فیزیک حالت جامد

ساختار الکترونی جامدات

مؤلف: محمد باقر فتحی

www.ketab.ir

دانشگاه خوارزمی

تهران، ۱۴۰۳

سرشناسه : فتحی، محمدباقر، ۱۳۵۵ -
عنوان و نام پدیدآور : فیزیک حالت جامد: ساختار الکترونیکی جامدات/ تالیف محمدباقر فتحی.
مشخصات نشر : تهران: دانشگاه خوارزمی،انتشارات، ۱۴۰۳.
مشخصات ظاهری : ۲۱۹ص.: مصور.
شابک : ۹۷۸-۶۲۲-۹۱۲۳۵-۸-۴
وضعیت فهرست نویسی : فیپا
یادداشت : کتابنامه.
عنوان دیگر : ساختار الکترونیکی جامدات.
موضوع : فیزیک حالت جامد Solid state physics
جامدات — خواص الکتریکی Solids -- Electric properties
شناسه افزوده : دانشگاه خوارزمی. انتشارات
رده بندی کنگره : QC۱۷۶/۵۳۰
رده بندی دیویی : ۵۳۰/۴۱۰۷۶
شماره کتابشناسی ملی : ۹۵۹۷۸۷۵
اطلاعات رکورد کتابشناسی : فیپا

www.ketab.ir

عنوان کتاب : **فیزیک حالت جامد -ساختار الکترونیکی جامدات**
نویسنده : دکتر محمدباقر فتحی
ناشر : دانشگاه خوارزمی
صفحه‌آرا : محمدباقر فتحی
طراح جلد : فاطمه منظور
نوبت و سال چاپ : اول، ۱۴۰۳
شابک : ۹۷۸-۶۲۲-۹۱۲۳۵-۸-۴
شمار : ۵۰۰ نسخه
قیمت : ۲۲۰۰۰۰۰ریال

کلیه حقوق مادی و معنوی این اثر متعلق به انتشارات دانشگاه خوارزمی است.

آدرس: تهران، خ شهید مفتح، شماره ۴۳، کدپستی ۱۴۹۱۱- ۱۵۷۱۹ تلفن مرکز پخش: ۸۸۳۱۱۸۶۶
www.khu.ac.ir pub@khu.ac.ir

فهرست مطالب

پیشگفتار هفت

۱ شکست تقارن و حالت‌های ماده ۱

۱.۱ مقدمه ۲

۲.۱ حالت‌های ماده ۲

۳.۱ نظم (بلندبرد یا کوتاه‌برد) و شکست تقارن ۵

۱.۳.۱ نظم کوتاه‌برد: تابع توزیع جفت ۵

۲.۳.۱ ضریب ساختار برای مایعات ۸

۳.۳.۱ طیف‌سنجی ماده با پراکندگی ۱۱

۴.۳.۱ طیف جذب ۱۲

۴.۱ حالت گازی ۱۲

۵.۱ حالت مایع ۱۳

۶.۱ حالت جامد ۱۵

۷.۱ دسته‌بندی جامدات ۱۷

۱.۷.۱ برخی ترکیبات آلی ساده ۱۸

۸.۱ ساختار منظم جامد ۱۹

۹.۱ ساختارهای بی‌فرجه ۲۰

۲ گاز الکترونی کلاسیکی ۲۳

۱.۲ مقدمه ۲۳

www.ketab.ir

۲.۲ رژیم‌های مختلف مایع فرمی غیرِ برهمکنشی ۲۴
۱.۲.۲ گاز الکترونی: الکترون‌های اهلی در فلز ۲۵
۲.۲.۲ مدل ژله‌ای ۲۶
۳.۲ نظریهٔ درود ۲۸
۱.۳.۲ فرض‌های نظریهٔ درود ۲۸
۲.۳.۲ گفتگویی دربارهٔ زمان واهلش و زمان برخورد ۳۰
۳.۳.۲ معادلهٔ حرکت الکترون‌ها در تقریب زمان واهلش ۳۵
۴.۲ کاربردهای نظریهٔ درود ۳۶
۵.۲ قانون اهم ۳۶
۱.۵.۲ رسانایی الکتریکی مستقیم ۳۹
۲.۵.۲ رسانایی الکتریکی متناوب ۴۰
۶.۲ شفافیت اپتیکی فلزات و پلاسمون ۴۱
۷.۲ رسانایی گرمایی ۴۵
۸.۲ اثر هال ۴۹
۹.۲ محدودیت‌های نظریهٔ درود ۵۰

