

الفصل الحادى عشر

النظرية الكمية للإلكترون الحر :
Sommerfeld Quantum free electron theory.

تعود فشل النظرية الكلاسيكية للغاز الإلكتروني الحر في تفسير القيم المقاسة للسعة الحرارية heat capacity والقابلية المغناطيسية magnetic susceptibility للفلزات إلى الفرض الأساسى فى النظرية بأن الإلكترونات تشبه الغاز التام وتتبع احصائيا احصاء ماكسويل وبولتزمان حيث يمكن لاي عدد من الإلكترونات أن يكون على نفس مستوى الطاقة .

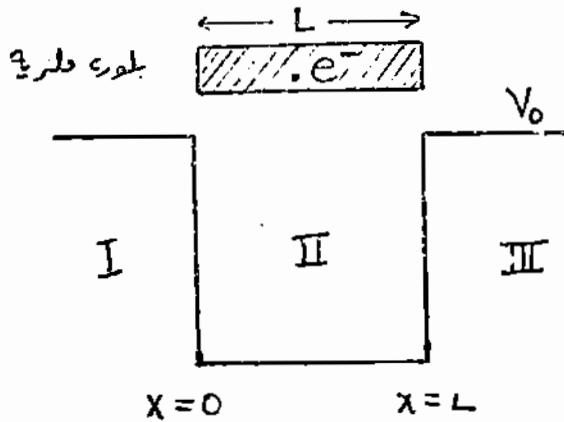
وهذا ما لا يسمح به مبدأ باولى Exclusion principle الذى ينص على أن كل مستوى من مستويات الطاقة يشغله إلكترونين فقط
 $S = \pm \frac{1}{2}$

لذلك ادخل سومر فيلد المبدأ الكمى على نظرية الإلكترون الحر الكلاسيكية وقد تمكن بذلك تفسير المزيد من الحقائق العلمية المعروفة عمليا وأن لم تستطع هذه النظرية تفسير تلك الفروق الكبيرة فى معاملات توصيل المواد المختلفة .

الغاز الإلكتروني الكمى : The quantum electron gas

اعتبر بلورة فلزية . تكون طاقة الجهد للإلكترون فى كل مكان بداخلها واحدة وتساوى صفرا . يمنع سطح البلورة خروج أى إلكترون حر من داخلها وذلك لوجود حاجز جهد مرتفع وليكن ارتفاعه V_0

معادلة شرودنجر للإلكترون بداخل البلورة أى المساقط فى بئر الجهد ذو الارتفاع V_0 هى



$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m E}{h^2} \psi = 0$$

الحل العام لهذه المعادلة يعطى الدالة الموجية ψ للإلكترون داخل الفلز
أى داخل بئر لجهد في المنطقة II على الصورة

$$\psi = A \sin \frac{2\pi}{h} \sqrt{2mE} x + B \cos \frac{2\pi}{h} \sqrt{2mE} x$$

أما في خارج البلورة ، وإذا لم يكن ارتفاع بئر الجهد V_0 كبيرا فيجوز
حدوث ظاهرة الانفاق Tunnel effect كما في ميكروسكوب المجال الأيوني
وتكون الدالة الموجية على الصورة :

$$\psi = C e^{-\frac{2\pi}{h} \sqrt{2m(V_0 - E)} x}$$

III

$$\psi I = D e \frac{2\pi}{h} \sqrt{2m (V_0 - E)} \cdot X$$

حيث L هو بعد البلورة crystal dimension . وبتطبيق شروط الحدود boundary condition :

$$\psi = 0 \quad \text{at} \quad x = 0 \quad \& \quad x = L$$

نحصل على

$$\begin{aligned} \psi L &= A \sin \frac{2\pi}{h} \sqrt{2mE} \cdot L \\ &= 0 \end{aligned}$$

وتتحقق هذه المعادلة عندما يكون :

$$\frac{2\pi}{h} \sqrt{2mE} \cdot L = n\pi$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

وبذلك يكون للالكترون الحر داخل البلورة مستويات للطاقة تحدها

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2} \cdot n^2$$

عندما تكون L كبيرة فان مستويات الطاقة تكون قريبة جدا من بعضها . فمثلا اذا كان $L = 1 \text{ cm}$ فان الفرق بين مستويين متتاليين للطاقة الالكترونية يكون $3.5 \times 10^{-19} \text{ eV}$

إذا اعتبرنا بلورة مكعبة طول ضلعها L cm تكون الدالة الموجية بداخلها هي :

$$\Psi = A \sin \frac{n_x \pi}{L} \cdot x \sin \frac{n_y \pi}{L} \cdot y \sin \frac{n_z \pi}{L} \cdot z$$

وتكون مستويات الطاقة الإلكترونية هي

$$E (n_x n_y n_z) = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

مما سبق يتضح أن طاقة الإلكترونات الحرة داخل أى فلز لاتأخذ أى قيمة كما تنص عليها النظرية الكلاسيكية .

وبتطبيق مبدأ باولى وعدم إمكان وجود أى إلكترونين لهما نفس الأعداد الكمية الأربعة لذلك فإن كل مستوى للطاقة لايشغله سوى إلكترونين مغزليهما متعاكسين opposite spin.

ولهذا السبب أصبح احصاء ماكسويل وبولتزمان غير صالح للتطبيق على حالة الكترونات الفلز ويجب تطبيق الاحصاء الكمي بدلا منه

الاحصاء الكمي : Quantum statistics.

احصاء بوز واينشتاين وفيرمي ديراك Fermi Dirac

The Bose — Einstein statistics

نستخدم هنا أيضا فراغ الطور ذو الإبعاد x, y, z, p_x, p_y, p_z

وقد استبدلنا بالسرعات ومركباتها كمية الحركة $p = m v$ يكون حجم الخلية الصغيرة element of volume في هذا الفراغ هو

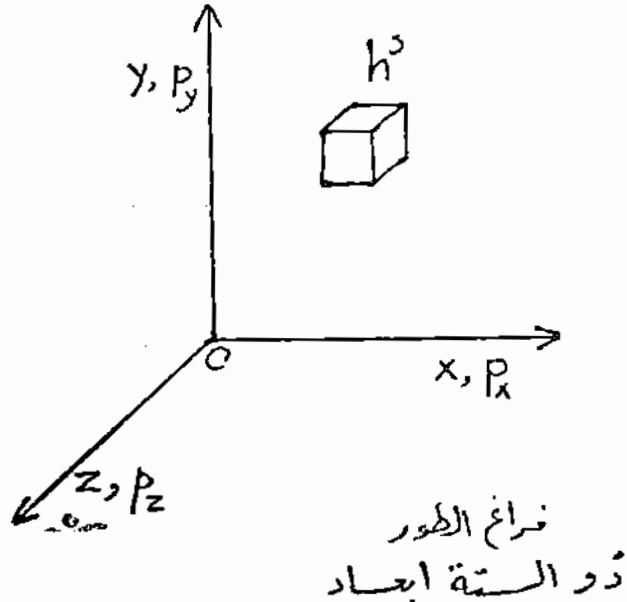
$$H = \int dx dy dz dp_x dp_y dp_z$$

باستخدام الميكانيكا الكلاسيكية فان مكان وكمية حركة أى جسيم يمكن تحديدهما بأى درجة من الدقة ، ولذلك يمثلته نقطة هندسية في فراغ الطور .

أما إذا ادخلنا الميكانيكا الكمية quantum mechanics فانه يوجد حد limit للدقة في تحديد المكان وكمية الحركة معا وهو ما يميله مبدأ عدم التحديد لهيزنبرج .

اصغر حجم في فراغ الطور يمكن لنا أن نحزم بأن الجسيم موجود بداخله هو h^3 حيث h هو ثابت بلانك .

ويستنتج ذلك مباشرة باستخدام مبدأ هيزنبرج : —



شكل (١١ - ٢)

$$\Delta x \Delta p_x = h$$

$$\Delta y \Delta p_y = h$$

$$\Delta z \Delta p_z = h$$

نطلق لفظ غرفة أو حجرة compartment على الحجم h^3 للتمييز بينه وبين الخلية Cell ذات الحجم H^3 وهو حجم اختياري ويشترط فيه فقط أن تكون أبعاده $dx dy dz$ صغيرة

بالنسبة لإبعاد المجموعة xyz وكمية حركة الجسيمات $p_x p_y p_z$

$$n = \frac{H^3}{h^3} = \text{عدد الغرف في الخلية}$$

عددالنقط في فراغ الطور داخل الخلية $N_i = i$

تحدد مثل الاعداد N_i في الخلايا المختلفة الحالة الماكروية للمجموعة وبالتالي خواصها المحسوسة .

