

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

جلسه هفتم

نظریه بلوخ

و

مدل کرونیگ-پنی

نظریه بلوخ Bloch Theorem

مدل الکترون آزاد اولین مدل برای توصیف حرکت الکترون درون رساناها بود که در آن از دو فرض اساسی زیر استفاده شده بود:

الکترون ها با یون ها برهمکنش نمی کنند

(تقریب الکترون آزاد – Free Electron Approximation)

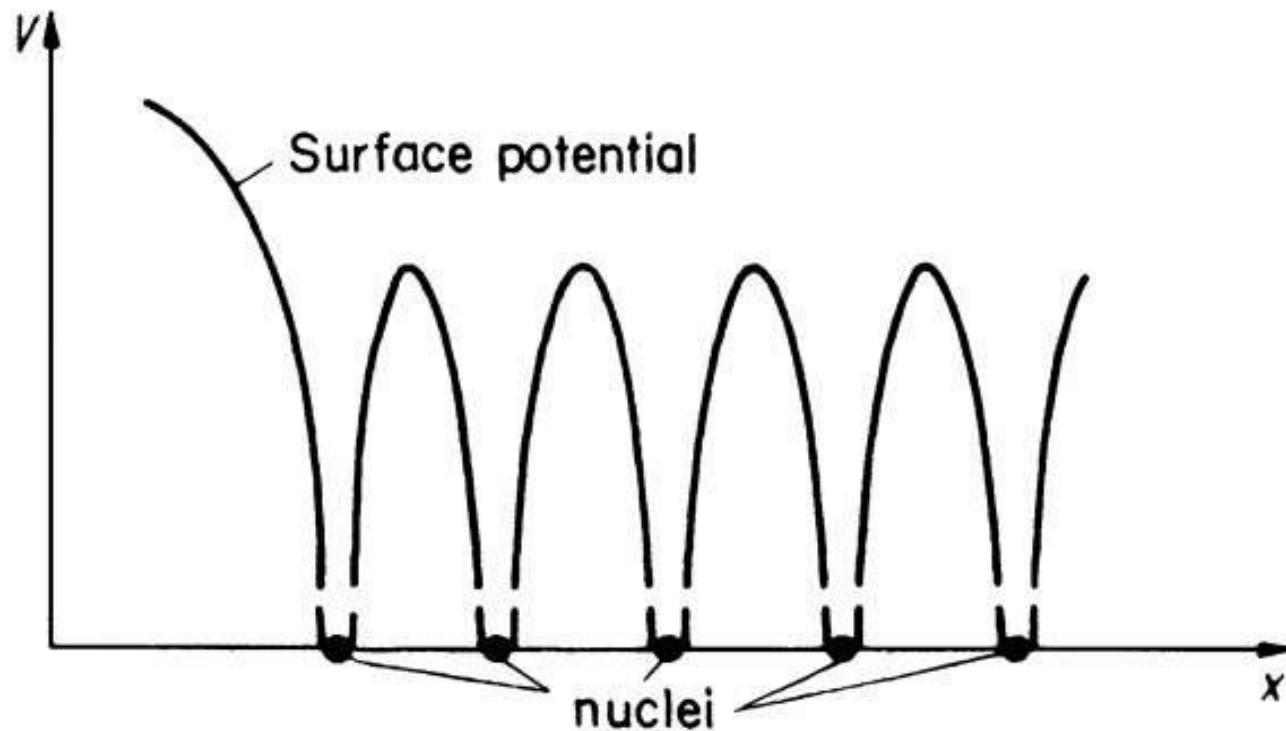
الکترون ها با یکدیگر برهمکنش نمی کنند

(تقریب الکترون مستقل – Independent Electron Approximation)

این مدل به علت عدم در نظر گرفتن پتانسیل درون بلور، برخی از پدیده های فیزیکی را نمی تواند توضیح دهد. از مهمترین آن ها تقسیم بندی جامدات به رسانا، نیمرسانا و نارسانا بود.

الکترون بلوخ الکترونی است که تحت تاثیر یک پتانسیل ضعیف در داخل بلور واقع می گردد. این پتانسیل ضعیف را گاهی پتانسیل موثر و یا شبه پتانسیل (Pseudopotential) می نامند. شکل زیر نمایی از پتانسیلی است که الکترون در یک شبکه یک بعدی با آن مواجه است.

در این مدل فرض بر این است که پتانسیل در محل یون ها، صفر و در میان آن ها مقدار مثبتی است.



