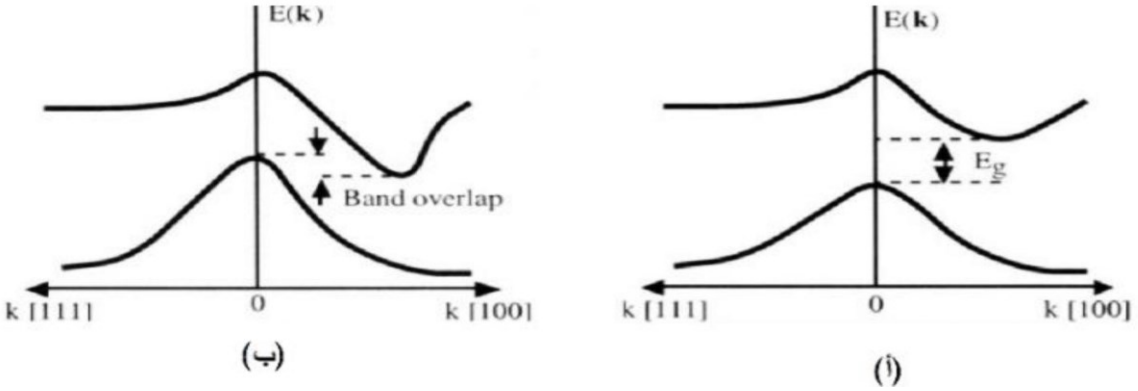
العلاقة بين الطاقة و الزخم

في الشكل ادناه يوضح الحد الأقصى لحزمة التكافؤ و الحد الادنى لحزمة التوصيل كدالة لمتجه الزخم k في الاتجاهات البلورية [001] و [111] . نلاحظ في الحالة a انفصال حافة حزمة التكافؤ عن حافة حزمة التوصيل بفرق طاقي موجب يمثل فجوة الطاقة، أي $0<E_g$، حيث تتواجد هذه الحالة في المواد العازلة أو في أشباه الموصلات، بينما نلاحظ تداخل حافتي حزمة التكافؤ والتوصيل في الحالة b، بحيث الفرق الطاقي بين حافتي الحزمتين سالب، اي $0>Eg$, و التي تمثل حزم الطاقة في المعدن.

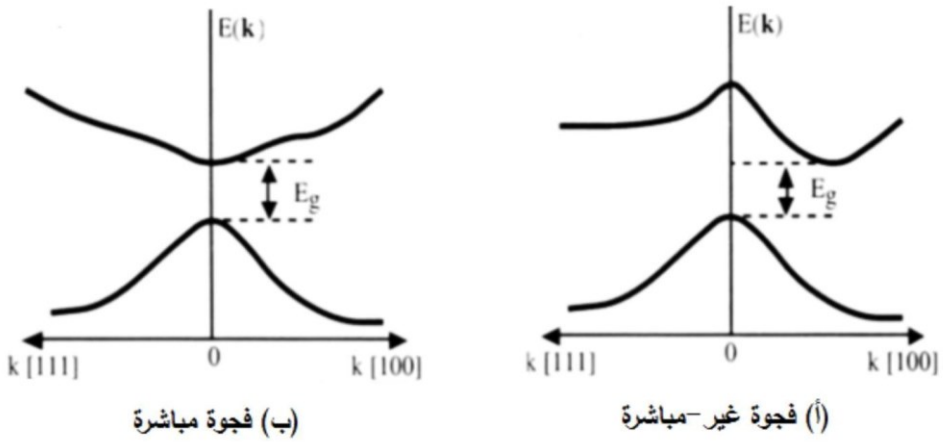


أمثلة توضح حزم الطاقة في بلورة في اتجاهات بلورية مختلفة. (a) مادة عازلة او شبه موصلة $0<Eg$ و (b) معدن $0>Eg$.