۳ گاز الکترونیِ کوانتمی ۵۵
۱.۳ نظریهٔ سامرفلد ۵۶
۱.۱.۳ توضیحی دربارهٔ واهلش در سامانه‌های کوانتمی ۵۶
۲.۱.۳ الکترون‌ها در جعبه ۵۷
۳.۱.۳ عدد موج فرمی ۵۸
۲.۳ گاز الکترونی در دمای صفر ۶۰
۱.۲.۳ چگالی حالت‌های الکترونی ۶۰
۲.۲.۳ عدد موج فرمی، انرژی فرمی، سطح فرمی ۶۲
۳.۳ *سامانه‌های نانومقیاس ۶۴
۴.۳ توابع ترمودینامیک ۶۶
۱.۴.۳ سخنی دربارهٔ چگالی حالت‌ها ۶۷
۲.۴.۳ انرژی گاز الکترونی ۶۷
۳.۴.۳ مدول کپه‌ای گاز الکترونی ۶۷
۵.۳ گاز الکترونی در دمای متناهی (ناصفر) ۶۸
۱.۵.۳ قضیهٔ آمار کوانتمی ۶۸

www.ketab.ir

۲.۵.۳ آمار فرمی‌ـدیراک ۶۹
۶.۳ توابع ترمودینامیک در دمای متناهی ۷۰
۱.۶.۳ چگالی طیفی ۷۱
۷.۳ محاسبهٔ توابع ترمودینامیک در دمای متناهی ۷۲
۱.۷.۳ بسط سامرفلد ۷۳
۲.۷.۳ پتانسیل شیمیایی، جانشین انرژی فرمی در دمای ناصفر ۷۶
۳.۷.۳ انرژی گاز الکترونی و مدول کپه‌ای در دمای متناهی ۷۷
۴.۷.۳ ظرفیت گرمایی گاز الکترونی ۷۷
۸.۳ آنتروپی گاز الکترونی آزاد ۷۸
۹.۳ برانگیختگی‌های ابتدایی در گاز الکترونی آزاد ۷۹
۱۰.۳ *بازمقیاس‌سازی ۸۰
۱۱.۳ *برانگیختگی در سامانهٔ غیرِ برهمکنشی ۸۰
۱.۱۱.۳ پیوستار ذره‌ـحفره ۸۱
۱۲.۳ برانگیختگی در سامانهٔ غیر منزوی ۸۱
۱۳.۳ استتار کولنی ۸۲
۱۴.۳ ترازهای انرژی گاز الکترونی آزاد در میدان مغناطیسی (ترازهای لاندائو) ۸۳
۱.۱۴.۳ تصویر گاز الکترونی آزاد تا کجا درست است؟ ۸۵

۴ عناصر جدول تناوبی: ساختار اتم ۸۹

۱.۴ مقدمه ۸۹
۲.۴ مرور جدول تناوبی عناصر ۹۰
۱.۲.۴ گروه(های) عناصر ۹۲
۳.۴ هیدروژن ۹۳
۱.۳.۴ نام‌گذاری ترازها ۹۵
۴.۴ خواص اربیتال‌های اتمی ۹۷
۱.۴.۴ گستردگی و تمرکز اربیتال‌های اتمی ۹۷
۵.۴ ساختار الکترونی اتم (مبتنی بر تقریب میدان مرکزی) ۱۰۰
۱.۵.۴ اتم‌های هیدروژن‌گونه ۱۰۰
۲.۵.۴ تقریب میدان مرکزی ۱۰۱
۳.۵.۴ نحوهٔ پر شدن ترازها: قواعد هوند ۱۰۲
۴.۵.۴ شعاع‌های یونی مؤثر ۱۰۴

