



فیزیک حالت جامد ۲

دکتر امیرعباس صبوری دودران

بسم الله الرحمن الرحيم

پیشگفتار ناشر

کتاب‌های دانشگاه پیام نور حسب مورد و با توجه به شرایط مختلف یک درس در یک یا چند رشته دانشگاهی، به صورت کتاب درسی، متن آزمایشگاهی، فرادرسی، و کمک‌درسی چاپ می‌شوند.

کتاب درسی ثمره کوشش‌های علمی صاحب اثر است که براساس نیازهای درسی دانشجویان و سرفصل‌های مصوب تهیه و پس از داوری علمی، طراحی آموزشی، و ویرایش علمی در گروه‌های علمی و آموزشی، به چاپ می‌رسد. پس از چاپ ویرایش اول اثر، با نظرخواهی‌ها و داوری علمی مجدد و با دریافت نظرهای اصلاحی و متناسب با پیشرفت علوم و فناوری، صاحب اثر در کتاب تجدیدنظر می‌کند و ویرایش جدید کتاب با اعمال ویرایش زبانی و صوری جدید چاپ می‌شود.

متن آزمایشگاهی (م) راهنمایی است که دانشجویان با استفاده از آن و کمک استاد، کارهای عملی و آزمایشگاهی را انجام می‌دهند.

کتاب‌های فرادرسی (ف) و **کمک‌درسی** (ک) به منظور غنی‌تر کردن منابع درسی دانشگاهی تهیه و بر روی لوح فشرده تکثیر می‌شوند و یا در وبگاه دانشگاه قرار می‌گیرند.

مدیریت تولید محتوا و تجهیزات آموزشی

فهرست

نه	پیشگفتار
۱	فصل اول. نگاه نیمه کلاسیکی الکترون در یک بلور فلزی
۲	مقدمه
۲	۱-۱ فلزات
۴	۲-۱ مدل الکترون آزاد
۶	۳-۱ مدل درود
۶	۱-۳-۱ تقریب زمان واهلش
۷	۲-۳-۱ شکست های مدل درود
۱۱	۴-۱ نظریه نواری جامد
۱۲	۱-۴-۱ نوارهای انرژی در جامدات
۱۴	۲-۴-۱ نظریه بلوخ
۱۹	۳-۴-۱ شرط بورن-وان کارمن یا شرط مرزی تناوبی
۲۳	۴-۴-۱ مدل کرونینگ-پنی
۲۹	مسائل
۳۰	سؤالات تستی
۳۳	فصل دوم. منظری کوانتومی از الکترون در یک پتانسیل تناوبی
۳۴	مقدمه
۳۴	۱-۲ معادله شرودینگر در یک پتانسیل تناوبی
۴۱	۲-۲ پراش الکترون های ظرفیت
۴۷	۳-۲ مدل الکترون تقریباً آزاد
۴۷	۱-۳-۲ پتانسیل صفر

۴۸	۲-۳-۲ ترازهای انرژی چندگانه تبهگن
۵۳	مسائل
۵۴	سؤالات تستی
۵۷	فصل سوم. رویکردهای دیگر در بررسی ساختار الکترونی جامدات
۵۸	مقدمه
۵۸	۳-۱ مدل تنگ‌بست
۷۰	۳-۱-۱ جرم مؤثر حاملین بار
۷۵	۳-۲ روش سلول ویگنر-سایتز
۷۹	۳-۳ پتانسیل مافین-تین
۸۱	۳-۴ روش توابع موج تخت افزوده (APW)
۸۲	۳-۵ روش امواج تخت متعامد (OPW)
۸۹	مسائل
۹۲	سؤالات تستی
۹۵	فصل چهارم. سطح فرمی و فلزات
۹۵	مقدمه
۹۶	۴-۱ سطح فرمی
۱۱۰	۴-۲ اثر دوهااس-ون آلفن
۱۱۲	مسائل
۱۱۲	سؤالات تستی
۱۱۵	فصل پنجم. نگاهی بر ساختار الکترونی نیمرساناها
۱۱۶	مقدمه
۱۱۶	۵-۱ ساختار بلورین نیمرساناها و انواع آن
۱۱۷	۵-۲ ساختار الکترونی نیمرسانا
۱۲۷	۵-۳ ناخالصی در نیمرسانا
۱۳۲	۵-۴ احتمال پرشدگی ترازهای ناخالصی بخشنده و پذیرنده
۱۳۴	۵-۵ پتانسیل شیمیایی نیمرساناهای غیرذاتی و اثرات دما بر آنها
۱۳۸	۵-۶ گذارهای مستقیم و غیرمستقیم در نیمرسانا
۱۴۰	۵-۷ خواص انتقال الکتریکی
۱۴۲	۵-۸ حاملین اقلیت در نیمرساناها
۱۴۳	۵-۹ اثر هال در نیمرسانا
۱۴۸	۵-۱۰ تشدید سیکلوترون
۱۵۱	مسائل
۱۵۲	سؤالات تستی
۱۵۵	فصل ششم. خواص مغناطیسی جامدات
۱۵۵	مقدمه

۱۵۷	۱-۶ گشتاور مغناطیسی
۱۶۰	۲-۶ مغناطش الکترون‌های سرگردان در فلزات
۱۶۰	۱-۲-۶ پارامغناطیسی اسپینی
۱۶۷	۲-۲-۶ دیامغناطیس لاندائو
۱۷۴	۳-۲-۶ رفتار دیامغناطیسی گاز الکترونی
۱۸۰	مسائل
۱۸۰	سؤالات تستی

۱۸۳	فصل هفتم. اثرات میدان مغناطیسی بر قطبش اتم‌های مغناطیسی مواد
۱۸۳	مقدمه
۱۸۴	۱-۷ رفتار پارامغناطیسی الکترون‌های مغزی در حضور میدان B
۱۸۴	۱-۱-۷ نگاه نیمه کلاسیکی به پارامغناطیسی سیستم
۱۹۲	۲-۱-۷ نگاه کوانتومی به پارامغناطیسی سیستم
۱۹۹	۲-۷ قانون هوند
۲۰۳	پیوست (الف): قانون سوم هوند
۲۰۷	پیوست (ب): محاسبه ضریب لاندو
۲۰۸	مسائل
۲۱۰	سؤالات تستی