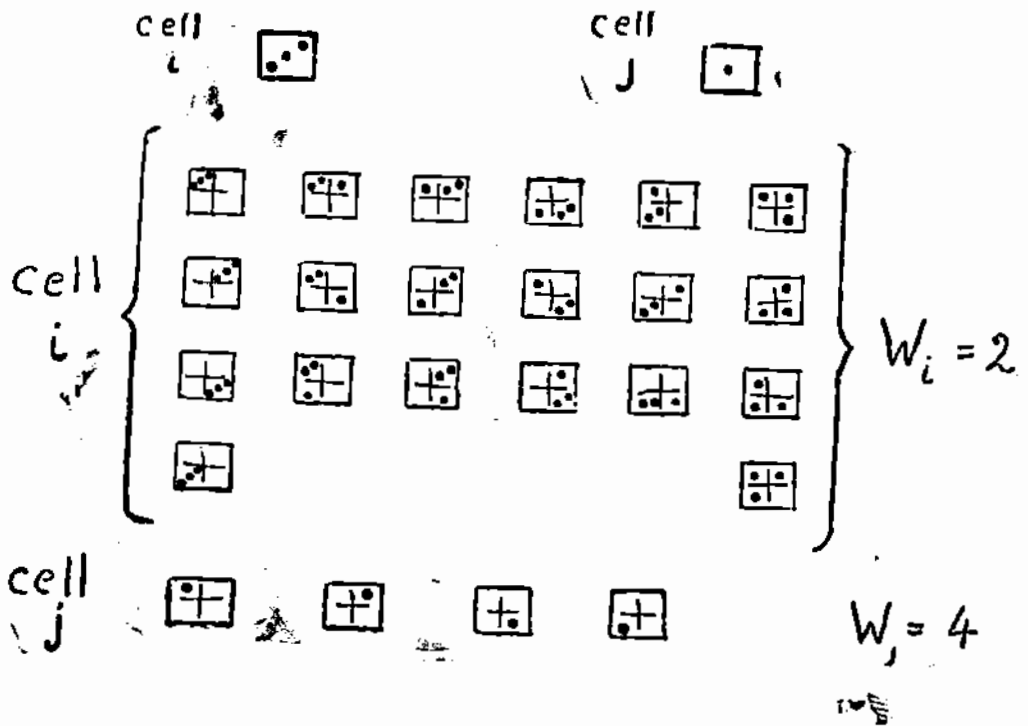
في احصاء ماكسويل وبولتزمان تتغير الحالة الميكروية بتبادل عدد من النقط بنفس العدد بين خليتين ولكن ذلك لا يؤثر على الحالة الماكروية .
وتغير الحالة الميكروية يفرض أن يكون لكل نقطة شخصيتها الذاتية .

« وهذا هو ما نلغى وجوده في الاحصاء الكمي »

اذ لا يوجد معنى من وراء التمييز بين جزىء وآخر في غاز وفرض شخصية ذاتية لكل .

لذلك فاننا نعرف الجزيئات بتقط في فراغ الطور وليس بحروف a, b, c
 كما سبق في احصاء ماكسويل وبولتزمان وهذا هو التعديل الاول في الاحصاء
 الكمي وتطبيقه يعطى احصاء بوز واينشتين Bose — Einstein statistics
 اما التعديل الثاني فيأتى بسبب وجود قيد يضعه مبدأ باولي على عدد النقط
 التي يمكن ان تشغل كل حجرة كما هو الحال بالنسبة للإلكترونات (اثنين
 في كل غرفة وتطبيق هذا الشرط أيضا يعطى احصاء فيرمي
 وديراك

Fermi — Dirac statistics.



احصاء بوز — اينشتين :

ينطبق على الجسيمات التي لاتخضع لمبدأ باولي مثل الفوتونات

والجسيمات التي لها دالة موجيه متماثلة Symmetric wave function
ولذلك يمكن لاي عدد من النقط ان تشغل اى حجرة فى الخلية .

اعتبر المثال التالى :

نفرض ان لدينا اربعة غرف compartment فى كل خلية cell وان هناك خليتين فقط واربعة نقط (كالمثال الذى اوردناه عند الكلام عن احصاء ماكسويل وبولتزمان) .

باهمال الشخصية الذاتية لكل نقطة (فى احصاء ماكسويل عرفنا النقطة بالحروف a b c . . . لاعطائها شخصيات ذاتية) نجد ان هناك عدد ٢٠ طريقة مختلفة لترتيب ٣ نقط فى الخلية i وعدد ٤ اربعة طرق لترتيب نقطة واحدة فى الخلية j وهذا يعنى وجود احتمال ديناميكى حرارى لكل خلية يساوى عدد الطرق التى يمكن بها ترتيب النقط فى الخلية .

اذا كان W_i & W_j هما الاحتمالات فى الخليتين i & j فى هذا المثال و

$$W_i = 20 ; W_j = 4$$

ويكون بذلك الاحتمال الديناميكى الحرارى للحالة الماكرونية التى يمثلها ٣ نقط فى الخلية j ونقطة واحدة فى الخلية i هى

$$W = W_i \cdot W_j = 20 \times 4 = 80$$

وواضح ان هذه القيمة تختلف تماما عن $W = 4$ التى حصلنا عليها للحالة الماكرونية ٣ : ١ فى احصاء ماكسويل وبولتزمان .

وفى الحالة العامة عندما يكون هناك اى عدد من الخلايا يكون الاحتمال الديناميكى الحرارى هو

$$W = \pi W_i$$

حيث المضروب π يشمل جميع الخلايا في فراغ الطور .

العلاقة بين W و N_i :-

نفرض انناترقم الحجرات في الخلية بالارقام ١, ٢, ٣, ... الى n ونقط الطور phase point بالحروف a, b, c, ... الى N_i اذا أخذنا مثلا الخلية i يمكن ان تكون النقط في حجراتها كما يأتي :-



الخ

العدد المكتوب اولا يبين رقم الحجرة .

اولا : بما ان هناك عدد n حجرات لذلك فيوجد n طريقة لترتيب ارقام الحجرات دون تغيير في ترتيب الحروف cba

ثانيا : عدد التباديل التي يمكن بها ترتيب n عدد و N_i نقطة بحيث يبدأ الترتيب دائما برقم الحجرة هو

$$(n + N_i - 1) !$$

« وضع « ١ - ا » هنا لوجوب بدء الترتيب برقم دائما »

.. عدد الطرق المختلفة التي يمكن ترتيب بها الاعداد والنقط هي

$$n (n + N_i - 1) !$$

ثالثا : يتكرر حدوث بعض هذه الترتيبات بين عدد n حجرات
 فمثلا : —

(أ)

1ab

2c

3

4def

(ب)

3

4def

2c

1ab

الترتيب (أ) هو بعينه الترتيب (ب) ويعطى نفس الحالة الميكروئية .

لذلك نتفادى التكرار لنفس الحالة بالقسمه على $n !$

رابعا : بما ان الحروف a, b, c كلها متماثلة ولا فرق بينها لذلك

فان N_i حرفا يمكن أن تترتب في الخلية بعدد N_i الطرق يساوي $N_i !$
 وتعطى جميعا نفس الحالة الميكروئية .

لذلك نتفادى التكرار لنفس الحالة بالقسمه على $N_i !$

$$\therefore \text{عدد الحالات الميكروئية الغير متكررة} = \frac{n (n + N_i - 1) !}{n ! N_i !}$$

$$n ! N_i !$$

— اى ان الاحتمال الديناميكي الحرارى في الخاية i هو

$$W_i = \frac{(n + N_i - 1) !}{(n - 1) ! N_i !}$$

« وضعنا هنا » $n! = n(n-1)!$

ويتطبيق ذلك في المثال المعطى حيث : $n = 4$

$$N_i = 3, N_j = 1$$

نجد أن :

$$W_i = \frac{(4+3-1)!}{(4-1)! 3!} = \frac{6!}{3! 3!} = 20$$

$$W_j = \frac{(4+1-1)!}{(4-1)! 1!} = \frac{4!}{3! 1!} = 4$$

وهي نفس النتيجة التي حصلنا عليها بالعد البسيط .