www.ketab.ir

۶.۴ فلزات، عایق‌ها، شبه فلزات ۱۰۴

۵ پیوندهای شیمیایی: ساختار ملکول ۱۰۷

۱.۵ مقدمه ۱۰۸

۲.۵ تقارن و کاربردهای آن ۱۰۹

۳.۵ پیوندهای شیمیایی ۱۱۰

۱.۳.۵ پتانسیل لنارد-جونز ۱۱۰

۲.۳.۵ ثابت‌های تعادلی شبکه (ضرایب مادلانگ) ۱۱۴

۳.۳.۵ پیوند شیمیایی ۱۱۶

۴.۵ نظریهٔ پیوند ظرفیت یا جفت‌الکترون ۱۱۸

۱.۴.۵ عدد هم‌آرایی ۱۲۰

۵.۵ نظریهٔ اربیتال‌های ملکولی ۱۲۰

۱.۵.۵ نظریهٔ اربیتال‌های ملکولی ۱۲۱

۲.۵.۵ ترکیب خطی توابع پایه ۱۲۳

۳.۵.۵ انتخاب توابع پایه ۱۲۴

۴.۵.۵ اربیتال‌های ملکولی ـ ترکیب خطی اربیتال‌های اتمی ۱۲۴

۵.۵.۵ ملکول دو اتمی با اتم‌های یکسان ۱۲۴

۶.۵.۵ روش وردشی ۱۲۸

۷.۵.۵ ملکول دو اتمی با اتم‌های مختلف: قطبش پیوند ۱۲۸

۸.۵.۵ نگاه دیگری به اربیتال‌های ملکول‌های دواتمی ۱۳۰

۶.۵ ملکول Nـاتمی ۱۳۳

۱.۶.۵ زنجیرهٔ Nـاتمی ۱۳۳

۲.۶.۵ شرط مرزی تناوبی ۱۳۵

۷.۵ نمایش ماتریسی محاسبات ترکیب خطی اربیتال‌های اتمی ۱۳۷

۸.۵ خلاصه ۱۳۸

۶ نظریهٔ نواری ۱۴۷

۱.۶ مقدمه ۱۴۷

۲.۶ تقارن انتقالی و توابع موج ۱۴۹

۱.۲.۶ *توابع ماتیو و قضیهٔ فلوکه ۱۵۱

۲.۲.۶ قضیهٔ فلوکه برای هامیلتونی متناوب با زمان ۱۵۶

www.ketab.ir

۳.۲.۶ بسط حالت‌های فلوکه بر حسب سری گسستهٔ فوریه ۱۵۸
۴.۲.۶ پتانسیل متناوب کسینوسی ۱۵۹
۳.۶ قضیهٔ بلوخ ۱۶۰
۱.۳.۶ پتانسیل تناوبی و شرط مرزی بورن‌ـفون‌کارمن ۱۶۱
۲.۳.۶ قضیهٔ بلوخ: اثبات اول (بر اساس قضیهٔ فلوکه) ۱۶۴
۳.۳.۶ قضیهٔ بلوخ: اثبات دوم (بر اساس تبدیل فوریه) ۱۶۵
۴.۳.۶ قضیهٔ بلوخ: اثبات سوم (بر اساس تقارن) ۱۶۷
۴.۶ مدل کرونیگ‌ـپنی ۱۷۰
۱.۴.۶ حالت‌های حدی ۱۷۱
۵.۶ قضیهٔ بلوخ برای شبکه‌های دوبعدی و سه‌بعدی ۱۷۲
۱.۵.۶ ضرایب فوریهٔ پتانسیل تناوبی و شرط مرزی بورن‌ـفون‌کارمن (نقاط شبکهٔ معکوس) ۱۷۲
۲.۵.۶ معادلهٔ شرودینگر در پتانسیل تناوبی ۱۷۴
۳.۵.۶ قضیهٔ بلوخ ۱۷۵
۴.۵.۶ رابطهٔ پاشندگی در نظریهٔ بلوخ ۱۷۶
۶.۶ انتگرال‌گیری بر فضای k ۱۷۷
۱.۶.۶ سطح فرمی ۱۷۷
۲.۶.۶ رهیافت الکترون آزاد (شبکهٔ خالی) ۱۸۰
۳.۶.۶ اثر دوهاس‌ون‌آلفن ۱۸۰
۷.۶ برخی جنبه‌های دینامیکی الکترون در نظریهٔ نواری ۱۸۲
۱.۷.۶ ترازهای انرژی حالت‌های بلوخ ۱۸۴
۲.۷.۶ نظریهٔ الکترونِ تقریباً آزاد ۱۸۴
۸.۶ خلاصه ۱۸۶