معادله شرودینگر مستقل از زمان به صورت زیر
نوشته می شود:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U(\mathbf{r}) \right) \Psi_k(\mathbf{r}) = \varepsilon_k \Psi_k(\mathbf{r})$$

در اینجا پتانسیل دوره ای است.

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

تابع حالت بصورت زیر نوشته می شود:

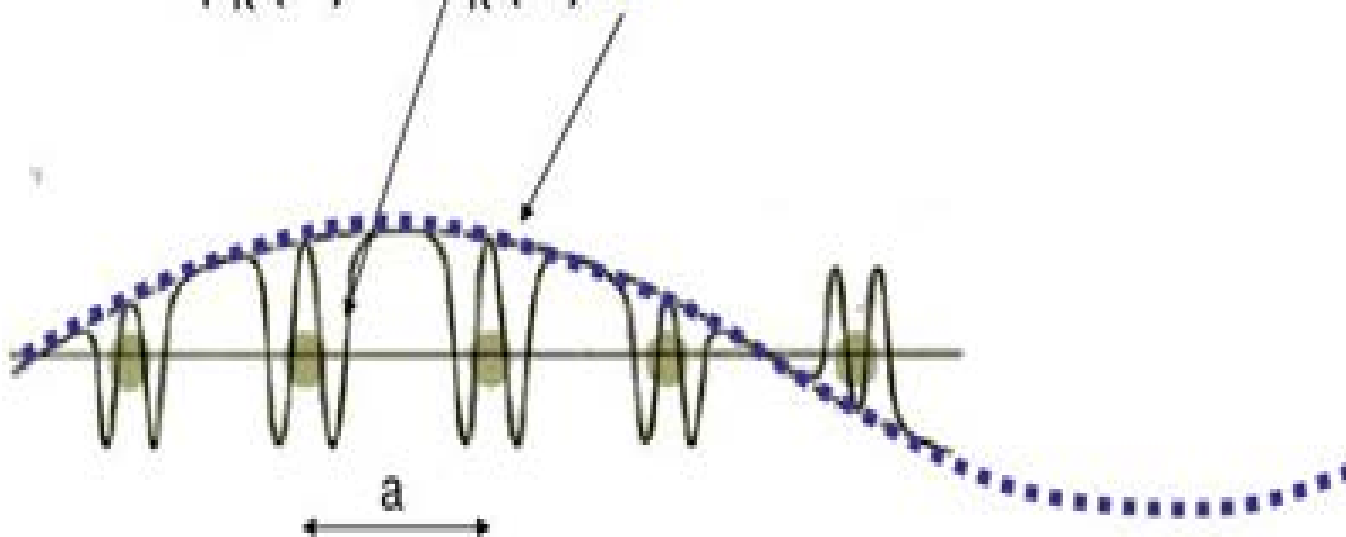
$$\Psi_k(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_k(\mathbf{r})$$

Envelope part

Periodic (unit cell) part

$$u_k(\mathbf{r}) = u_k(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

$$\psi_k(x) = u_k(x) e^{ikx}$$



$$\Psi_k(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} u_k(\mathbf{r}+\mathbf{R})$$

$$\Psi_k(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_k(\mathbf{r})$$

$$\Psi_k(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \Psi_k(\mathbf{r})$$

به این رابطه، تابع بلوخ می گویند.

با توجه به تابع بلوخ، تساوی زیر برقرار است.

$$\Psi_k(\mathbf{r})\Psi_k^*(\mathbf{r}) = \Psi_k(\mathbf{r}+\mathbf{R})\Psi_k^*(\mathbf{r}+\mathbf{R})$$