أخيرا وبما أن كل حالة ميكروية للخلية i يمكن أن يقابلها أي حالة ميكروية للخلية j

لذلك يكون عدد الحالات الميكروية لجميع الخلايا وهو الاحتمال الديناميكي الحراري للمجموعة هو

$$W = \prod W_i = \prod \frac{(n+N_i-1)!}{(n-1)! N_i!}$$

دالة التوزيع لبوز واينشتين :

حالة الاستقرار أو الاتزان نحصل عليها عندما يكون الانثروبيا S أكبر ما يمكن .

ولكن $S = k \ln W$ يكون إذا شرط الاتزان هو : —

$$\delta \ln W = 0$$

$$\therefore \ln W = \sum (\ln (n + N_i - 1)! - \ln (n - 1)! - \ln N_i!)$$

وباستخدام تقريب ستيرلنج ($\ln N! = N \ln N - N$) وبإهمال العدد 1 في المعادلة بالمقارنة بالاعداد الكبيرة N_i & n نحصل على

$$\ln W = \sum (N_i + n) \ln (N_i + n) - n \ln n - N_i \ln N_i$$

وبمفاضلة المعادلة

$$\therefore \delta \ln W = \sum \left[\ln \frac{n + N_i}{N_i} \right] \delta N_i = 0$$

وباعتبار أن الطاقة الكلية للمجموعة ثابتة وكذلك عدد الجسيمات يكون :

$$\delta N = \sum \delta N_i = 0$$

$$\delta U = \sum W_i \delta N_i = 0$$

ويضرب المعادلة الاولى في $-\ln B$

والمعادلة الثانية في $-\beta$

وبالجمع مع معادلة $\delta \ln W = 0$ نحصل على :

$$\sum \left[\ln \frac{n + N_i}{N_i} - \ln B - \beta \omega_i \right] \delta N_i = 0$$

«in effect the δN_i 's are now independent»

& every term in the summation series should vanish separately

$$\therefore \ln \frac{n + N_i}{N_i} = \ln B + \beta \omega_i$$

$$\therefore N_i = \frac{n}{B \exp \beta \omega_i - 1} = n \cdot f$$

وتوضع عادة قيمة الثابت $B = 1$ حيث أن الاتفاق النظرى مع التجربة يستلزم ذلك وتكون بذلك دالة التوزيع لبوز واينشتين هي :

$$f = \frac{1}{\left[e^{\omega_i/kT} - 1 \right]}$$

$$\beta = \frac{1}{kT}$$

علما بأن

تطبيق : بتطبيق احصاء بوز واينشتين على غاز من الفوتونات بشكل اشعاعا حراريا درجة حرارته المطلقة T اثبت أن كثافة الطاقة لهذا الغاز في المدى بين $\nu + d\nu$ هي :

$$E(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3 d\nu}{(e^{h\nu/kT} - 1)}$$

حيث h , k , c تأخذ معانيها المألوفة .

فاذا اعتبرنا حالة غاز من الفوتونات طاقة كل فوتون $h\nu$ تصبح دالة التوزيع

$$f(\nu) = \frac{1}{\left(e^{h\nu/kT} - 1 \right)}$$

$$m c = p = \frac{h\nu}{c} = \frac{\omega}{c} \quad \text{كمية الحركة للفوتون}$$

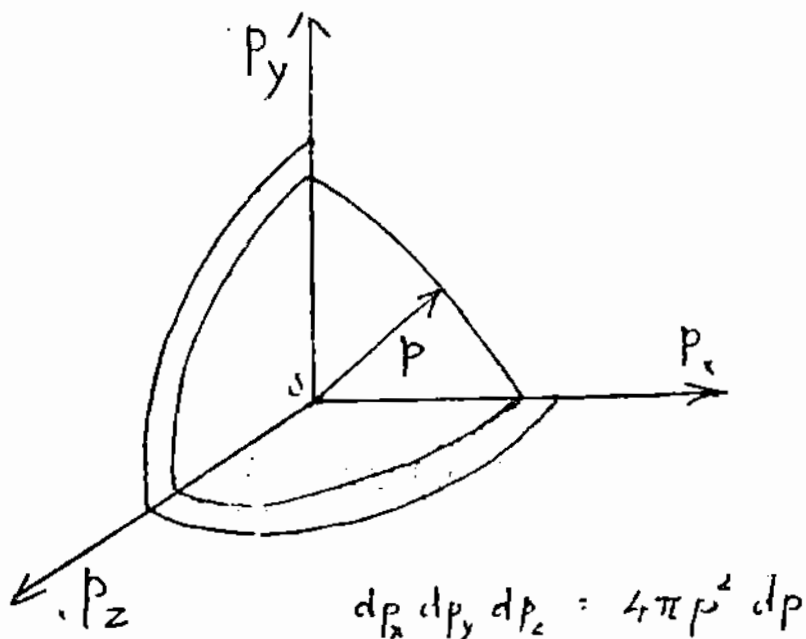
2
 ————— $\frac{dx dy dz}{h^3} \frac{dp_x dp_y dp_z}{x y z}$ بالمقدار N_i في معادلة N_i باستبدال n

وايضا N_i بـ $d^3 N$ (المعامل التفاضلى السادس لـ N) وباجراء التكامل في الفراغ على x, y, z نحصل على توزيع كمية الحركة في الفراغ .
 (المعامل 2 في قيمة n باعتبار وجود نوعين من الفوتونات يمينى $right\ handed$ ويسارى $left$ نسبه الى ان الضوء يمكن ان يكون استقطابه الدائرى يمينيا او يساريا
 (right or left circularly polarized light

$$\therefore d^3 N = \frac{2V}{h^3} \cdot \frac{1}{\left(e^{pc/kT} - 1 \right)} dp_x dp_y dp_z$$

وباعتبار قشره كره رقيقه في فراغ الطور نصف قطرها p وسمكها dp يكون

$$\frac{dN}{p} = \frac{2V}{h^3} \cdot \frac{4\pi p^2}{\left(e^{pc/kT} - 1 \right)} dp$$



ويمكن تحويل المعادلة السابقة لتعطي توزيع الفوتونات بدلالة الترددات وذلك باستخدام العلاقات

$$p = \frac{h \nu}{c} ; dp = \frac{h}{c} d\nu$$

$$\therefore dN_\nu = \frac{8\pi V}{c^3} \cdot \frac{\nu^2}{\left(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \right)} d\nu$$

وبما أن عدد الفوتونات لوحدة الحجم هو $\frac{dN_p}{V}$ وطاقة الفوتون

h تكون كثافة الطاقة energy density (الطاقة لوحدة الحجم) في المدى بين $(\nu + d\nu \ \& \ \nu)$ هو

$$E(\nu) d\nu = \frac{h\nu}{V} dN_\nu = \frac{8\pi h}{C^3} \cdot \frac{\nu^3}{(e^{h\nu/kT} - 1)} d\nu$$

وتتفق هذه المعادلة مع معادلة بلانك لكثافة الطاقة الإشعاعية في
حيز درجة حرارته المطلقة T

احصاء فيرمي وديراك : Fermi — Dirac Statistics

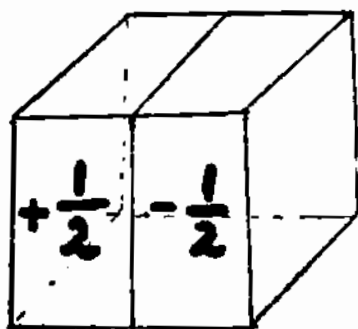
لايجاد نوع من الاحصاء يصلح للجسيمات التي لها دوال موجيه غير
متماثلة anti symmetric wave functions مثل الالكترونات.
والبروتونات ... الخ .، يجب تطبيق مبدأ باولي لى لايشغل أى مستوى
للطاقة اكثر من جسيمين وهذا يعنى أن الحجرة compartment في فراغ
الطور (ذات الحجم h^3) لايمكن ان يوجد بها سوى جسيمين
($S = \pm \frac{1}{2}$)

وهذا يعنى ان احداثيات هذه الحجرات في فراغ الطور تناظر تماما
الاعداد الكمية للجسيم .