۲۱۳	فصل هشتم. مغناطش یک سیستم با برهم‌کنش
۲۱۴	مقدمه
۲۱۴	۱-۸ نظریه هایزنبرگ
۲۱۴	۱-۱-۸ برهم‌کنش گشتاور دوقطبی‌های مغناطیسی
۲۱۶	۲-۱-۸ انرژی تبادل
۲۲۱	۲-۸ فرومغناطیس
۲۲۵	۳-۸ پادفرومغناطیس
۲۲۶	۱-۳-۸ محاسبه مدل میدان متوسط وایس برای یک پادفرومغناطیس
۲۳۰	۴-۸ فری مغناطیس
۲۳۱	۵-۸ امواج اسپینی فرومغناطیسی
۲۳۵	۶-۸ امواج اسپینی پادفرومغناطیسی
۲۳۶	۷-۸ جامدهای پارامغناطیسی
۲۳۷	مسائل
۲۳۹	سؤالات تستی

۲۴۱	جداول
۲۴۳	مراجع

پیشگفتار

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 گردد و ثانیاً پیوستگی مطالب در آن رعایت شود. از این رو در نگارش این کتاب بسیار تلاش نمودم تا خودخوان بودن این کتاب تأمین گردد ولی این کتاب به دلایل گفته شده دارای کم‌وکاستی‌هایی است که از اساتید محترم و دانشجویان عزیز تقاضا دارم با خواندن این کتاب هر گونه انتقاد و یا اشکالاتی چه محتوایی و چه نگارشی که در این کتاب می‌بینند به آدرس ایمیل داده شده فرستاده تا بتوانم در ویرایش‌های بعدی این اشکالات را برطرف نمایم. لازم به ذکر است که در هنگام نگارش این کتاب فرض بر آن شده است که دانشجویان، با دروس ریاضی فیزیک ۱ و ۲، مکانیک کوانتومی ۱، ۲، مکانیک آماری، ترمودینامیک و فیزیک حالت جامد ۱ آشنا باشند.

در مقطع کارشناسی رشته فیزیک، دانشجویان گرایش فیزیک حالت جامد دو درس تخصصی سه واحدی با عناوین فیزیک حالت جامد ۱ و فیزیک حالت جامد ۲ را می‌گذرانند. این کتاب در ادامه کتاب فیزیک حالت جامد ۱ تهیه و تنظیم شده است. در کتاب فیزیک حالت جامد ۱ ما با بلور که متشکل از اتم‌ها با یک آرایش منظم که یک شبکه را پدید می‌آورند، آشنا شدیم. همچنین در آن کتاب به معرفی ساختارهای مختلف بلور، انواع پیوندهای اتمی و ارتعاشات شبکه‌ای می‌پردازد. الکترون‌ها می‌توانند

خواص مختلف الکترونی و مغناطیسی در بلور پدید آورند که بررسی این خواص به طور دقیق امکان پذیر نمی باشد ولی با ساده سازی و استفاده از تقریب ها ما را به سمت ساختار الکترونی واقعی بلور هدایت می کنند. در این کتاب در ابتدا به بررسی ساختار الکترونی فلزات پرداخته است. الکترون های رسانش با تقریب مرتبه اول، می توان به مانند الکترون های تقریباً آزاد در نظر گرفته شوند. از این رو در فصل اول به بررسی ساختار الکترونی یک گاز الکترونی پرداخته ایم. این تقریب، یک سری اطلاعات کلی از فلزات در اختیار ما می گذارد ولی با این مدل نمی توان بین فلزات تمایزی در ساختار الکترونی شان قائل شد. در فصل دوم تقریب را کمی واقع بینانه تر نموده و پتانسیل یون های شبکه را به مجموعه گاز الکترونی به مانند یک اختلال اضافه نموده ایم. این اختلال باعث ایجاد گاف های در نوارهای انرژی می شود. برای بررسی ساختار الکترونی دیگر دسته الکترون ها (الکترون های ظرفیت و مغزی) نیاز به مدل های دیگر است که در فصل سوم به چند مدل که در پیدایش مدل های واقع بینانه تر کمک کرده اند، به آنها پرداخته می شوند. فصل چهارم به معرفی سطح فرمی به عنوان تعریف دیگری از فلزات می پردازد. فلزات به دلیل داشتن هندسه سطح فرمی متفاوت دارای خواص الکتریکی و مغناطیسی متفاوتی می باشند. دسته دیگر مواد نیم رساناها هستند که در دماهای پایین رفتاری عایق گونه و در دماهای بالا رفتاری فلز گونه دارند که در فصل پنجم به خواص الکترونی این دسته مواد و نیز به معرفی حفره به عنوان دیگر حاملین مهم در رسانش نیم رساناها پرداخته است. مواد نیم رسانا امروزه نقش کلیدی در صنعت الکترونیک بازی می کند. در ادامه فصول، به دسته بندی مواد مغناطیسی از لحاظ مغناطیسی (فرومغناطیس، فری مغناطیس و آنتی فرومغناطیسی) و رفتار این دسته مواد در حضور میدان مغناطیسی (پارامغناطیسی یا دیامغناطیسی) و نیز امواج اسپینی و مگنون ها (برانگیختگی مغناطیسی) می پردازد. در داخل هر فصل به نکات مهمی به طور مشخص و مجزا بیان و برخی دیگر از آنها در پاورقی جهت تکمیل مطالب آورده شده است که به خوانندگان محترم توصیه می شود به آنها توجه نمایند.