يمكن أن تحدد علاقة الطاقة مع الزخم بعض خواص أشباه الموصلات. وكما ياتي

1. يسمى شبه الموصل بالمباشر عندما يمتلك فجوة طاقة مباشرة Direct energy gap . و هذا يحدث عند اشباه الموصلات التي تقع أقصى قيمة لحزمة التكافؤ (قمة) maxima عند اوطئ قيمة لحزمة التوصيل (قعر) minima عند نفس قيم الزخم k، بحيث $\Delta k = 0$. أي لا يوجد تغيير في الزخم. يمتلك السيليكون فجوة طاقة مباشرة ($Eg \sim 3.4\ eV$). كما موضح بالشكل ادناه

Dr. Rasha Abbas Awni
College of Education for Pure Sciences
Dep. of Physics, Tikrit University
Semiconductors 2023 - 2024



الشكل 1-27: (أ) شبه موصل بفجوة طاقة-غير مباشرة، و (ب) شبه موصل بفجوة طاقة-مباشرة.

2. بينما تسمى المواد شبه الموصلة بالغير مباشرة وذلك لامتلاكها فجوة طاقة غير مباشرة Indirect energy gap. و تحدث عندما تقع قمة حزمة التكافؤ عند زخم k بقيمة تختلف عن الزخم لقعر حزمة التوصيل. و لذلك يحدث تغيير في الزخم. يمتلك السيليكون (Eg=1.12 eV) و الجرمانيوم فجوة طاقة غير مباشرة.

و سنتحدث عن تفاصيل أخرى في الفصول القادمة.

حاملات الشحنة Charge carrier

تُعرّف حاملات الشحنة بأنها جسيمات حرة (غير مرتبطة) تحمل شحنة كهربائية، مثل الإلكترونات و البروتونات والأيونات و الفجوات و العيوب المشحونة.

في المحاليل الأيونية، تكون الأيونات الموجبة (الكاتيونات) و الأيونات السالبة (والأنيونات) المذابة هي حاملات الشحنة. أما في فيزياء أشباه الموصلات، فهناك نوعين من حاملات الشحنة: النوع الأول هو الإلكترونات التي تحمل الشحنة السالبة، أما النوع الثاني فهو الث الفجوات التي تتكون بعد أن يترك الإلكترون الحر مكانه في حزمة التكافؤ ، وتعتبر شحنات موجبة وتتصرف تصرف جسيم مشحون موجب أو سالب أو متعادل وهذا يعتمد على قوة المجال المعتمدة على القوة الكهربائية.

الكتلة الفعّالة effective mass

يمكن تعريف كتلة الإلكترون (m_e) من علاقة توازن القوى، وكما يأتي

$$F_{net} = ma^{\rightarrow}, or\ a^{\rightarrow} = \frac{F_{net}}{m_e} \qquad (1)$$

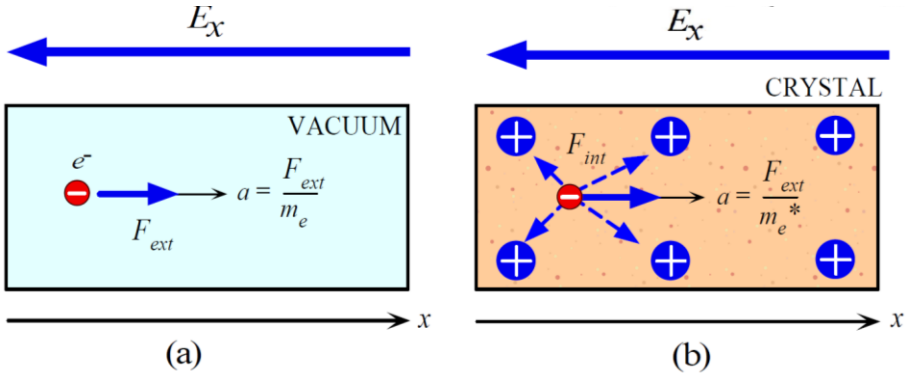
حيث أن $a^{\rightarrow}$ هو تعجيل الإلكترون، محصلة القوى F_{net} التي توثر على الكترون في بلورة تساوي