این رابطه نشان می دهد که احتمال یافتن یک الکترون در سرتاسر

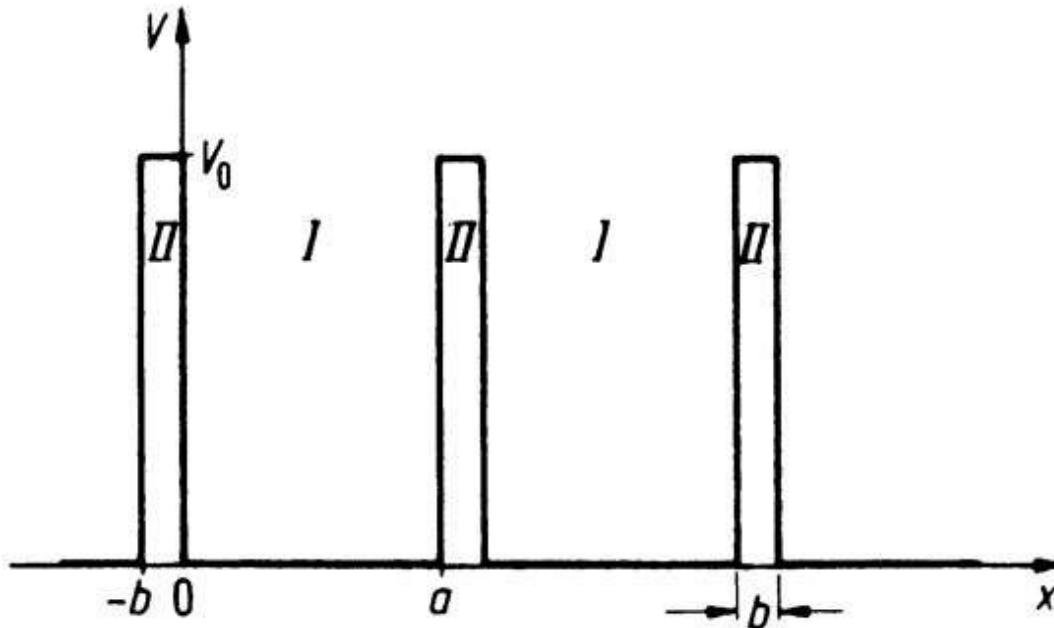
شبکه یکسان است. به تعبیر دیگر، الکترون رسانی متعلق به تمام

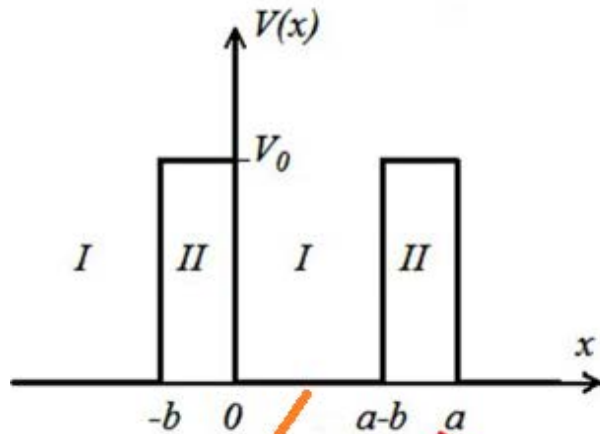
شبکه⁸ است و در کنار اتم خاصی جایگزیده نمی باشد.

مدل کرونیگ-پنی Kronig-Penney Model

این مدل مبتنی بر استفاده از الکترون بلوخ است.

در این مدل از یک پتانسیل خوش تعریف یک بعدی استفاده می گردد.





$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V[x] \right) \psi = E \psi$$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0$$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi = 0$$

قرار می دهیم:

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

$$\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$$

خواهیم داشت:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \alpha^2\Psi = 0 & \text{برای ناحیه I} \\ \frac{d^2\Psi}{dx^2} - \beta^2\Psi = 0 & \text{برای ناحیه II} \end{array} \right.$$

جواب های عمومی دستگاه فوق بصورت زیر داده می شود:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_I(x) = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x} \\ \Psi_{II}(x) = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x} \end{array} \right.$$

مرحله بعدی یافتن چهار مجهول A, B, C, D در دستگاه فوق به کمک شرایط مرزی است. می دانیم که Ψ ها و مشتقات مرتبه اول آن ها باید در مرز دو ناحیه با هم برابر باشند. یعنی:

$$\left. \Psi_I(x) \right|_{x=0} = \left. \Psi_{II}(x) \right|_{x=0} \quad (1)$$

$$\left. \Psi_I(x) \right|_{x=a} = \left. \Psi_{II}(x) \right|_{x=-b} \quad (3)$$

$$\left. \frac{d\Psi_I}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\Psi_{II}}{dx} \right|_{x=0} \quad (2)$$

$$\left. \frac{d\Psi_I}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{d\Psi_{II}}{dx} \right|_{x=-b} \quad (4)$$

از آنجائیکه باید شرط بلوخ نیز برقرار باشد، یعنی:

$$\Psi(x + a + b) = \Psi(x)e^{ik(a+b)}$$

$$\Psi(x) = \Psi(x + a + b)e^{-ik(a+b)} \quad \text{یا}$$

در $x=a$ و $x=-b$ روابط 3 و 4 به روابط زیر تبدیل می گردند:

$$\Psi_{II}(-b) = \Psi_I(a)e^{-ik(a+b)} \quad (5)$$

$$\left. \frac{d\Psi_{II}(x)}{dx} \right|_{x=-b} = \left. \frac{d\Psi_I(x)}{dx} \right|_{x=a} e^{-ik(a+b)} \quad (6)$$