در انتها لازم می دانم از دوست و همکار محترم جناب آقای دکتر سید احمد بابانژاد به خاطر نقطه نظرهای ارزشمندشان که در ویرایش این کتاب بنده را یاری نموده اند کمال سپاسگزاری را داشته باشم و نیز از کلیه همکاران محترم تدوین

مخصوصاً مدیریت محترم تدوین جناب آقای دکتر محمدعلی ابراهیمی و معاون محترم تدوین جناب آقای محمدرضا ثمری و کارشناسان محترم تدوین سرکار خانم اشرف شوریایی، سرکار خانم زینب حیدری عراقی، سرکار خانم خدیجه علی‌نژاد و جناب آقای امیر عالی 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

تابستان ۱۳۹۳

۱. آدرس ایمیل: sabouri@pnu.ac.ir

فصل اول

نگاه نیمه کلاسیکی الکترون در یک بلور فلزی

هدف کلی

پنج فصل اول این کتاب به ساختار الکترونی جامدات می‌پردازد. در ادامه نشان خواهیم داد، گاز الکترونی با تقریب اول به عنوان ساده‌ترین توصیف الکترونی از فلزات می‌باشد. مدل گاز الکترونی در کتاب فیزیک حالت جامد ۱ به خوبی بیان شده است ولی با توجه به پیوستگی و اهمیت این موضوع با موضوعات فصل‌های بعدی، این مدل به اجمال در این کتاب نیز آورده شده است. در ادامه به معرفی تابع بلوخ به عنوان تابع موج الکترون‌های غیرجایگزیده در بلور خواهیم پرداخت.

هدف‌های یادگیری

دانشجو پس از مطالعه این فصل باید،

۱. با خواص الکترونی فلزات ساده آشنا شود.
۲. با مدل‌های ساده برای توصیف خواص الکترونی فلزات مانند مدل درود، تقریب الکترون آزاد (گاز الکترونی بدون برهم‌کنش)، موفقیت‌های و شکست‌های این مدل‌ها آشنا شود.

۳. با شرایط مرزی پتانسیل بی‌نهایت و تناوبی (بورن-ون کارمن) آشنا شود.

۴. نشان دهد الکترون آزاد در یک جعبه با ابعاد محدود اندازه حرکت و انرژی کوانتیزه دارد.

۵. با نظریه نواری جامدات برای توصیف ساختار الکترونی یک بلور با یک پتانسیل دوره‌ای آشنا شود.
۶. با پتانسیل دوره‌های شبکه در یک بلور و نحوه‌ی تغییرات آن در مجاورت سطوح بلور آشنا شود.
۷. با تابع موج بلوخ به عنوان تابع موج الکترون در یک بلور آشنا شود.
۸. با مدل کرونیگ-پنی به عنوان اولین روش مقدماتی برای فهم و توصیف نواری یک سیستم الکترونی در یک پتانسیل خارجی دوره‌ای آشنا شود.

مقدمه

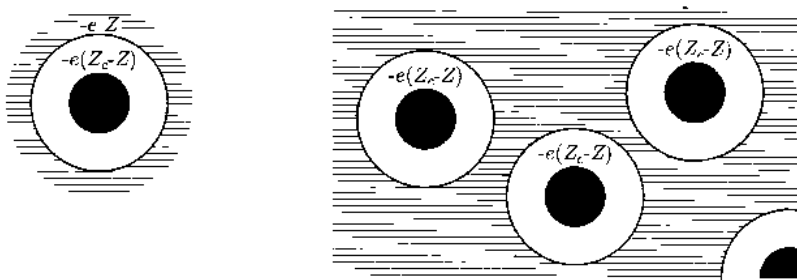
این فصل و فصل بعد، مروری اجمالی بر پیشرفت مدل‌های به کار رفته در شناخت ساختار الکترونی جامدات از آغاز کشف الکترون و پیدایش مکانیک کوانتومی دارد. مدل الکترون آزاد از ساده‌ترین مدل‌هایی است که به خوبی قادر است، تا حدودی جامدات فلزی گروه اول و دوم جدول تناوبی را توصیف نماید، ولی برای دیگر گروه‌های جدول تناوبی نمی‌تواند توصیف خوبی ارائه دهد. از این رو، به دلیل سادگی مدل الکترون آزاد و کاربرد نسبتاً خوب آن در فلزات، در این فصل به عناصر فلزی ساده که دارای اربیتال‌های d یا f نیمه‌پر نمی‌باشند، پرداخته می‌شود و در ادامه، با گسترش این مدل به نظریه نواری، سعی بر آن است که به برخی از سؤالاتی که توسط مدل الکترون آزاد بی‌پاسخ مانده بود، پاسخ داده شود. از نتایج مهم نظریه نواری، می‌توان به طبقه‌بندی و توصیف ساختار الکترونی و رسانندگی مواد اشاره نمود.

۱-۱ فلزات

کشف الکترون به بیش از یک قرن پیش برمی‌گردد که با مطالعه فیزیک حالت جامد شروع شد. حضور این ذرات باردار در جامدات، فرآیند قابل مشاهده‌ای به نام رسانندگی الکتریکی را توصیف می‌نماید. در اینجا، این سوال 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 بتوان توسط آن، مواد را

دسته بندی نمود. در این فصل ابتدا به بررسی خواص فلزات خواهیم پرداخت، که اهم دلایل آن عبارت هستند از:

- دو سوم از عناصر جدول تناوبی فلز هستند.
- فلزات در سمت چپ جدول تناوبی قرار دارند. پوشش الکترونی این عناصر را می توان به دو قسمت تقسیم نمود: الف) آخرین تراز انرژی نیمه پر با تک الکترونی که می توانند به راحتی آن را از دست دهند و به طور یکنواخت در فضای بین یونها توزیع شوند (گروه فلزایی) ب) پوشش الکترونی با ترازهای انرژی کاملاً پر (گروه فلزایی خاکی). به عنوان مثال، جامد لیتیم با فاصله بین اتمی ۳ آنگستروم و شعاع یونش ۰/۵ آنگستروم، دارای فضای خالی بسیار در بین یونها است. از این رو الکترون های رسانش قادر هستند در فضای یونی آزادانه حرکت کنند و به مانند کلاهی، یونها را در بر گیرند تا سیستم را به حداقل انرژی تقلیل و مجموعه ی پایداری را تشکیل دهند. این نوع پیوند در مقایسه با پیوندهای کووالانی که بسیار جایگزیده و جهت مند هستند، جایگزیده و جهت مند نیستند. از این رو نقش پیوندی ضعیف تری را بازی می نمایند که آن باعث خاصیت چکش خواری در آنها شده است.
- با تشکیل ساختاری بلوری فشرده و افزایش چگالی الکترونی، رسانندگی فلزات افزایش می یابد. از این رو ساختار بلوری فلزات به گونه ای است که دارای بیشترین تعداد اتم در سلول واحد با بیشترین همسایه برای هر اتم می باشند. این گونه ساختارها عبارت هستند از: شش وجهی پکیده HCP، مکعبی مرکز سطحی FCC و مکعبی مرکز حجمی BCC.
- هسته های یونی فلزات بسیار کوچک اند که در فضای بلور به طور منظم جای گرفته اند. الکترون های ظرفیت و رسانش در این فضا پراکنده هستند و این الکترون های تقریباً آزاد، بار هسته های یونی را به مقدار $e(Z - Z_c)$ می بینند که در اینجا e بار الکترون، Z عدد اتمی (تعداد کل الکترون ها) و Z_c تعداد الکترون های جایگزیده که هسته را استتار نموده اند، می باشند.



