکی تجربی فلزات^۲ σ با چگالی الکترونی $n = 10^{22} - 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ ، زمان واهلش برابر

۱. زمان محاسبه متوسط زمانی به مراتب بسیار بیشتر از زمان واهلش است.

۲. در دمای اتاق نوعاً فلزات معمولی دارای مقاومت ویژه $\rho = \frac{1}{\sigma} = 1 \sim 20 \mu\Omega \text{ cm}$ است.

$\tau = 10^{-15} \text{ s} - 10^{-14} \text{ s}$ خواهد شد. برای به دست آوردن مسافت آزاد میانگین کافی است سرعت متوسط الکترون در جامدات را داشته باشیم. با توجه به مدل درود، الکترون‌ها با برخورد با یون‌های شبکه می‌توانند با محیط تبادل حرارتی داشته باشند که طبق قضیه همپاری انرژی در مکانیک آماری، می‌توان متوسط سرعت الکترون‌ها در دمای T را به دست آورد.

$$\frac{1}{2} m_e \langle v^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T \quad (۸-۱)$$

سرعت به دست آمده از رابطه (۸-۱) به سرعت پخش یا سرعت حرارتی، معروف است. این سرعت جهت ارجحی در فضا ندارد، از این رو متوسط جابه‌جایی الکترون‌ها صفر خواهد شد (بنابراین متوسط سرعت الکترون‌ها صفر می‌شود $\langle \vec{v} \rangle = 0$). جذر میانگین مربعی این سرعت $\sqrt{\langle v^2 \rangle}$ از مرتبه 10^7 cm/s است که بسیار بزرگتر از مقداری است که در تجربه به دست می‌آید. با در نظر گرفتن سرعت پخش و زمان واهلش سیستم $\tau = 10^{-15} \text{ s} - 10^{-14} \text{ s}$ ، مقدار پویش آزاد میانگین^۱ (متوسط مسافت آزاد بین دو برخورد متوالی) را می‌توان تخمین زد $v\tau = 0.1 - 1 \text{ nm}$ که تقریباً با فاصله بین اتمی از مرتبه چند اتم در جامدات معادل است. این نتیجه خوشحال‌کننده برای درود در آن زمان بود ولی بعد از ظهور فیزیک کوانتومی و نظریه نواری الکترون و اندازه‌گیری‌هایی که در دماهای پایین انجام شده است نشان داده می‌شود که مقدار پویش آزاد میانگین از مرتبه سانتی‌متر (تقریباً 10^8 برابر فاصله بین اتمی) است که با نظریه درود مطابقتی نداشت. در آینده نشان خواهیم داد، الکترون در فلزات ایده‌آل^۲ در دمای صفر مطلق هیچ‌گونه پراکندگی نخواهد داشت و پراکندگی به دست آمده به دلیل عدم ایده‌آل بودن فلزات است.

بایستی به این نکته اشاره کرد که در حضور میدان الکتریکی، حرکت الکترون‌ها جهت ارجحی پیدا می‌کند که متوسط جابه‌جایی الکترون‌ها دیگر صفر نخواهد شد. سرعت متوسط به دست آمده از این جابه‌جایی را سرعت سوق (یا سرعت رانش) می‌نامند. از نگاه کلاسیکی به دلیل کوچکی این جابه‌جایی که ناشی از برخورد پی‌درپی

1. Mean Free Path

۲. فلزات با شبکه بلوری کاملاً یکسان و منظم، بدون هیچ‌گونه ناخالصی و دررفتگی در آن‌ها

الکترون‌ها با عوامل پراکندگی در جهت میدان الکتریکی است، سرعت سوق $\vec{v}_d$ بسیار کوچکی را نتیجه می‌دهد. این سرعت بسیار کوچک‌تر از سرعت حرارتی (پخش) که در پاراگراف قبلی به آن اشاره شد، خواهد بود.

جریان الکتریکی حاصل در فلزات ناشی از سرعت سوق است. بدون حضور میدان الکتریکی، متوسط اندازه حرکت الکترون‌ها برابر صفر خواهد شد، اما با اعمال میدان الکتریکی الکترون‌ها اندازه حرکت متوسطی معادل $m_e \vec{v}_d$ را از میدان کسب می‌کنند که در حالت پایا از رابطه‌های (۱-۵) و (۱-۶) خواهیم داشت.

$$\frac{d\langle \vec{P} \rangle}{dt} = -\frac{m_e \vec{v}_d}{\tau} - e\vec{E} = 0 \Rightarrow \vec{v}_d = \frac{-e\tau}{m_e} \vec{E} = -\mu_e \vec{E}$$

در اینجا $\mu_e = \frac{e\tau}{m_e}$ تحرک‌پذیری الکترون است و با متوسط زمان برخورد τ (زمان واهلش) متناسب است، از این رو با در دست داشتن تحرک‌پذیری فلزات، می‌توان زمان τ را محاسبه نمود.

نکته دیگر که در فصل‌های آینده بیشتر به آن خواهیم پرداخت، جرم الکترون در مواد است. جرم الکترون در مواد با جرم واقعی الکترون m_e در خلأ متفاوت است که به آن جرم مؤثر الکترون m_e^* گفته می‌شود. در رابطه‌های بالا بایستی از جرم مؤثر m_e^* استفاده نماییم که در فصل دوم توضیح داده خواهد شد. نشان خواهیم داد که الکترون در ساختارهای بلوری متفاوت دارای جرم مؤثرهای متفاوتی است (هم از نظر مقدار و هم از نظر علامت) که این تفاوت می‌تواند رسانندگی و تحرک‌پذیری متفاوتی را در مواد سبب شود.

در ادامه نشان خواهیم داد که هرچند نتایج مدل درود تا حدودی با برخی از نتایج تجربی قابل مقایسه است، ولی در بیان برخی از خصوصیات الکترونی در جامدات فلزی با شکست‌هایی روبه‌رو است که به چند نمونه از آن اشاره می‌کنیم.

نکته ۱-۴. در این نظریه به دلیل عدم در اختیار داشتن مقدار τ ، کمیت‌های وابسته به τ به درستی محاسبه نمی‌شود ولی نسبت‌های برخی از این کمیت‌ها (به دلیل حذف عبارت τ) توافق نسبتاً خوبی با تجربه را نتیجه می‌دهد.