∴ عدد الجسيمات التي يمكن ان تشغل كل خلية هو

$$n = 2 \frac{H}{h^3} = \frac{\text{حجم الخلية}}{\text{حجم الحجرة}} \times 2$$

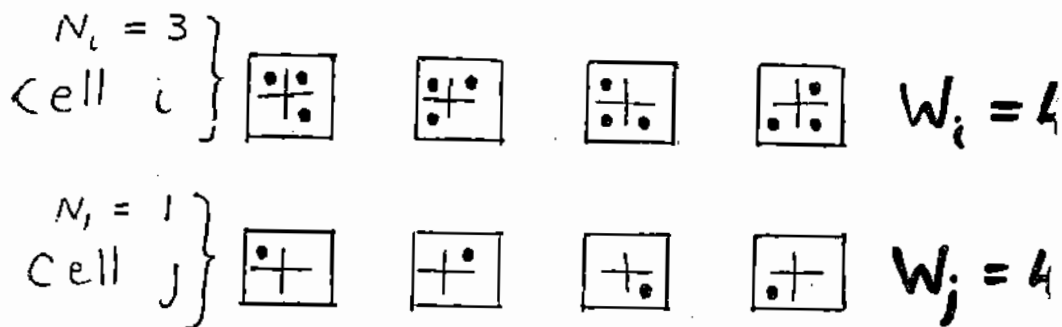
نفرض أن الجسيم الواحد يشغل غرفه واحده أى نصف حجرة بفرض
أن الحجرة (مستوى الطاقة الواحد) مقسم الى غرفتين .



وبالعروة للمثال الخاص بتوزيع
الأربع نقط في الخليتين

وباعتبار الحالة الماكرونية :-

$$N_j = 1 \text{ \& } N_i = 3$$



أي أنه يوجد أربعة طرق فقط لترتيب ثلاثة نقط في الخلية i وكذلك أربعة طرق لترتيب نقطة واحدة في j أي أن عدد الطرق الكلية أو الاحتمال الديناميكي الحراري لهذه الحالة الماكرونية ($N_i = 3$, $N_j = 1$) هو

$$W = W_i W_j = 16$$

وهذا يختلف عن العدد 4 لنفس الحالة الماكرونية باستخدام احصاء ماكسويل وكذلك العدد $W_i = 80$ باستخدام احصاء بوزا واينشتاين

∴ الاحتمال الديناميكي الحرارى لاي عدد من الخلايا هو :

$$W = \pi W_i$$

العلاقة بين N_i & W_i :

نفرض أن هناك n غرفة في خلية فيها عدد N_i مشغول والباقي $(n - N_i)$ خال (يلاحظ هنا أن الغرفة الواحدة يشغلها نقطة واحدة)

∴ عدد التباديل الغير متماثلة داخل الخلية i وهى الاحتمال الديناميكي الحرارى لها : —

$$W_i = \frac{n!}{N_i! (n - N_i)!}$$

حيث تباديل الفراغات (الغرف) $n!$ وتباديل المشغول فقط منها $N_i!$ وتباديل الفارغ منها $(n - N_i)!$ وتطبيق ذلك على المثال المعطى

$$N_j = 1 \text{ \& } N_i = 3 \text{ \& } n = 4$$

$$W_j = \frac{4!}{1! 3!} = 4 \text{ \& } W_i = \frac{4!}{3! 1!} = 4$$

وهى النتيجة التى حصلنا عليها بالعد البسيط .

∴ الاحتمال الديناميكي الحرارى لحالة ماكروئية باستخدام احصاء نيرنى ودبراك هو

$$W = \pi \frac{n!}{N_i! (n - N_i)!}$$

وباستخدام المعادلة $S = k \ln W$ ثم باعتبار أن حالة الاستقرار تكون عندما تصبح S قيمة نوجد شرط الاستقرار

$\delta \ln W = 0$ من المعادلة Maximum entropy

$$\therefore \ln W = \sum \left[(\ln n! - \ln Ni! - \ln (n - Ni)!) \right]$$

وباستخدام تقريب ستيرلنج نحصل على :

$$\ln W \approx \sum (n \ln n - Ni \ln Ni - n \ln (n - Ni) + Ni \ln (n - Ni))$$

وبالمفاضلة بالنسبة إلى Ni والمساواة بالصفر نحصل على

$$\delta \ln W = \sum \ln \frac{n - Ni}{Ni} \delta Ni = 0$$

ولما كان العدد الكلي لنقط المجموعة ثابتا وكذلك الطاقة الكلية لذلك

$$\delta N = \sum \delta Ni = 0$$

$$\delta U = \sum \omega_i \delta Ni = 0$$

وبضرب المعادلة الأولى في $-\ln B$ والثانية في $-\beta$ وبالجمع مع معادلة $\delta \ln W = 0$ نحصل على :

$$\sum \left(\ln \frac{n - Ni}{Ni} - \ln B - \beta \omega_i \right) \delta Ni = 0$$

ولكن طالما أن δNi في الخلايا المختلفة لا يتوقف على بعضه البعض

$$\therefore \ln \frac{n - Ni}{Ni} - \ln B + \beta \omega_i = 0$$

$$\therefore N_i = \frac{n}{\left(B e^{\beta w_i} + 1 \right)}$$

وباستخدام الديناميكا الحرارية كما سبق في حالة احصاء ماكسويل وبولتزمان نجد أن

$$\beta = \frac{1}{kT}$$

اما عن قيمة الثابت B فقد اوجد سومر فيلد Sommerfeld قيمته (الطريقة طويلة ومعقدة ولا مجال لذكرها هنا) كما يأتي : -

$$B = e^{-\omega_F / kT}$$

حيث ω_F هي طاقة فيرمي .

وهذا يعطى دالة التوزيع لفيرمي وديراك على الصورة

$$\frac{N_i}{n} = f = \frac{1}{\left(e^{\frac{(w_i - w_F)/kT}{F}} + 1 \right)}$$

ولايجاد دالة التوزيع في فراغ الطور بدلالة كمية الحركة P نضع كما سبق : -

$$n = \frac{2H}{h^3} = \frac{2}{h^3} dx dy dz dp_x dp_y dp_z$$

ونستبدل بدلا من N_i القيمة $d^3 N$ وكذلك بدلا من W_i القيمة W فنحصل على

$$d^3 N = \frac{2}{h^3} \frac{1}{[e^{(w - w_F)/kT} + 1]} dp_x dp_y dp_z$$

ويجاء التكامل على x, y, z

$$\therefore d^3 N = \frac{2V}{h^3} \frac{1}{\left(e^{(w - w_F)/kT} + 1 \right)} dp_x dp_y dp_z$$

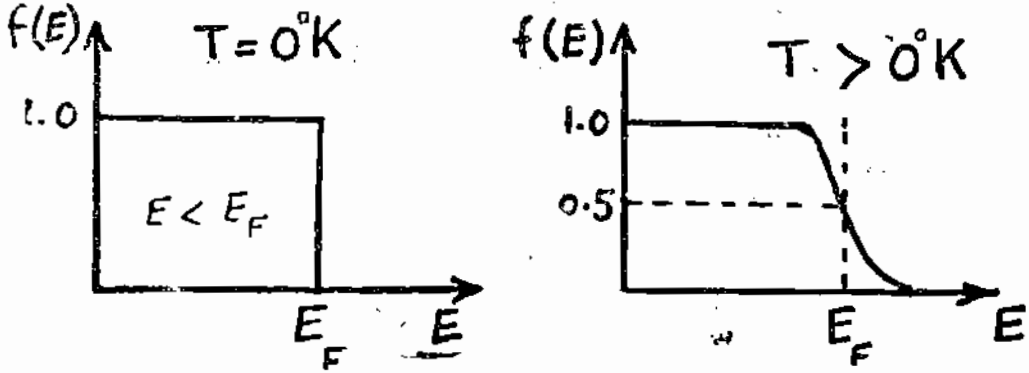
وباعتبار وحدة الحجم من المجموعة نقسم على الحجم V

$$\therefore d^3 N = \frac{2}{h^3} \cdot f \cdot dp_x dp_y dp_z$$

Fermi Energy. E_F طاقة فيرمي

نطبق احصاء فيرمي وديراكا على الغاز الالكترونى الكمى ،
نفرض ان E هو طاقة احد المستويات الممكنة an allowed state وان طاقة
فيرمى هي E_F احتمال ان يكون هذا المستوى
من الطاقة E مشغولا بالكترونين هو

$$f(E) = \frac{1}{\left(e^{(E - E_F)/kT} + 1 \right)}$$



شكل (١١ - ٩)

ولتوضيح معنى طاقة فيرمي E_F نرسم بيانا الدالة $f(E)$ بدلالة الطاقة E .