شکل ۱-۱. نمایش شماتیک سه ناحیه مختلف شامل: هسته (بخش سیاه)، الکترون‌های جایگزیده استتار کننده هسته که الکترون‌های مغزی نامیده می‌شوند (بخش سفید) و الکترون‌های ظرفیت و رسانش (بخش هاشور خورده)

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 و 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 کاهش می‌یابد.

۲-۱ مدل الکترون آزاد

همان‌طور که از آزمایش رادفورد نتیجه گرفته می‌شود سهم اشغال فضایی هسته‌ها نسبت به حجم جامد بسیار ناچیز است و از طرفی الکترون‌هایی که در بالاترین تراز انرژی یک جامد فلزی قرار دارند، نسبت به بقیه الکترون‌ها در فاصله دورتری از هسته‌ها واقع هستند و اثرات پتانسیل هسته‌ها بر روی آن‌ها بسیار ضعیف‌تر می‌باشند. از این رو می‌توان با تقریب نسبتاً خوبی حجم هسته‌ها همراه با الکترون‌های مغزی را صرف‌نظر نمود و فقط بخش هاشور خورده شکل (۱-۱) را در نظر گرفت که آن مربوط به الکترون‌های بالاترین تراز انرژی است که در این ناحیه آزادانه می‌توانند در بلور جابه‌جا شوند. ساده‌ترین مدلی که برای توصیف این دسته الکترون‌ها به کار برده می‌شود مدل الکترون‌های آزاد است. در ادامه از لفظ گاز الکترونی استفاده می‌شود که آن به دلیل بالا بودن سهم انرژی جنبشی الکترون نسبت به انرژی پتانسیل برهم‌کنشی الکترون-الکترون، می‌باشد. با استفاده از اصل عدم قطعیت $\Delta \vec{r} \cdot \Delta \vec{p} \geq \hbar$ می‌توان نشان

داد که انرژی جنبشی متوسط یک گاز الکترونی با عکس توان دوم متوسط فواصل الکترونی $T = (\Delta p)^2 / 2m \approx 1/2 (\Delta r)^2$ متناسب می باشد و از طرفی پتانسیل برهم کنش کولنی الکترون ها با عکس متوسط فواصل الکترونی $U \approx 1/\Delta r$ متناسب است. با افزایش چگالی الکترونی، که ساختار فشرده ای را می طلبد، متوسط اندازه ی فواصل الکترون ها Δr کاهش می یابد که با وجود چنین شرایطی انرژی متوسط پتانسیل الکترون ها در مقایسه با انرژی جنبشی آن ها قابل صرف نظر کردن می باشد. فقط در چگالی های الکترونی بالا است که این مدل پاسخ مناسبی به ما می دهد. بنابراین هر چه غلظت الکترون ها افزایش یابد سهم انرژی پتانسیل نسبت به انرژی جنبشی کاهش می یابد. با توجه به عناصر یافت شده در کره زمین و شرایط فیزیکی محیطی مانند اثر گرانش بر روی مواد، چنین چگالی الکترونی بالا به طور طبیعی بر روی زمین یافت نمی شود و فقط در دل ستارگان نوترونی و سیاه چاله ها با توجه به گرانش بالای آن ها می توان یافت. هامیلتونی این نوع سیستم الکترونی به صورت $H = p^2 / 2m$ می باشد که ویژه مقادیر انرژی $E(k)$ و ویژه توابع $\psi(x)$ آن با حل معادله شرودینگر به صورت زیر به دست می آید^۱:

$$\psi(x) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1-1)$$

نکته ۱-۱: از مدل ساده دیگر با تقریب بهتری نسبت به مدل الکترون آزاد که اثرات یون ها را نیز در نظر می گیرد، مدل ژلیم^۲ است. با تقریب اول اثرات یون های مثبت هسته ها به صورت یک توزیع یکنواخت از بار یون های مثبت در فضای بلور در نظر گرفته می شود که آن به دلیل دور بودن الکترون های رسانش از یون ها می باشد. بنابراین در این تقریب، انرژی پتانسیل کل سیستم عبارت است از: برهم کنش گاز الکترونی با یک پتانسیل الکتریکی یکنواخت مثبت و برهم کنش کولنی الکتروستاتیکی بین الکترون ها. شرایط مرزی در یک جامد متناهی، تأثیر به سزایی در نحوه ی توزیع الکترونی در آن می گذارد.

۱. یادآوری از فیزیک حالت جامد ۱.

۳-۱ مدل درود^۱

برای اولین بار درود، یک گاز الکترونی را در مجاورت یون‌های مثبت (پتانسیل سخت یونی) با برخورد کاملاً الاستیک بین الکترون و یون‌ها در نظر گرفت. مدل درود مانند هر مدل دیگری دارای مفروضاتی است که عبارت هستند از:

• الکترون‌های متحرک فقط با هسته‌های یونی برخورد می‌کنند که در فضا جایگزیده هستند.

- الکترون‌ها در بین برخوردها هیچ گونه برهم‌کنشی نه با هم و نه با یون‌ها ندارند.
- برخورد از نوع لحظه‌ای است که فقط باعث تغییر جهت سرعت الکترون‌ها می‌شود.
- الکترون‌ها، در بین دو برخورد پی در پی به تعادل گرمایی می‌رسند.