۷ کاربردهای نظریهٔ نواری ۱۹۳
۱.۷ روش ویگنر‌ـسایتز ۱۹۴
۱.۱.۷ انرژی چسبندگی ۱۹۴
۲.۷ دسته‌بندی پیوندهای شیمیایی بر اساس ساختار الکترونی ۱۹۶
۳.۷ منطقهٔ بریلوئن ۱۹۶
۴.۷ تقریب بستگی قوی ۱۹۶
۱.۴.۷ پتانسیل و هامیلتونی بستگی قوی ۱۹۸

www.ketab.ir

	۲.۴.۷	ترکیب خطی اربیتال‌های اتمی: جمع بلوخ	۱۹۹
	۳.۴.۷	نوار انرژی اربیتال ۱s	۲۰۰
	۴.۴.۷	یک مثال یک بعدی	۲۰۱
۵.۷		خلاصه	۲۰۲

نمایه **۲۰۶**

www.ketab.ir

پیشگفتار

فیزیک حالت جامد به زیرحوزه‌ای از فیزیک مادهٔ چگال[1] اطلاق می‌شود که به بررسیِ خواص ماده در حالت جامد اختصاص دارد و نامش از تبلیغات تجاری، همزمان با توسعهٔ ترانزیستورها و ادوات الکترونیکی توسط برخی شرکت‌های بازرگانی قرن بیستم، بر گرفته شده است. وظیفهٔ این علم بررسی خواص ماده در حالت جامد و اِدراک و تبیین ارتباط این خواص با ساختار درونی جامد است. روشن ساختن سازوکار بسیاری از پدیده‌های تجربی در ابزارهای ساخته از جامدات، از قبیل رسانایی الکتریکی و استحکام ماده و تغییر فاز از حالتی به حالتی دیگر تحت فشار و دما، از جمله اهدافی است که محققان فیزیک حالت جامد دنبال می‌کنند. در این کتاب، مقدمه‌ای از تلاش‌های فکری بشر را در دوران معاصر برای درک رفتار ماده در حالت جامد و اندکی در مادهٔ چگال مطالعه می‌کنیم.

حل مسائل در فیزیک حالت جامد نیازمند آگاهی از قوانین نیرو و توصیف‌کنندهٔ رفتارهای جمعی ذرات از قبیل اتم‌ها و ملکول‌هاست و به همین دلیل، به‌وفور از قوانین متوسط‌گیری‌های آماری و ترمودینامیک استفاده می‌کند. اگر از خاصیت آماری ذرات که دارای تعداد معتنابهی است بهره بگیریم، مکانیک آماریِ آنها را می‌توان با نظریهٔ میدان توصیف کرد. برای آنکه بتوانیم مسائل حالت جامد (یا در حالت کلی، مادهٔ چگال) را حل کنیم، باید به ابزارهایی از ترمودینامیک و مکانیک آماری مجهز شویم. این ابزارها را در بسیاری از کتاب‌ها می‌توانید بیابید. توصیه می‌کنم، قبل از ورود به مباحث بعدی، آنها را مطالعه کنید تا بهتر بتوانیم به سراغ مسائل حالت

---

۱. علم مادهٔ چگال، مجموعه‌ای از روش‌ها برای شناسایی و درک خواص مواد در حالت چگال است. لفظ «مادهٔ چگال» را پ. آ. اندرسون، بنا به گفتهٔ خود، در تغییر نام گروه تحقیقاتی خود و همکارانش به کار برد، ولی، تعریف دقیقی از آن ارائه نکرد. این لفظ با تمامی ابهاماتی که دارد، به طور کلی، به مایعات و جامدات اطلاق می‌شود. علم مادهٔ چگال نیز بر آن دسته از سامانه‌های بس‌ذره‌ای برهمکنشی اطلاق می‌شود که رفتارشان از گاز به سمت سامانه‌های چگال‌تر از جمله مایعات و سپس جامدها تمایل می‌یابد و اغلب مبتنی بر علوم دیگر و حتی توصیف‌کنندهٔ آنهاست. در واقع، روش‌های فیزیک مادهٔ چگالِ پیشرفته همان روش‌های نظریهٔ میدان کوانتمی برای سامانه‌های بس‌ذره‌ای است.

www.ketab.ir

جامد و مادهٔ چگال برای شناخت رفتار ماده برویم.