$$F_{net} = F_{ext} + F_{int} = F_{net} = F_{ext} - \nabla V \qquad (2)$$

حيث ان $r\nabla = \frac{\partial}{\partial r}$ المسافات البينية، و V الجهد الدوري لقوى التجاذب و التنافر بين الذرات في الشبيكة البلورية، و أن F_{int} القوى الداخلية internal force و F_{ext} اللقوى الخارجية. external force

$$a^{\rightarrow} = \frac{F_{ext}+F_{int}}{m_e} = \frac{F_{ext}}{m_e} + \frac{-\nabla V}{m_e} \equiv \frac{F_{ext}}{m_e^*} \qquad (3)$$

حيث أن تعجيل الإلكترون يمكن أن يتأثر بالقوى الداخلية والخارجية. ونتيجة لتأثر الإلكترون بالقوى الخارجية المسلطة، فإن الكتلة الفعالة (m_e^*) ستكون مختلفة عنها في الفراغ.



a)) تؤدي القوة الخارجية المطبقة على الإلكترون في الفراغ إلى تسارع الاكترون بتعجيل

$a_{vac} = F_{ext} / m_e$

b)) ينتج عن القوة الخارجية المطبقة على إلكترون في بلورة الى تسارع الالكترون بتعجيل

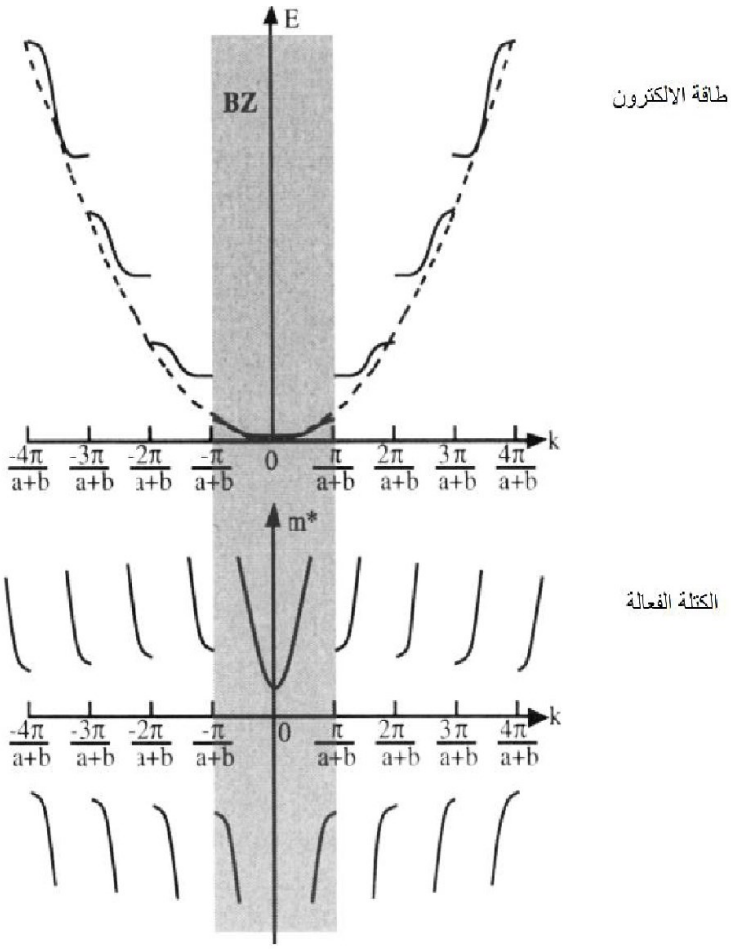
$a_{cryst} = F_{ext} / m_e^*$

و كما علمنا سابقا ان طاقة الالكترون الحر تساوي

$$E = \frac{\hbar k^{-2}}{2m^*}, m^* = \frac{\hbar}{\frac{d^2E}{dk^{-2}}} \qquad (4)$$

حيث ان $m = m_o = 9.11 \times 10^{-28} gm$ و ان m_o كتلة الإلكترون في الفراغ.