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 می‌باشد که آن را می‌توان برابر با زمان واهلش^۲ الکترون در نظر گرفت. زمان واهلش، زمان لازم برای رسیدن الکترون‌ها به تعادل گرمایی است.

۱-۳-۱ تقریب زمان واهلش

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

$$\vec{J} = \rho \vec{v} = -\frac{ne}{m_e} \vec{p} \quad (۲-۱)$$

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

1. The Drude model
2. Relaxation time

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

بنابراین متوسط تغییرات اندازه حرکت قبل از برخورد برابر است با:

$$\delta \vec{p} = \vec{p}(t+\delta t) - \vec{p}(t) = \left(\vec{f}(t) - \frac{\vec{p}(t)}{\tau}\right)\delta t + O(\delta t)^2 \quad (4-1)$$

که در رابطه (۴-۱) $\vec{f}(t) = \partial \vec{P} / \partial t$ برابر با نیروی خارجی اعمالی بر الکترون است که در آن $O(\delta t)^2$ بزرگی مرتبه دوم این تغییرات است. با در نظر گرفتن $\delta t \rightarrow 0$ می توان از جملات مرتبه $O(\delta t)^2$ به بالا صرف نظر کرد و بنابراین:

$$\frac{d\vec{p}(t)}{dt} = -\frac{\vec{p}(t)}{\tau} + \vec{f}(t) \quad (5-1)$$

اگر چنین سیستم الکترونی را تحت اثر میدان الکتریکی یکنواخت $\vec{E}$ قرار دهیم نیروی اعمالی بر هر الکترون برابر $\vec{f}(t) = -e\vec{E}$ است که در حالت پایا $\frac{d\vec{p}(t)}{dt}$ برابر با صفر است. از این رو با توجه به رابطه (۵-۱)، اندازه حرکت الکترون ها نتیجه می شود:

$$-\frac{\vec{p}(t)}{\tau} - e\vec{E} = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{p}(t) = -\tau e\vec{E} \quad (6-1)$$

$$\vec{V} = \frac{-e\vec{E}\tau}{m}, \quad \vec{J} = -ne\vec{V} \quad (7-1)$$

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

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m_e} \quad (8-1)$$

زمان واهلش برای فلزات با چگالی $n = 10^{22} - 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ برابر $\tau = 10^{-14} - 10^{-15} \text{ fs}$ خواهد شد. با توجه به مدل درود، و قضیه همپاری انرژی در مکانیک آماری، می توان وابستگی سرعت متوسط الکترون ها با دما را به دست آورد.

$$\frac{1}{2}m_e \langle v^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T \quad (9-1)$$

از رابطه (۱-۹) می‌توان سرعت متوسط را استخراج نمود و با در نظر گرفتن زمان واهلش سیستم، مقدار پویش آزاد میانگین^۱ (مسافت آزاد بین دو برخورد متوالی) $\lambda = 0.1 - 1 \text{ nm}$ را تعیین می‌شود که تقریباً با فاصله بین اتمی جامدات معادل می‌باشد. در ادامه نشان خواهیم داد، هرچند که نتایج مدل درود 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.

۱-۳-۲ شکست‌های مدل درود

• ظرفیت گرمایی ویژه

از شکست‌های این مدل، به‌دست آوردن مقدار ظرفیت گرمای الکترونی در جامدات است. با در نظر گرفتن یک سیستم گاز الکترونی بدون برهم‌کنش و قضیه همپاری انرژی^۲ (از مکانیک آماری آموخته‌ایم) می‌توان انرژی چنین سیستمی را به‌دست آورد که با استفاده از آن و تعریف ظرفیت گرمای ویژه به‌صورت $C_{cl} = \partial E / \partial T$ ، رابطه زیر را که نشان دهنده عدم وابستگی دمایی ظرفیت گرمایی است (عبارت دولن و پتی) نتیجه گرفت. در صورتی که تجربه نشان می‌دهد ظرفیت گرمایی ویژه جامدات وابستگی دمایی دارد.

$$E = \frac{3}{2} n k_B T \Rightarrow C_{cl} = \frac{3}{2} n k_B \quad (1-10)$$

نکته ۱-۲: ظرفیت گرمایی ویژه فلزات در دماهای پایین به‌صورت $C_V = \gamma T + \alpha T^3$ می‌باشد که در آن γT مربوط به سهم الکترونی و αT^3 مربوط به سهم ارتعاشات شبکه‌ای (فونون) در ظرفیت گرمایی ویژه است که از درس فیزیک حالت جامد ۱ به یاد داریم.

1. Mean Free Path

۲. به ازای هر جمله انرژی با توان دوم به‌صورت $\alpha q_i^2 / 2$ (که در آن q_i مؤلفه مختصات مکانی یا اندازه حرکت است) می‌توان معادل دمایی $k_B T / 2$ را به آن نسبت داد.

نکته ۱-۳: سهم الکترونی γT در گرمای ویژه فلزات با ضریب T/T_F ، خیلی کوچک تر از مقداری است که از مدل درود استخراج می شود. در اینجا T_F دمای فرمی است که با انرژی فرمی $\epsilon_F = k_B T_F$ معادل است (نسبت T/T_F از مرتبه ۰/۰۱ می باشد).

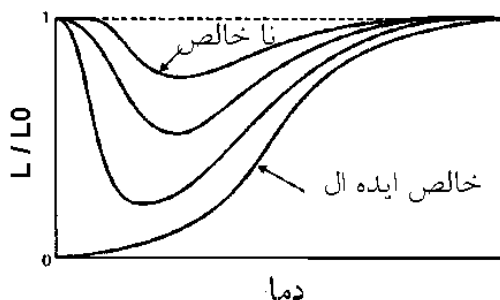
• رسانایی گرمایی و قانون ویده-فرانتس

از دیگر شکست های مدل درود، محاسبه نسبت ویده-فرانتس $\frac{\kappa}{\sigma}$ است که در آن κ رسانندگی گرمایی و σ رسانندگی الکتریکی می باشد. طبق تعریف، جریان گرمایی در واحد زمان بر واحد سطح، $\vec{J}_q$ برابر است با:

$$\vec{J}_q = -\kappa \vec{\nabla} T \quad (11-1)$$

در نظریه درود فرض بر این است که رسانندگی انرژی گرمایی تقریباً از طریق الکترون ها انتقال می یابد که با نظریه انرژی جنبشی می توان آن را به صورت زیر بیان نمود.

$$\kappa = \frac{1}{3} \langle v^2 \rangle \tau C_{el} \quad (12-1)$$



شکل ۱-۲. اثر دما بر عدد لورنتس برای مواد خالص ایده ال و ناخالص را نشان می دهد.