حال اگر شرایط مرزی 1، 2، 5 و 6 را در دستگاه معادله جواب های عمومی اعمال نماییم، چهار رابطه زیر بدست می آید.

$$A + B = C + D$$

$$i\alpha(A - B) = \beta(C - D)$$

$$Ce^{-\beta b} + De^{\beta b} = e^{-ik(a+b)}[Ae^{i\alpha a} + Be^{-i\alpha a}]$$

$$\beta Ce^{-\beta b} - \beta De^{\beta b} = i\alpha e^{-ik(a+b)}[Ae^{i\alpha a} - Be^{-i\alpha a}]$$

شرط داشتن جواب های غیر صفر برای چهار مجهول A, B, C, D₁₄ این است که دترمینان ضرائب آن ها صفر باشد.

شرط داشتن جواب های غیر صفر برای چهار مجهول A, B, C, D این است که دترمینان ضرائب آن ها صفر باشد. یعنی:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ i\alpha & -i\alpha & -\beta & +\beta \\ e^{-ik(a+b)+i\alpha a} & e^{-ik(a+b)-i\alpha a} & -e^{-\beta b} & -e^{\beta b} \\ i\alpha e^{-ik(a+b)+i\alpha a} & i\alpha e^{-ik(a+b)-i\alpha a} & \beta e^{-\beta b} & -\beta e^{\beta b} \end{vmatrix} = 0$$

جواب دترمینان فوق معادله پاشندگی زیر است.

$$\cos(ka) = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} \sin(\alpha a) \sinh(\beta b) + \cos(\alpha a) \cosh(\beta b)$$

برای حل این معادله فرض های زیر بکار رفته است:

1. در محل یون ها پتانسیل صفر و در بین آن ها V_0 است.

2. ارتفاع سد پتانسیل (V_0) به بینهایت و عرض سد (b) به صفر

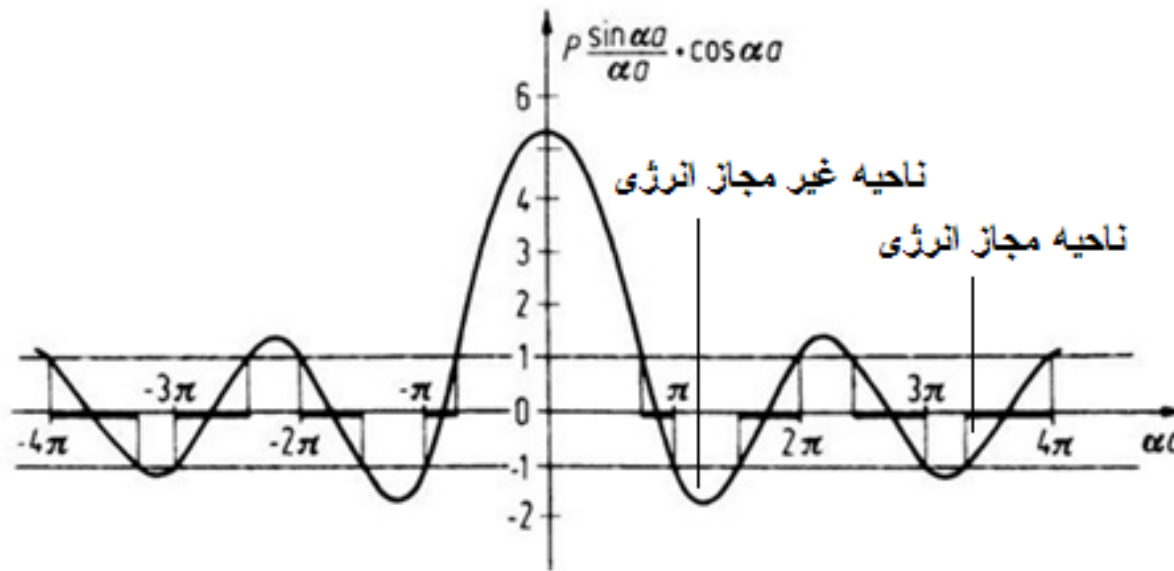
میل می کند بطوری که حاصلضرب $V_0 b$ مقداری متناهی

خواهد داشت. در این حال می توان نوشت:

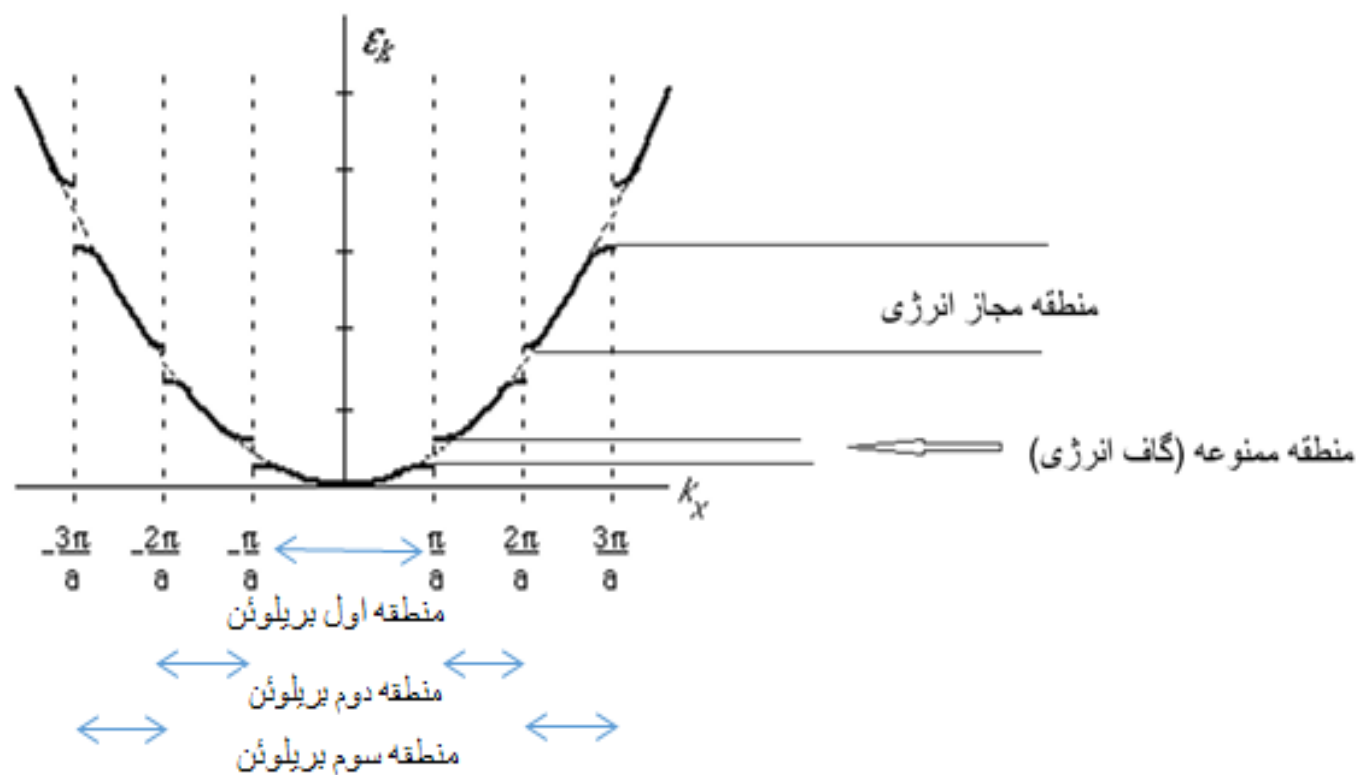
$$b \longrightarrow 0 \quad \sinh(\beta b) \longrightarrow \beta b, \quad \cosh(\beta b) \longrightarrow 1$$

به این ترتیب رابطه فوق به رابطه زیر ساده می گردد:

$$\cos(ka) = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} \beta b \sin(\alpha a) + \cos(\alpha a)$$



همانطور که مشاهده می شود مقادیر $\cos(ka)$ از بازه تعریف شده $+1$ و -1 برای $\cos$ خارج شده است. این نواحی معرف بازه غیر مجاز انرژی می باشد. که تعبیر دقیق تر آن "گاف انرژی" است. همچنین دیده می شود به تدریج که از قعر نوار دور می شویم ($k=0$) از عرض نوار ممنوعه کم شده و در عوض به عرض نوار مجاز اضافه می شود.



مساله 1: الف) کمترین انرژی الکترونی که در جعبه ای به ضلع 0.1nm محبوس است را بدست آورید.

ب) دمایی که در آن متوسط انرژی مولکول های یک گاز کامل برابر با کمترین انرژی الکترون می گردد را بدست آورید.

$$h = 6.62 \times 10^{-34}, m = 9.1 \times 10^{-31}, K_B = 1.38 \times 10^{-23}$$

مساله 2:

برای یک ذره آزاد نشان دهید که معادله موج شرودینگر (مستقل از زمان) منجر به رابطه دو بروی $(\lambda = h/p)$ می گردد.

باساس فراوان



مجله تصویری
TopNop.ir