ويتضح مما سبق أن كتلة الإلكترون هي مقدار ثابت، بينما الكتلة الفعالة غير ثابتة وتتغير بتغير مستوى الإلكترون الطاقي و مقدار زخم. أي أن ذلك يعني أن كتلة الإلكترون الفعالة في بلورة ستكون مختلفة لحزم الطاقة المختلفة، كما موضح في الشكل أدناه.



طاقة الالكترون و الكتلة الفعالة كدالة لزخم الإلكترون في بلورة ذات بعد واحد. يمثل الجزء المظلل منطقة برليون الأولى.

1. إذا كان الإلكترون موجود في النصف العلوي من حزمة الطاقة، فإن الكتلة الفعالة ستكون سالبة.
2. إذا كان الإلكترون موجود في النصف السفلي من حزمة الطاقة، فإن الكتلة الفعالة ستكون موجبة.
3. إذا كان الإلكترون موجود بالقرب من منتصف حزمة الطاقة، فإن الكتلة الفعالة ستكون قريبة من اللانهائية.

واجب: اشرح كيف يمكن أن يمتلك الإلكترون كتلة فعالة سالبة؟

كثافة الحالات في حزم الطاقة Density of states in an energy bands

ويرمز لكثافة الحالات ب $g(E)$ و التي تعطي عدد المستويات الموجودة للطاقة بين $[dE + E, E]$ او بعبارة اخرى يمكن تعريف $g(E)dE$ على انها عدد مستويات الطاقة لوحدة الحجم. هذا المؤشر لا يتنبأ بمعدل شغل مستويات الطاقة بالالكترونات، وإنما يحصي عدد المستويات الموجودة التي يمكن اشغلها بالالكترونات. وقد يكون اشغال المستويات بالإلكترونات أو الفوتونات هذه الخاصية لها أهميتها في التوصيل الكهربائي في المعادن وأشباه الموصلات.

فاذا كانت $g(E)$ هي كثافة المستويات المتاحة في النطاق، فان

كثافة الحالات في مستوى طاقة إلكترون حر

$$g(E) = 4\pi \left[\frac{2m_e}{h^2}\right]^{3/2} E^{1/2} \qquad (5)$$

كثافة الحالات في عند حافة حزمة التوصيل

$$g(E) = 4\pi \left[\frac{2m_c^*}{h^2}\right]^{3/2} [E - E_C]^{1/2} \qquad (6)$$

كثافة الحالات في عند حافة حزمة التكافؤ

$$g(E) = 4\pi \left[\frac{2m_v^*}{h^2}\right]^{3/2} [E_v - E]^{1/2} \qquad (7)$$

حيث ان E_v و E_C هما طاقة الإلكترون في حزمتي التكافؤ و التوصيل على التوالي.

يمكن عند تحديد كثافة المستويات في نطاق التوصيل مثلا الاستعانة بـ إحصاء فيرمي ديراك - الذي يعطي احتمالية وجود الإلكترون في مستوى طاقة معين - لتعيين تركيز الإلكترونات في هذا النطاق :

تركيز الإلكترونات = كثافة المستويات * احتمال انشغالها

***إحصاء فيرمي ديراك Fermi-Dirac statistics**

يعتبر دالة توزيعية و تمثل احتمالية تواجد إلكترون ما يملك طاقة معينة في حالة مككمة (quantized)، ولا يقتصر التوزيع على الإلكترونات فقط بل ينطبق على الفرميونات والبوزونات. حساب تركيز الإلكترونات في مستوى طاقة ما يعتمد بشكل أساسي على مرتكزين أساسيين هما كالتالي :