با استفاده از روابط (۸-۱) و (۱۲-۱) نسبت ویده-فرانتس $\frac{\kappa}{\sigma}$ به دست می آید

و نیز تقسیم آن به دما، عدد لورنتس $L = \frac{\kappa}{\sigma T}$ نامیده می شود. با توجه به مقادیر σ ، κ

به دست آمده از مدل درود، عدد لورنتس برابر $\approx 1/1 \times 10^{-8} \text{ W}\Omega\text{K}^{-2}$ $L = \frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{3}{2} \frac{k_B}{e^2}$ است. ولی تجربه نشان می‌دهد مقدار L در دمای اتاق برای تعدادی از فلزات تقریباً مقداری ثابت و برابر $\approx 2/5 \times 10^{-8} \text{ W}\Omega\text{K}^{-2}$ است. در آن زمان درود اشتباهاً مقدار رسانندگی را σ نصف مقداری که در رابطه (۸-۱) داده شده است به دست آورد که این اشتباه، مرتبه بزرگی عدد لورنتسی را نتیجه می‌داد که با تجربه $L_{\text{exp}} \approx 2/5 \times 10^{-8} \text{ W}\Omega\text{K}^{-2}$ همخوانی خوبی پیدا نموده بود. همان‌طور که ملاحظه می‌شود، این کمیت مستقل از دما است. در تجربه مطابق شکل (۲-۱) در دمای پایین‌تر از دمای اتاق عدد لورنتس کاهش می‌یابد که مخالف نتیجه مدل درود است. هرچند در ظاهر امر، موفقیت این مدل در به دست آوردن مرتبه بزرگی آن ضریب می‌باشد، ولی عدم توافق در پارامترهای منزوی این نسبت (یعنی κ, σ)، از نقایص این نظریه به‌شمار می‌آید.

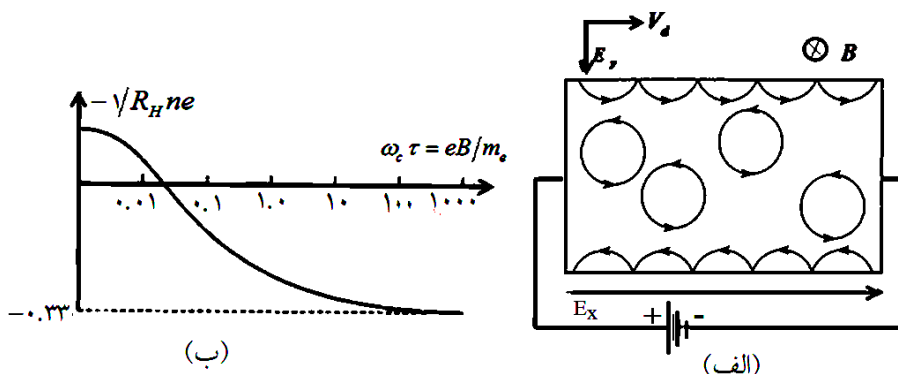
• اثر هال

آزمایش اثر هال در فلزات نشان دهنده آن است که حامل‌های جریان، الکترون‌ها می‌باشند. در این آزمایش یک نوار فلزی حامل جریان الکتریکی تحت اثر دو میدان، یکی میدان الکتریکی طولی E_x و دیگری میدان مغناطیسی عمود بر نوار قرار داده می‌شود (شکل (۳-۱) الف). نیروی مغناطیسی باعث می‌شود که الکترون‌ها در عرض نوار تجمع نمایند و یک میدان الکتریکی عرضی E_y را که ناشی از گرادیان چگالی توزیع بار در آن راستا است، ایجاد نماید. ضریب هال R_H به صورت رابطه (۱۴-۱) تعریف می‌شود.

$$\frac{E_y}{E_x} = \omega_c \tau \quad (13-1)$$

$$R_H = \frac{E_y}{BJ_x} = \frac{\omega_c \tau}{\sigma B} = \frac{E_y}{\sigma B E_x} = - \frac{1}{ne} \quad (14-1)$$

در اینجا $\omega_c = \frac{eB}{m_e}$ فرکانس زاویه‌ای سیکلوترون کلاسیکی و τ زمان پراکندگی طبق نظریه درود توسط یون‌ها می‌باشد.



شکل ۳-۱. الف) طرح شماتیکی از آزمایش هال. ب) اثرات میدان مغناطیسی بر ضریب هال.

رابطه (۱-۱۴) نشان دهنده عدم وابستگی ضریب هال به میدان مغناطیسی B و زمان پراکندگی τ می باشد. در صورتی که نتایج تجربی وجود وابستگی به میدان مغناطیسی را نشان می دهد (شکل (۱-۳)).

۴-۱ نظریه نواری جامد

در این بخش به معرفی ساختار الکترونی بلور^۱ خواهیم پرداخت. نشان خواهیم داد که چگونه با در دست داشتن خواص الکترونی اتم های منزوی به خصوصیات بلور دست یابیم. هر اتم منزوی از تعدادی اربیتال الکترونی که به هسته مقید می باشند تشکیل شده است. با کنار هم قرار دادن اتم ها به طور منظم می توان یک شبکه بلورین همراه با هم پوشانی اربیتال های اتمی ساخت. دسته ای از این اربیتال های اتمی که به هسته اتم نزدیک می باشند هیچ گونه هم پوشانی با اربیتال های اتمی اتم های همسایه نزدیک خود ندارند. از این رو، این اربیتال ها شکل اتمی خود را حفظ نموده و الکترون هایشان کاملاً جایگزیده در اطراف هسته می باشند. دسته دیگر، اربیتال هایی هستند که از هسته دور می باشند که به علت هم پوشانی شان با اربیتال های اتم های همسایه پدیده هیبریداسیون را به وجود می آورند. به این دسته از الکترون ها را الکترون های ظرفیت یا رسانش گویند. توابع موج این دسته از الکترون ها که متأثر از پتانسیل شبکه هستند، دارای توابع

۱. متشکل از اتم های که به طور منظم در فضا آرایش یافته اند.