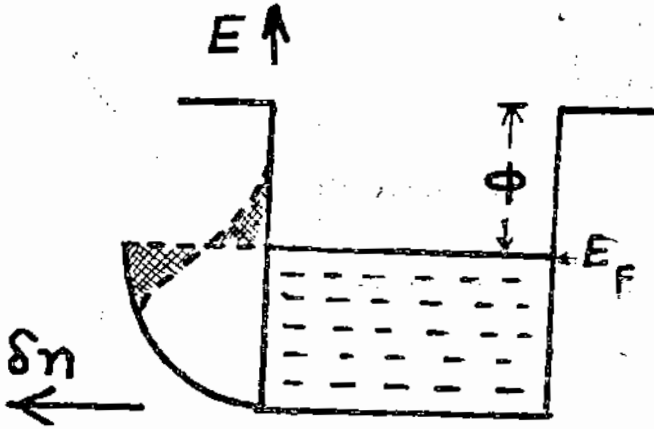
عند درجة الصفر المطلق تكون جميع مستويات الطاقة الأقل من مستوى طاقة فيرمي جميعها مشغول بالكترونين لكل مستوى . وتكون قيمة دالة التوزيع 0.5 للالكترون وواحد صحيح لمستوى الطاقة $(f(E) = 1)$

جميع المستويات الأعلى من E_F تكون شاغرة اذا كانت درجة الحرارة هي صفر مطلق .

اذا رفعنا درجة الحرارة من الصفر المطلق تستطيع الالكترونات التي تشغل مستويات الطاقة القريبة من طاقة فيرمي ان تكتسب طاقة بفعل الحرارة فترتفع الى المستويات الاعلى الشاغرة .

ارتفاع درجة الحرارة لا يؤثر على جميع الالكترونات الغاز ولكنها فقط تؤثر على الالكترونات عند سطح فيرمي والتي يمكن لها ان تجد مكانا شاغرا في مستويات الطاقة الاعلى منها .

لهذا السبب فان احصاء فيرمي ديراك يتميز بعدم التأثير الكبير بدرجة



شكل (١١ - ١٠)

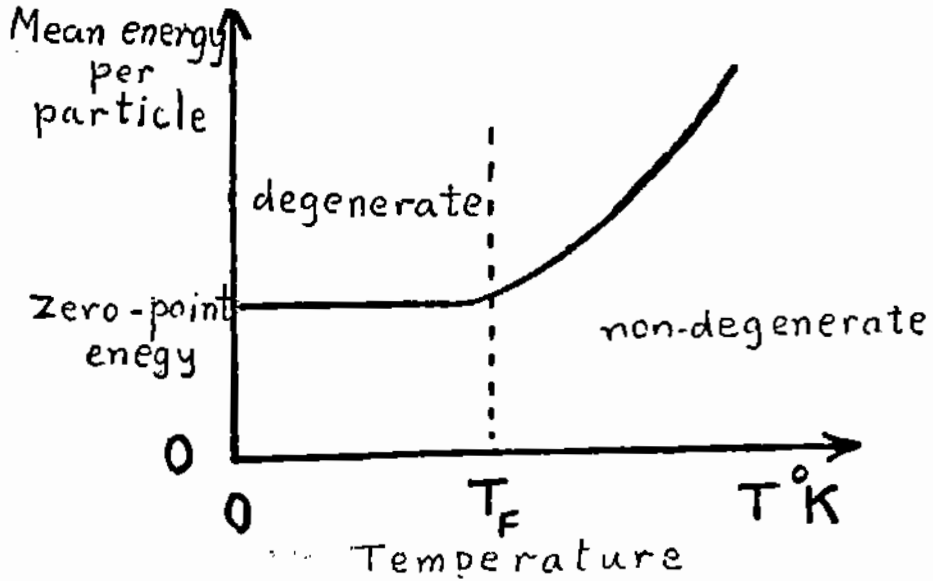
الحرارة وأيضا عند الصفر المطلق يوجد بالمجموعة كمية من الطاقة تسمى طاقة نقطة الصفر Zero point energy وهذا اختلاف جوهرى عن احصاء ماكسويل الذى تتلاشى فيه تماما طاقة المجموعة عند درجة الصفر المطلق .

Fermi — temperature :

درجة حرارة فيرمى :

عند رفع درجة الحرارة بدرجة كبيرة نجد ان توزيع فيرمى يتحول الى توزيع ماكسويل : وتعرف درجة الحرارة التى يحدث عندها هذا التحول بدرجة حرارة فيرمى T_F °K وتعطى بالمعادلة : -

$$E_F = k T_F$$



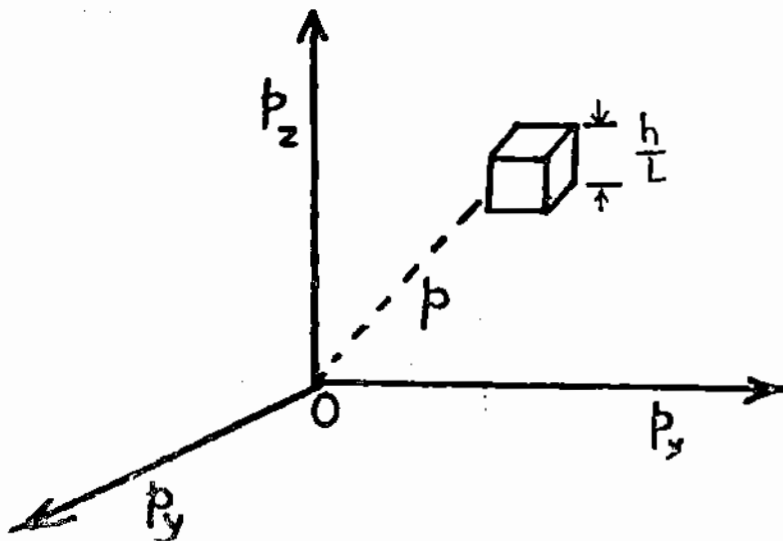
شكل (١١ - ١١)

وتصل قيمة T_F للفلزات حيث تركيز الإلكترونات كبيراً إلى حوالي ٢٠.٠٠٠ درجة مطلقة . بينما في حالة أشباه الموصلات فقد تكون T_F أقل من درجة حرارة الغرفة . وهذا يعني أنه في حالة أشباه الموصلات يمكن اعتبارها غير محالة $non\ degenerate$ عند درجة حرارة الغرفة حيث يجوز عندئذ تطبيق احصاء ماكسويل

تطبيق احصاء فيرمي وديراك على الغاز الإلكتروني في الموصلات
حساب طاقة فيرمي : E_F للغاز الإلكتروني في الفلزات

يتحدد في فراغ الطور ذي الأبعاد p_x, p_y, p_z حالة أي إلكترون في الغاز . لتعتبر نقط فراغ كمية الحركة p_x, p_y, p_z . نفرض أن الإلكترون موجود في بلورة مكعبة طول ضلعها L

عدم التحديد في كمية الحركة Δp_x في الاتجاه السينا يساوي



شكل (١١ - ١٢)

حسب قاعدة هيزنبرج $\frac{h}{L}$ وبالمثل يكون عدم التحديد في كمية حركة

الالكترون في كل من الاتجاهين y, z هو $\frac{h}{L}$

فإذا قسمنا فراغ كمية الحركة الى خلايا طول الضلع فيها $\frac{h}{L}$

يكون حجمها $\frac{h^3}{L^3}$ أي $\frac{h^3}{V}$ حيث V حجم الجسم

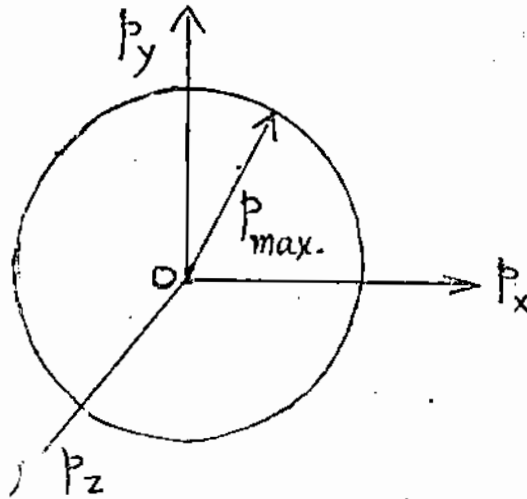
تمثل كل خلية حالة من حالات الطاقة الالكترونية والتي يشتملها الكترونيين مفزليهما متعاكسين energy state تبعاً لمبدأ باولي .

