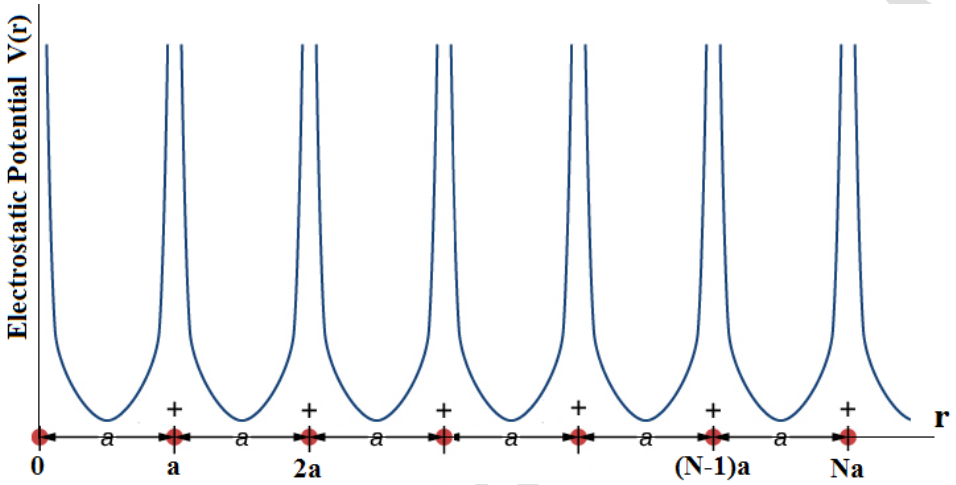
الفصل السابع
نظرية الحزم في المواد الصلبة
(Band Theory in Solids)

الجهد الدوري ونظرية بلوخ Periodic Potential and Bloch Theory

ان القلوب الايونية الموجبة في البلورة تترتب على شكل صفوف دورية منتظمة. وتكون في حالة غير مستقرة حيث تهتز حول مواقع اتزانها. وتتحرك الالكترونات الحرة بوجود جهد دوري ناتج من ترتيب قلوب الايونات الموجبة في الشبيكة وكما مبين في الشكل (5).



شكل (5): جهد بلوخ الدوري في بعد واحد

لقد تمكن بلوخ من دراسة الجهد الكلي لدورية الشبيكة اي جهد البلورة واستنتج ان الجهد يتضمن جزئين اساسيين هما:

اولاً: جهد كهروستاتيكي $V_i(\vec{r})$ ينشأ من تفاعل الكترون التوصيل مع جميع القلوب الايونية الموجبة التي تشكل شبيكة البلورة. ان هذا الجزء من جهد البلورة يجب ان يمتلك الدورية الانتقالية للشبيكة المثالية نفسها $(\vec{T})$ (اي عند اهمال اهتزاز القلوب الايونية الموجبة).

ثانياً: جهد $V_e(\vec{r})$ ينشأ من تفاعل الكترون التوصيل وبقية الكترونات التوصيل (الكترون بلوخ) المتحركة خلال شبيكة البلورة. ان هذا الجهد يجب ان يكون جهداً دورياً لكي تتحقق متطلبات التعادل الكهربائي في البلورة والاخذ بنظر الاعتبار فكرة التنافر بين الكترون واخر.

وعلى هذا الاساس يمكن كتابة الجهد الكلي للبلورة:

$$V(\vec{r}) = V_i(\vec{r}) + V_e(\vec{r}) \quad \ldots\ldots (1)$$

والان بعد معرفة الجهد الكلي يمكن كتابة معادلة شرودنجر بالصيغة الرياضية التالية:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - e\,V(\vec{r})\right]\psi = E\psi \quad \ldots\ldots (2)$$

والان يمكن كتابة الجهد الكلي الدوري لالكترون التوصيل بالصيغة التالية:

$$u(\vec{r}) = -e\,V(\vec{r}) \quad \ldots\ldots (3)$$

ويتعويض معادلة (3) في (2) نحصل على:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + u(\vec{r})\right]\psi = E\psi \quad \ldots\ldots (4)$$

لقد تمكن بلوخ من حل المعادلة (4) لتعطي نوعين من الحلول:

$$\psi(\vec{r}) = u_k(\vec{r})\, e^{\pm i\mu\vec{r}} \quad \ldots\ldots (5)$$

$$\boldsymbol{\psi(\vec{r}) = u_k(\vec{r})\, e^{\pm i\vec{k}\vec{r}}} \quad \ldots\ldots (6)$$

بما ان الحل الاول معادلة (5) غير محدود حيث ان الدالة الموجية $\psi(\vec{r})$ تؤول الى المالانهاية عندما تؤول $\vec{r}$ الى المالانهاية لذلك فهذا الحل يمثل امواج متقدمة (progressive wave) غير موجودة في الشبيكة.

اما الحل الثاني معادلة (6) فيمثل امواج واقفة (stationary wave) وتسمى هذه المعادلة بنظرية بلوخ.

في الحلين السابقين $\vec{k}$ هي متجه الموجة الذي يرافق طول موجة ديبرولي (de Broglie) اي $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}$ وزخم ديبرولي $\vec{P} = \hbar\vec{k}$ حيث يدعى الزخم $\vec{P}$ بالزخم البلوري للالكترون.

ان $u_k(\vec{r})$ هي دالة موجية لا تتوقف على الزمن ولكن على متجه الموجة $\vec{k}$ فقط الذي ينسب عادة الى زخم الالكترون فضلاً عن امتلاكها تماثلاً انتقالياً $(\vec{T})$ (Translational Symmetry) اي لها نفس دورية الشبيكة وهذا يعني:

$$u_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r} + \vec{T}) \quad \ldots\ldots (7)$$

حيث ان $\vec{T}$ تمثل المتجه الانتقالي للشبيكة. وبتعويض المعادلة (7) في معادلة (6) نحصل على:

$$\psi(\vec{r} + \vec{T}) = u_k(\vec{r} + \vec{T})\, e^{i\vec{k}(\vec{r}+\vec{T})}$$

$$\psi(\vec{r} + \vec{T}) = \psi_k(\vec{r})\, e^{i\vec{k}\vec{T}} \quad \ldots\ldots (8)$$

وتدعى هذه المعادلة بدالة بلوخ.

ان ملخص نظرية بلوخ تنص على ان الدوال الذاتية لمعادلة موجة مرافقة لالكترون تحت تأثير جهد دوري تكون بصيغة حاصل ضرب موجة مستوية متنقلة $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ مع الدالة $u_k(\vec{r})$ ذات دورية مثل تلك لشبيكة البلورة $\vec{T}$.

د. سلام أمين يوسف