موج گسترده می‌باشند که به توابع موج بلوخ معروف هستند که در ادامه به آن خواهیم پرداخت. گروه اول جدول تناوبی، سدیم، پتاسیم، روییدم و سزیم، فقط یک الکترون در بالاترین تراز انرژی اشغال شده‌شان دارند. وابستگی کم این الکترون با هسته اتم و هم‌پوشانی زیاد اربیتال‌شان با اربیتال‌های اتم‌های همسایگان نزدیک به خود باعث گستردگی توابع موج این دسته از الکترون‌ها می‌شود. این گروه از اتم‌ها قادرند تک الکترون خود را به راحتی از دست داده و دریایی از الکترون‌ها را ایجاد نمایند که یون‌های مثبت در آن‌ها شناورند. این الکترون‌ها به مانند کلافی یون‌ها را در بر می‌گیرند و باعث پایداری فلزات می‌گردند.

همان‌طور که در بالا به آن اشاره شد، در تقریب اول می‌توان الکترون‌های رسانش فلزات را به مانند یک گاز الکترونی بدون برهم‌کنش که از آمار فرمی - دیراک (به دلیل فرمیون بودن‌شان) تبعیت می‌کنند نگاه کرد. اما این مدل، قادر به پاسخگویی همه سؤالات درباره فلزات نمی‌باشد.^۱ نظریه نوارهای انرژی، ما را به توصیف خواص الکترونی و طبقه‌بندی مواد به رسانای خوب، نیم‌رسانا و نارسانا قادر می‌سازد.

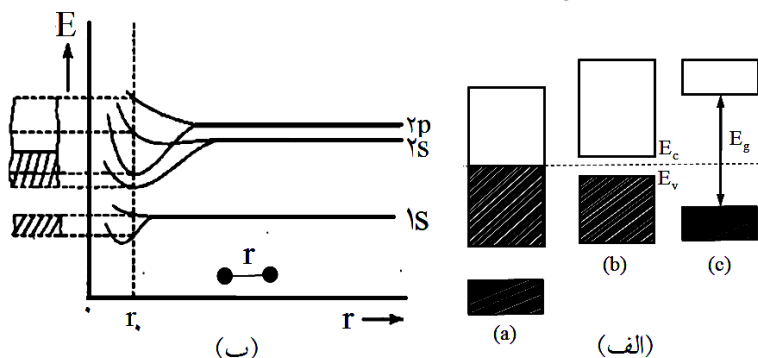
۱-۴-۱ نوارهای انرژی در جامدات

برای درک مفهوم نوارهای انرژی، بهتر است از ترازهای انرژی تک اتم‌های منزوی شروع کنیم. با کنار هم قرار دادن این اتم‌ها با یک نظم شبکه‌ای، یک جامد بلورین تشکیل می‌شود. فاصله تعادلی بین اتم‌ها و نوع شبکه طوری است که انرژی کل سیستم حداقل مقدار خود را داراست. حال به طور ذهنی فرض کنیم فاصله بین اتم‌ها خیلی بیش از فاصله تعادلی در حالت بلوری باشد. در این حالت اربیتال‌های اتمی اتم‌ها هیچ‌گونه هم‌پوشانی با هم ندارند. در نتیجه، هر اتم انرژی اتمی مخصوص به خود (حالت منزوی) را دارد. بنابراین انرژی‌های الکترونی مجاز در این جامد با فاصله بین اتمی بسیار بزرگ، همان انرژی‌های اتمی اتم‌های منزوی با تبهگنی N (تعداد کل اتم‌های بلور) می‌باشد (شکل (۱-۴) الف به ازای $r_0 \gg r$). با نزدیک شدن اتم‌ها نسبت به هم و رسیدن به فاصله‌ی ترازمندی^۲ r_0 ، اربیتال‌های اتمی با یکدیگر هم‌پوشانی پیدا

۱. مانند: اختلاف رسانندگی در فلزات و ...

۲. فاصله‌ای است که انرژی بلور در آن به حداقل ممکن می‌رسد.

کرده و دافعه الکترون ناشی از این هم پوشانی باعث رفع تبهگنی در ترازهای انرژی می گردد. از این رو مقادیر انرژی ترازها با فاصله بین اتمی تغییر می کنند. از طرف دیگر نحوه ی آرایش یون ها (نوع شبکه) در هم پوشانی اربیتال ها و تغییرات ترازهای انرژی نقش مهمی بازی می کند. با توجه به اصل طرد پائولی و نیز اثرات پتانسیل اتم های همسایه، جدایی ترازها و توزیع انرژی شان به صورت یک دسته تراز اتمی با پهنای w را حادث می شود (قسمت هاشور خورده شکل (۴-۱) الف). با توجه به شکل (۴-۱) ب در یک فاصله بین اتمی r_0 ، هم پوشانی اربیتال های اتمی مربوط به ترازهای انرژی مختلف، باعث پهن شدن توزیع ترازهای اتمی و تشکیل نوارهای انرژی می شود که با ناحیه هاشور خورده نشان داده شده است. بین این دسته ترازهای اتمی پهن شده، گاف انرژی E_g یا منطقه ممنوعه انرژی ایجاد می شود، به این معنی که نمی توان الکترونی با این انرژی را در چنین سیستمی یافت.



شکل ۴-۱. نمایش شماتیک الف) پراشگری الکترونی نوار انرژی برای (a) فلزات (b) نیم رسانا (c) نارسا (ب) اثرات جدایی بین اتمی در پهن شدن ترازهای انرژی در بلور بریلیوم $2s, 2p$ با فاصله بین اتمی r .