إذا بردنا الفلز الى درجة الصفر المطلق فان الالكترونات تتجمع حول مركز الاحداثيات في فراغ كمية الحركة .

« كلما اقتربت الخلية من مركز الاحداثيات كلما نقصت طاقة
الالكترونين بداخلها حيث أن بعد الخلية هو p أى كمية الحركة الكلية »

تمتلئ الخلايا القريبة من المركز O ويتجمع الغاز الألكترونى داخل
كرة متمركزة مع O نصف قطرها هو p_{max} ويسمى سطح هذه الكرة
بسطح فيرمى Fermi surface

$$\frac{4}{3} \pi p_{max}^3 \text{ هو حجم هذه الكرة}$$



شكل (١١ - ١٣)

نفرض وجود n الكروونات فى بلورة الفلز . يكون حجم فراغ كمية
الحركة الذى يحتوى على جميع المستويات المشغولة عند درجة الصفر

$$\frac{n}{2} \cdot \frac{h^3}{V} \text{ هو المطلق هو وهذا هو نفس حجم كرة فيرمى . أى أن}$$

$$\frac{4}{3} \pi p_{max}^3 = \frac{n}{2} \cdot \frac{h^3}{V}$$

لكن طاقة حركة الإلكترون عند مستوى فيرمي للطاقة هو

$$E_{\max} = \frac{1}{2} m u^2 = \frac{1}{2m} p^2$$

حيث E_{\max} هو أكبر طاقة الكترونية في الغاز وهي طاقة فيرمي E_F

ومن المعادلات السابقة تعطى طاقة فيرمي بالمعادلة : -

$$E_F = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3n}{8\pi V} \right)^{2/3}$$

$$= \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3N}{8\pi} \right)^{2/3}$$

حيث N هو تركيز الإلكترونات أو كثافتها في الغاز وتساوي

$$N = \frac{n}{V}$$

عدد الإلكترونات في وحدة الحجم من البلورة .

نستخلص مما سبق أن الكترونيات الفلز عند درجة الصفر المطلق تكون لها طاقات تتراوح بين الصفر وطاقة فيرمي E_F التي تعتمد على تركيز الإلكترونات وتصل قيمتها في الفلزات المعتادة الى بضعة الكترون فولت

ويلاحظ أن هذه القيمة كبيرة جدا بالنسبة لطاقة التهييج الحراري kT thermal agitation والتي تبلغ حوالي 0.2 ر. إلكترون فولت عند درجة حرارة الغرفة . وهذا يدل على أنه حتى عند درجات الحرارة المرتفعة المعتادة في المعمل فان عدد قليل جدا من هذه الإلكترونات هي التي تثار الى مستويات أعلى للطاقة

مثلا : عند درجة ١٠٠٠ م تكون تقريبا $kT = 0.1 \text{ eV}$

وبالنسبة لفلز $E_F = 5 \text{ eV}$ نجد أن مجموعة الإلكترونات تظل محلله حتى عند هذه الدرجة degenerate .

عند درجة حرارة فيرمي T_F حيث

$$E_F = k T_F$$

يمكن للتهييج الحرارى $k T_F$ أن يصل الى أصغر مستوى ممكن للطاقة وبذلك يمكن لكل المجموعة من الإلكترونات أن تثار . وعندئذ تستطيع تطبيق احصاء ماكسويل وبولتزمان حيث أن المجموعة تصبح غير محالة non degenerate . تصل قيمة T_F للفلزات المعتادة الى أكثر من $20,000^\circ \text{K}$

طول موجة دي برولى المصاحبة للإلكترون عند مستوى فيرمي للطاقة :

إذا كانت سرعة الإلكترون عند مستوى فيرمي هي u_F تكون طاقته :

$$E_F = \frac{1}{2} m u_F^2 = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3N}{8\pi} \right)^{2/3}$$

منها

$$\therefore u_F = \frac{h}{m} \left(\frac{3N}{8\pi} \right)^{1/3}$$

وبتطبيق قاعدة دي برولى يصاحب هذا الإلكترون طول موجة تعطى بالمعادلة

$$\lambda_{\min} = \frac{h}{p_{\max}} = \left(\frac{8\pi}{3N} \right)^{1/3}$$

$$= \frac{h}{(2mE_F)^{1/2}}$$

وتصل قيمة λ_{\min} في الأحوال المعتادة الى حوالى ٦ انجستروم
وهي اكبر من البعد البيني بين ذرات البلورات المعتادة .

Density of energy states كثافة مستويات الطاقة

تعرف كثافة مستويات الطاقة $N(E)$ بانها عدد المستويات لكل
وحدة طاقة في وحدة الحجم

It is the number of energy states per unit energy range per
unit volume

لايجاد تغير الدالة $N(E)$ مع الطاقة E نفرض ان العدد الكلي
لحالات الطاقة هو N_s لوحدة الحجم

$$\therefore N_s = \int N(E) dE$$

ولكن من معادلة فيرمي

عدد الالكترونات N في وحدة الحجم هو

$$N = \frac{\pi}{3} \left(\frac{8m}{h^2} \right)^{3/2} E^{3/2}$$

وبالتعمييض

$$\therefore 2 \int N(E) dE = \frac{\pi}{3} \left(\frac{8m}{h^2} \right)^{3/2} E^{1/3} = N$$

وبالفاضلة بالنسبة الى E

$$\therefore 2 N(E) = \frac{\pi}{2} \left(\frac{8m}{h^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$$

$$\therefore N(E) = \frac{1}{2} C \cdot E^{1/2}$$

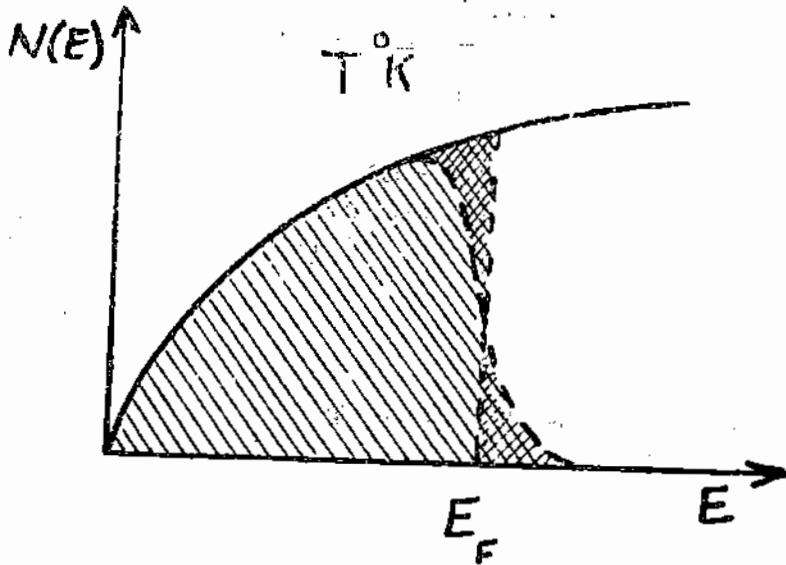
حيث

$$C = \frac{\pi}{2} \left(\frac{8m}{h^2} \right)^{3/2}$$

أى أن العلاقة بين E & $N(E)$ علاقة قطع مكافئ كما في شكل ١١ - ١٤ ويبين الجزء المظلل مستويات الطاقة المشغولة عند الصفر المطلق . ويبين الخط المتقطع المستويات المشغولة عند درجة $T^{\circ}K$

الحرارة النوعية الإلكترونية للفلزات : Electronic specific heat

الحرارة النوعية الناشئة عن الغاز الإلكتروني تنشأ بسبب الزيادة في طاقة الإلكترونات القريبة من سطح فيرمي والتي يمكن إثارتها لمستويات أعلى .