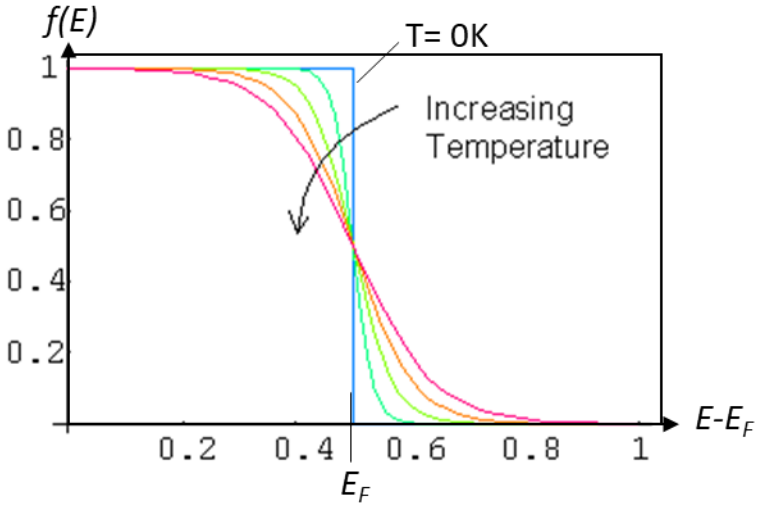
كثافة المستويات : عدد الأماكن الخالية في هذا المستوى.

إحصاء فيرمي ديراك: عدد الإلكترونات التي تملك طاقة أكبر وتتيح لها بلوغ المستوى المحدد لها . يمكن تحديد عدد الإلكترونات التي يمكن أن تملك طاقة E حسب القانون التالي:

$$f(E) = \left[1 + exp\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right)\right]^{-1} \qquad (8)$$

حيث ان $f(E)$ هي دالة فيرمي،و E طاقة الالكترون، و E_F مستوى طاقة فيرمي، و T درجة الحرارة، و k_B ثابت بولتزمان.

Note: common exponential numbers
Exp (0) =1
Exp (1) = 2.7182818284…
Exp (-1) = 0.3678794117…
Exp (-∞) = 0
Exp (∞) = ∞