شکل (۴-۱) ب نوارهای انرژی بلور بریلیوم با جدایی اتمی r_0 و هم پوشانی اربیتال ترازهای $1s, 2s, 2p$ که منجر به هیبرید شدن^۱ ترازهای $2s, 2p$ می شود را نمایش می دهد. به طور خلاصه، انرژی الکترون ها در یک اتم منزوی می تواند فقط یک سری ترازهای انرژی کوانتیزه باشند در صورتی که در یک بلور الکترون ها می توانند

۱. یکسان شدن انرژی ترازهای انرژی اربیتال های مختلف ناشی از هم پوشانی اربیتال هایشان.

یک پهنای پیوسته‌ای از انرژی را به خود بگیرند که به آن نوار انرژی گویند. در ادامه این فصل به مدل‌هایی برای به‌دست آوردن نوارهای انرژی اشاره خواهد شد تا به نحوه‌ی پهن شدن گسی ترها آشنا شویم.

در فیزیک حالت جامد، اندازه و بعد جامد از اهمیت بسیاری برخوردار است. رفتار الکترونی الکترون‌ها که در ابعاد بزرگ حاکم است می‌تواند در ابعاد کوچک حاکم نباشد. با در دست داشتن یک جامد با ابعاد ماکروسکوپی (مزوسکوپی به بالا)، ما را به خصوصیت جامدی با ابعاد نامتناهی (جامد حجمی)^۱ نزدیک می‌کند. در چنین جامدی، نسبت سطح جامد به حجم آن بسیار کوچک می‌باشد. از این رو سهم اثرات سطحی بر رفتار الکترونی الکترون‌های جامد ناچیز است. برای محاسبات چنین سیستمی (جامد حجمی) بایستی شرایط مرزی را به گونه‌ای مشخص نماییم که نه تنها مسئله را به سادگی حل نماییم بلکه تأثیری بر خواص واقعی بلور نگذارد. برای مثال اگر شرایط مرزی با پتانسیل بی‌نهایت را قرار دهیم (مسئله چاه پتانسیل با دیواره‌های بی‌نهایت) پاسخ مسئله امواج ایستاده^۲ برای الکترون‌ها است که قادر به توصیف خواص رسانندگی بلور نخواهد بود. خواص فیزیکی جامدات مانند انتشار جریان الکتریکی، گرمایی و ... ما را می‌دارد به دنبال پاسخ موج‌رونده برای الکترون‌ها در جامدات باشیم. شرایط مرزی تکرار (تناوبی) ویژگی موج‌رونده را به الکترون‌ها می‌دهد. در واقع این شرط تکرار، مسئله یک جامد با ابعاد متناهی را به یک جامد با ابعاد نامتناهی تبدیل می‌نماید، ولی با یک شرط اضافی تناوبی که در ادامه توضیح بیشتری داده خواهد شد.

نکته ۱-۴: در ابعاد نانو به علت بالا بودن نسبت سطح به حجم، اثرات سطحی و شرایط مرزی نقش مهمی در رفتار الکترونی بلور بازی می‌کنند و خواص فیزیکی متفاوت‌تری نسبت به ابعاد بزرگ از خود نشان می‌دهد.

۱-۴-۲ نظریه بلوخ

از نقطه نظر مکانیک کوانتومی، الکترون ذره‌ای کوانتومی است که احتمال یافتن آن در فضا توسط تابع موج نسبت داده شده مشخص می‌شود. برای به‌دست آوردن تابع موج

1. Bulk

۲. سرعت گروه برای امواج ایستاده صفر می‌باشد.

الکترون، بایستی هامیلتونی سیستم را نوشت و معادله شرودینگر آن را حل نمود. هامیلتونی یک بلور متشکل از یون‌ها و الکترون‌ها، از جمع انرژی جنبشی و پتانسیل برهم‌کنشی در بین آن‌ها می‌باشد.

$$H = \frac{P_e^2}{2m_e} + \frac{P_p^2}{2m_p} + V_{ee} + V_{ep} + V_{pp} \quad (15-1)$$

انرژی جنبشی بلور از جمع انرژی جنبشی الکترون‌ها $\frac{P_e^2}{2m_e}$ و یون‌ها $\frac{P_p^2}{2m_p}$ ، و انرژی پتانسیل برهم‌کنشی از جمع سه جمله تشکیل می‌شود که عبارتند از: پتانسیل برهم‌کش کولنی الکترون-الکترون V_{ee} ، الکترون-یون V_{ep} و یون-یون V_{pp} . این هامیلتونی یک هامیلتونی بس ذره‌ای^۱ است که قابل حل دقیق نمی‌باشد. با استفاده از تقریب‌های ساده، می‌توان شکل هامیلتونی بس ذره‌ای را ساده‌تر نمود. اولین تقریب برای ساده‌سازی که کاربردی‌تر و قابل قبول‌تر می‌باشد، تقریب اوپنهایمر (یا آدیاباتیک) است. با توجه به این‌که جرم الکترون m_e در مقایسه با جرم یون‌ها m_p بسیار کوچک می‌باشد^۲ از این‌رو تحرک الکترون‌ها خیلی بیشتر از یون‌ها است. با در نظر گرفتن تقریب اوپنهایمر می‌توان سهم انرژی جنبشی یون‌ها را در مقایسه با انرژی جنبشی الکترون‌ها نادیده گرفته و یون‌ها را در بلور فریز شده در نظر بگیریم. با این تقریب به دلیل ثابت بودن مکان یون‌ها سهم پتانسیل برهم‌کش V_{pp} مقدار ثابتی خواهد بود. اثر این مقدار ثابت در هامیلتونی فقط انرژی نواری را یکسان جابه‌جا می‌کند که در فیزیک مسئله، هیچ‌گونه تاثیری ندارد. بنابراین با انتخاب یک سطح انرژی صفر می‌توان آن جمله را نیز کنار گذاشت. فقط جمله‌ای از هامیلتونی که هنوز سیستم را بس ذره‌ای نگاه می‌دارد عبارت برهم‌کش V_{ee} است.

$$H = \frac{p_e^2}{2m_e} + V_{ee} + V_{ep} \quad (16-1)$$

پتانسیل V_{ee} را می‌توان به صورت جمع پتانسیل تبادلی-همبستگی V_{xc} و پتانسیل الکترواستاتیکی V_h (پتانسیل هارتری) نوشت. محاسبه V_{xc} از دشواری‌های فیزیک می‌باشد