شمس (١١ - ١٤)

عند درجة الحرارة $T^{\circ}K$ تكون نسبة الالكترونات المثارة الى غير
 kT

المثارة هي $\frac{kT}{T_F}$ فاذا كان عدد الالكترونات في وحدة الحجم هو

يكون عدد الالكترونات المثارة $N \cdot \frac{T}{T_F}$ وذلك عند الدرجة $T^{\circ}K$

طاقة الالكترونات المثارة هي

$$N \cdot \frac{T}{T_F} \cdot kT$$

= الطاقة الامتصة من التهييج الحرارى

الحرارة النوعية الالكترونية (تفاضل الطاقة بالنسبة لدرجة الحرارة)

$$C_v = \frac{d}{dT} \left[\frac{Nk}{T_F} \cdot T^2 \right]$$

$$= \frac{2 N k T}{T_F} = \gamma T$$

الحرارة النوعية الكلية للفلز هي مجموع الحرارة النوعية الإلكترونية والحرارة النوعية الذرية وستثبت فيما بعد نظرية ديباري للحرارة الذرية حيث C_v الذرية تتناسب مع T^3

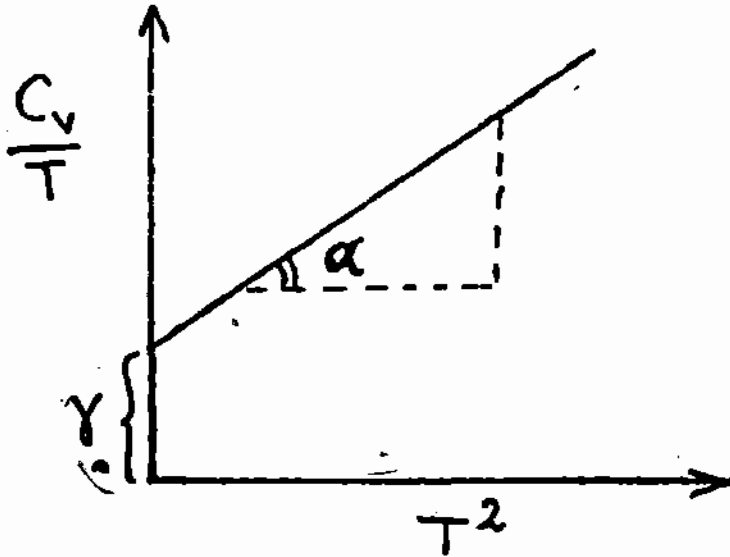
أى أن

$$(C_v)_{\text{total}} = \alpha T^3 + \gamma T$$

وقيمة $(C_v)_{\text{tot}}$ هي التى تقاس عادة فى المعمل .

وبقياس الحرارة النوعية عند درجات الحرارة المختلفة ثم يرسم

العلاقة بين $\frac{C_v}{T}$ و T^2



شكل (١١ - ١٥)

ومن الرسم يمكن استنتاج قيمة ثابت التناسب γ

ومن المعادلة

$$\gamma = \frac{2Nk}{T_F}$$

يمكن إيجاد درجة حرارة فيرمي T_F وكذلك طاقة فيرمي $E_F = kT_F$ عملياً .

إيجاد السرعة المتوسطة والطاقة المتوسطة للإلكترون عند درجة الصفر المطلقة .

نفرض منطقة صغيرة من الطاقة dE تقع بين E و $E + dE$ عدد مستويات الطاقة في هذه المنطقة = $N(E) dE$

عدد الإلكترونات التي تشغلها

$$2 \int N(E) dE = \delta n(E)$$

وقد ضربنا في اثنين لأن كل مستوى يشغله إلكترونين . وكذلك في الدالة f occupation probability function لنحصل على العدد الفعلي للإلكترونات الموجودة عند الدرجة $T = 0^\circ K$

$$f = \frac{1}{\left(e^{(E-E_F)/kT} + 1 \right)}$$

وتساوي الدالة f واحد صحيح عند ما تكون الدرجة $T=0^\circ K$

لأن جميع المستويات أقل من E_F تكون عندئذ مشغولة بالكترونين لكل

عدد الالكترونات في المنطقة dE عند الدرجة $T^{\circ}K$

$$\delta n(E) = \frac{2 \times \frac{1}{2} C E^{1/2} dE}{\left(e^{(E-E_F)/kT} + 1 \right)}$$

لكن

$$E = \frac{1}{2} m u^2$$

$$\therefore dE = m u du$$

$$\therefore E^{1/2} dE = \left(\frac{m}{2} \right)^{1/2} m u^2 du$$

$$\therefore \delta n(u) = \frac{8\pi m^3 u^2 du}{h^3 \left(e^{(E-E_F)/kT} + 1 \right)}$$

$f = 1$ عند درجة الصفر المطلق

ومن التوانين الاحصائية : السرعة المتوسطة للالكترون

$$\bar{u} = \frac{\int_0^{u_F} u \delta n}{\int_0^{u_F} \delta n}$$

لكن $\int_0^{u_F} \delta n = N$ حيث N هو عدد مستويات الطاقة

الكلية تحت E_F

$$\begin{aligned} \therefore \bar{u} &= \frac{1}{N} \int_0^{u_F} \frac{8\pi m^3}{h^3} u^3 du \\ &= \frac{8\pi}{N} \frac{m^3}{h^3} \frac{u_F^4}{4} \end{aligned}$$

لكن

$$\frac{u_F}{h} = \frac{h}{m} \left(\frac{3N}{8\pi} \right)^{1/3}$$

$$\therefore U = \frac{3}{4} u_F$$

وإذا كانت \bar{E} هي الطاقة المتوسطة في الغاز الإلكتروني

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \frac{\int_0^{u_F} \frac{1}{2} m u^2 \delta n}{\int_0^{u_F} \delta n} \\ &= \frac{1}{N} \frac{1}{2} m \int_0^{u_F} u^2 \delta n \end{aligned}$$

$$= \frac{m}{2N} \cdot \frac{8\pi}{h^3} m^3 \int_0^{u_F} u^4 \, du$$

$$= \frac{4\pi m^4}{N h^3} \cdot \frac{u_F^5}{5}$$

وباستخدام معادلتى E_F & u_F نحصل على

$$\bar{E} = \frac{3}{5} E_F$$

مسألة (١) أوجد ضغط الغاز الألكترونى عند الصفر المطلق علماً بأن $E_F = 5 \text{ eV}$ وكثافة الألكترونات ٢٢١ لكل سم^٣

الحل : بتطبيق نظرية الحركة للغازات على الغاز الألكترونى الحر

$$\begin{aligned} \therefore p &= \frac{1}{3} N m u^2 \\ &= \frac{2}{3} N \left(\frac{1}{2} m u^2 \right) \\ &= \frac{2}{3} N \cdot \frac{3}{5} E_F \end{aligned}$$

وقد عوضنا هنا بدلاً من $\frac{1}{2} m u^2$ وهى الطاقة المتوسطة للألكترون فى الغاز الألكترونى بالقيمة $\frac{3}{5} E_F$.

$$E_F = 5 \times 1.6 \times 10^{-12} \text{ ergs}$$

$$\therefore p = \frac{2}{3} \times 10^{22} \times \frac{3}{5} \times 5 \times 1.6 \times 10^{-12}$$

$$\therefore p = 3.2 \times 10^{10} \text{ dynes / cm}^2$$

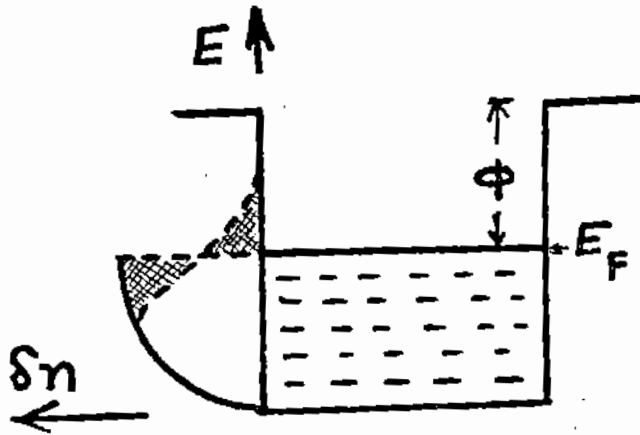
Thermionic emission

الانبعاث الترميوني

الانبعاث الترميوني هو هروب الإلكترونات من السطوح الساخنة للمعادن والمعادن وأشباه الموصلات وهو المصدر الرئيسي للإلكترونات في الصناعات (الصمامات وأنابيب الفلورسنت ، الخ)

يوجد عند سطح أى جسم صلب حاجز طاقة ϕ energy barrier

يقدر بعدة إلكترون فولت يمنع هروب الإلكترونات من الجسم . عند رفع درجة الحرارة تكتسب بعض الإلكترونات من الطاقة ما يسمح لها بأن تغادر الجسم وتصبح حرة .