توزيع دالة فيرمي-ديراك كدالة لطاقة الالكترون

عند درجة الصفر المطلق T=0K، فان

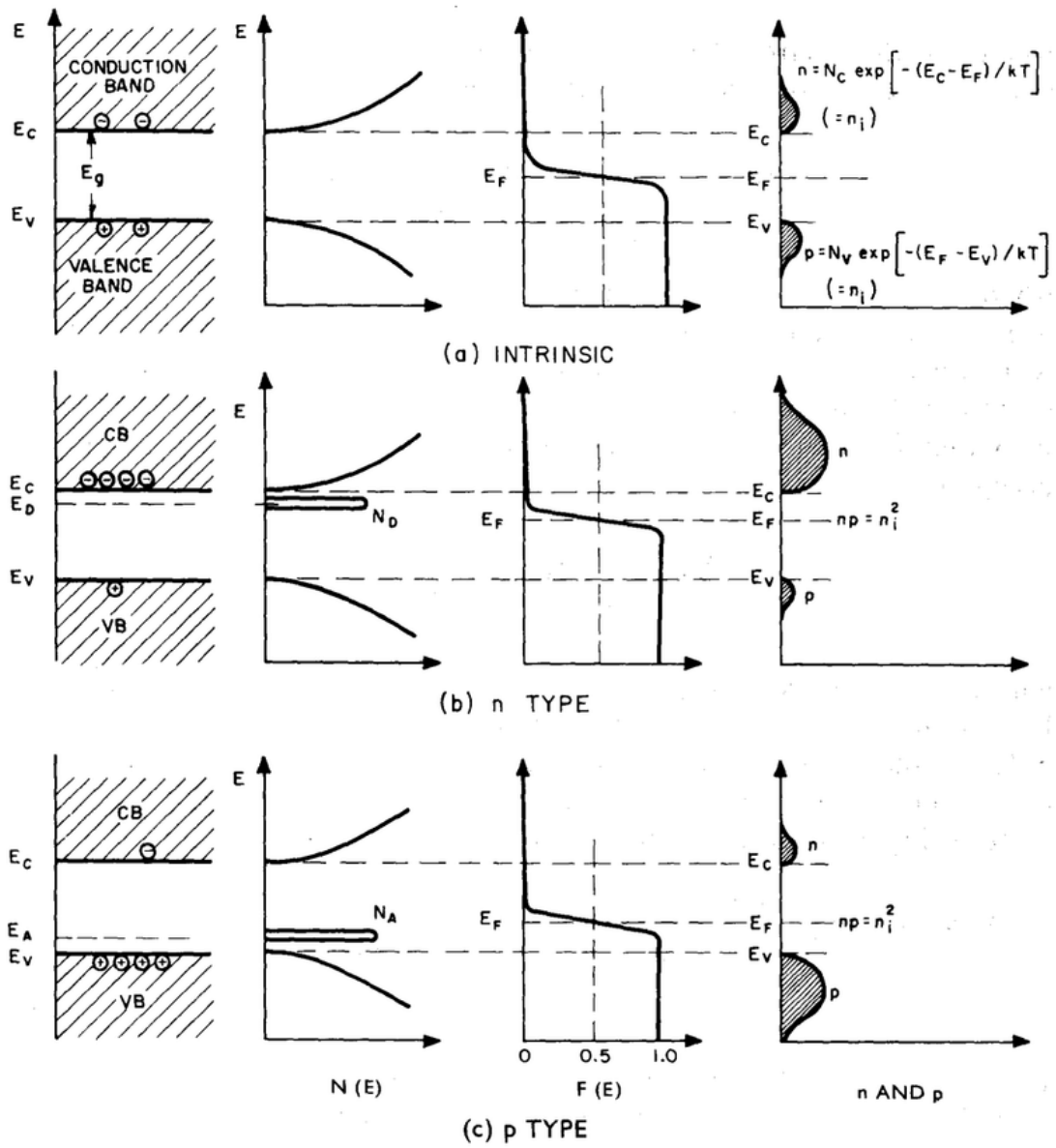
$$f(E) = \begin{cases} \mathbf{1}\ if\ \ 0 < E < E_F \\ \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}\ if\ \ E_F = E \\ \mathbf{0}\ \ if\ E_F < E \end{cases} \qquad (9)$$

1. احتمالية وجود إلكترون عند مستوى طاقة أقل من طاقة فيرمي هي 100 %
2. احتمالية وجود إلكترون عند مستوى طاقة تساوي طاقة فيرمي هي 50 %
3. احتمالية وجود إلكترون عند مستوى طاقة أعلى من فيرمي هي 0 %

و بذلك فيمكن إيجاد كثافة الإلكترونات (n) في أي مستوى طاقي من ناتج تكامل $g(E)f(E)dE$ و حدود التكامل تحدد المستويات المراد ايجاد كثافة الحالة بينها.

$$n = \int_{E_1}^{E_2} g(E)f(E)dE \qquad (10)$$

حيث يمثل E_2 المستوى الاعلى و E_1 المستوى الاوطئ.



مخططات توضح بنية حزم الطاقة وكثافة الحالات وتوزيع Fermi-Dirac لمستويات الطاقة (لدرجة حرارة غير صفرية) ، وتركيزات حامل الشحنة لـ شبه موصل (a) نقي ، (b) نوع n ، و (c) نوع P.

و عند تعويض المعادلات 6 و 7 و 8 في المعادلة 10 نجد ان كثافة الحلات في حزمتي التوصيل (N_C) و (N_C) التكافؤ تعطى بالعلاقتين الاتيتين:

$$N_C = 2\left(\frac{2\pi m_c^* k_B T}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \qquad (11)$$

$$N_V = 2\left(\frac{2\pi m_v^* k_B T}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \qquad (12)$$