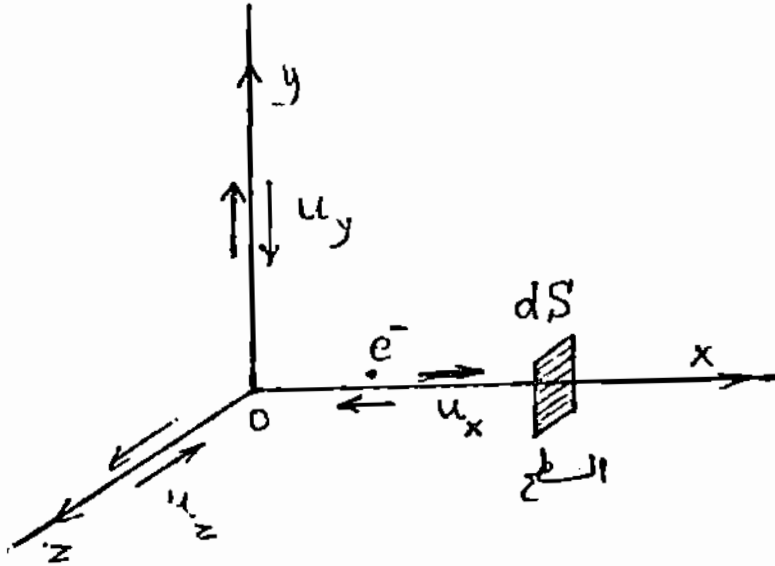
(شكل 11 - 16)

يطلق على القانون الذي يربط عدد الإلكترونات المنبعثة حرارياً (التيار الترميوني) ودرجة الحرارة بقانون ريتشاردسون ودشمان .

عند ما يسخن جسم صلب طاقة فيرمي له E_F ودالة الشغل ϕ work function تتحرر فقط الإلكترونات التي تكون طاقتها أكبر من $E > E_F + \phi$ وتعريف دالة الشغل . هي الطاقة التي يجب

اعطائها للإلكترون الذي يشغل مستوى فيرمي للطاقة لكي يفاد نهائيا الجسم . هذا الشرط ضروري ولكنه غير كاف إذ أن الإلكترون قد يكون له الطاقة المطلوبة ولكنه يتحرك في غير اتجاه السطح أي لداخل الجسم .

اعتبر محاور إحداثيات x, y, z داخل الجسم . واعتبر جزءا من السطح الذي ينبعث منه الإلكترونات عموديا على محور x .



(شكل ١١ - ١٧)

معدل انبعاث الإلكترونات التي لها كمية حركة في المنطقة بين p و $p + dp$ من وحدة المساحات من السطح الساخن هو

$$u = \frac{n(p) dp}{x}$$

ولكن

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

$$\therefore \frac{\delta E}{\delta P} = \frac{u}{x}$$

معدل الانبعاث من وحدة المساحات

$$\frac{\delta E}{\delta P} \cdot n(p) \cdot dp = n(p) \frac{dE}{dx} \frac{dp}{dy} \frac{dp}{dz}$$

$$dp = \frac{dp}{x} \frac{dp}{y} \frac{dp}{z}$$

سبق ان ذكرنا ان مستوى الطاقة يمثله الحجم $\frac{h^3}{V}$ في فراغ كمية

الحركة ، ويشغله الالكترونات فقط . باعتبار وحدة الحجم من الجسم يكون عدد الالكترونات لوحدة الحجم في فراغ كمية الحركة هي

$$N(p) = \frac{2}{h^3}$$

وذلك بفرض ان جميع مستويات الطاقة مشغولة ، اى عند الصفر المطلق ، وعموما عند اى درجة حرارة $T^{\circ}K$ يصبح هذا المعدل

$$n(p) = \frac{2}{h^3} \cdot f$$

حيث f هي دالة التوزيع لفيرمي وديراك وتساوي

$$f = \frac{1}{\left(e^{\frac{(E-E_F)/kT}{}} + 1 \right)}$$

وتكون بذلك الكثافة التيارية المنبعثة j وهي حاصل ضرب الشحنة الإلكترونية e في معدل الانبعاث للالكترونات ذات الطاقة

$E_x > E_F + \phi$ والتي تصدم وحدة مساحات السطح في اتجاه x هي

$$j = e \frac{2}{h^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{E_F+\phi}^{\infty} \frac{dp_y dp_z dE}{\left(e^{\frac{(E-E_F)/kT}{}} + 1 \right)}$$

وليجاد قيمة هذا التكامل نضع

$$\Theta = \frac{E-E_F}{kT}$$

$$\therefore d\Theta = \frac{dE}{kT}$$

ونضع أيضا

$$E = E_x + E_y + E_z$$

$$= E_x + \frac{1}{2m} (P_y^2 + P_z^2)$$

$$\therefore \Theta = \frac{1}{kT} \left[(E_x - E_F) + \frac{P_y^2 + P_z^2}{2m} \right] =$$

$$= \frac{1}{kT} \left[\varphi + \frac{P_y^2 + P_z^2}{2m} \right]$$

وبالتعويض في معادلة j وبمعرفة أن

$$\int \frac{d\Theta}{e^{\Theta} + 1} = \log (1 + e^{-\Theta})$$

نحصل على

$$j = \frac{2kTe}{h^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \log (1 + e^{-\Theta}) dp_y dp_z$$

في الظروف التجريبية المعتادة تكون $\Theta \gg 1$ ولذلك بفك

اللوغاريتم والاكتماء بالحد الأول فقط $e^{-\Theta}$ نحصل على

$$j = \frac{2kTe}{h^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\Theta} dp_y dp_z$$

وبالتعويض بدل Θ ما يساويها

$$\therefore j = \frac{2k T e}{h^3} \cdot e^{-\varphi/kT}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(p_y^2 + p_z^2) / 2mk T} dp_y dp_z$$

وبمعرفة ان

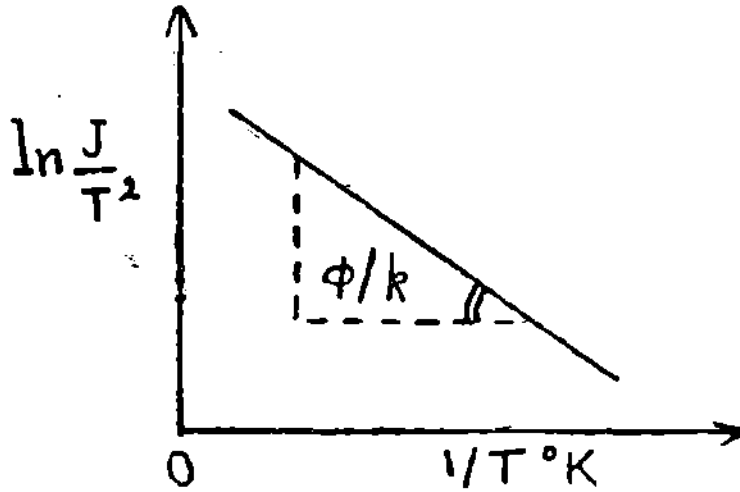
$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$$

نحصل على

$$j = \frac{2 k T e}{h^3} \cdot e^{-\varphi/kT} \cdot 2 \cdot mkT \cdot \pi$$

$$= \frac{4 \pi m e k^2}{h^3} \cdot T^2 \cdot e^{-\varphi/kT}$$

$$\therefore j = A \cdot T^2 \cdot e^{-\varphi/kT}$$



شكل (١١ - ١٨)

وتعرف هذه المعادلة بقانون رنشاردسون دوشمان

وبرسم العلاقة بين $\log \frac{j}{T^2}$ و $\frac{1}{T}$ نحصل على علاقة

خطية يعطى ميل الخط مباشرة النسبة ϕ / k

وتعتبر هذه هي الطريقة العملية لإيجاد قيمة دالة الشغل ϕ للانبعاث الترميوني حيث من السهل قياس شدة التيار الترميوني j باستخدام صمام ثنائي بسيط يمكن تسخينه لدرجات حرارة مختلفة ،
يسهل قياسها بواسطة بيرومتر ضوئي وقياس شدة التيار في كل حالة ثم
من الرسم البياني توجد قيمة ϕ

وبلاحظ أن الثابت $A = \frac{4 \pi m e k^2}{h^3}$ له قيمة تبلغ

١٢٠ أمبير / سم^٢ - درجة

كما أن دالة الشغل للمواد المختلفة تتراوح بين واحد وخمسة إلكترون فولت