از طرفی، هر نوع مطالعهٔ ماده، به خصوص، در مشخصه‌یابی، نیازمند آشنایی با مفهوم شکست تقارن است که محتوای فصل اول کتاب را تشخیص می‌دهد. به نظر نویسنده، این نوع رویکرد مزایایی بر دیگر روش‌های آموزشی دارد. یکی از مهمترینِ این مزیت‌ها، تأکید بر سنگ بنای نظریات حالت جامد یعنی توصیف مادهٔ کپه‌ای بر اساس رفتار جمعی ذرات است. بنابراین، در فصل اول این کتاب، رفتار کپه‌ای ماده را در فازهای مختلف و مشخصه‌های اساسی هریک را در نمودارهای تجربیِ مشخصه‌یابی، بالاخص با اشعهٔ ایکس، می‌خوانیم.

این روزها، سامانه‌ها و ابزارهای نانومتری رشد روزافزون یافته است و همه می‌دانند که مهندسی و طراحی ابزار از پایین به بالا نیاز مبرمی به شناختِ رفتار ماده بر اساس الگوهای چندتایی از اتم یا ملکول در مقیاس نانومتری دارد. به همین دلیل، در ادامه، برای ارائهٔ توصیف عینی و شهودی از نحوهٔ شکل‌گیری مادهٔ جامد و توضیحِ چرایی خواص عجیب این مواد در فاز بلوری، با واحدهای سازندهٔ ماده آشنا می‌شویم.

پس از معرفی کردنِ ساختارهای بنیادین در فیزیک حالت جامد، با شیبی ملایم و طبیعی به نظریهٔ اربیتال‌های ملکولی و سپس «ترکیب خطی اربیتال‌های اتمی» می‌رسیم که تقریب بسیار مهمی در فیزیک حالت جامد است. این تقریبْ زیربنای تقریبِ بستگی قوی است که مبنای بسیاری از نظریات پیشرفته‌تر است. دلیل دیگر این انتخاب آن است که محاسبات ساختار الکترونی نقطهٔ شروع هر نوع دست‌اندازی به دنیای شگفت‌انگیز خواص ماده و لازمهٔ طراحی ابزار بر اساس خاصه‌هاست. برای مثال، روش‌های تابعی چگالی که این روزها روشی پرطرفدار و مشهور است، بر تقریب‌های تک‌الکترونی از بلورها و ساختارهای متجانس مبتنی است. به همین دلیل، رویکرد متداولِ آموزش حالت جامد، مبتنی بر شناختِ نظم هندسی را مقدمتاً کنار گذاشته‌ام و به جز در هنگام نیاز، به تقارن‌ها متوسل نشده‌ام.[1]

از منظر آموزگاران فیزیک حالت جامد، نیز، چنانکه مشهور است، رویکرد دانشنامه‌ای و سنتی سرفصل‌های کتاب‌های معروف حالت جامد چندان راضی‌کننده نیست. مخصوصاً، فعالانِ دنیای فناوری و صنعت از کتاب‌های حالت جامد به دشواری و سختی می‌توانند پاسخ پرسش‌های خود را بیابند. به همین دلیل، برای خواندنی‌تر شدن این کتاب، علاوه بر انتخاب رویکرد آموزشی مزبور، سعی کرده‌ام مطالب را، در عین اینکه مختصر و مفید است، با استخراج تمامی روابط بیاورم تا نه حجم آن خسته‌کننده شود نه ناقص بماند.

همچنین، در انتهای هر فصل، تمرین‌هایی را در قالب اثبات برخی روابط یا بررسی مصداق‌ها گنجانده‌ام تا دانشجویان در به کار گرفتنِ فنون این علم مهارت بیابند (تعداد اندکی از آنها ستاره دارد که نشانگر دشوارتر بودنِ آنهاست). بنابراین، تمام تلاش و اهتمام نویسنده بر آن بوده است که خودآموزی در زمینهٔ فیزیک حالت جامد ارائه دهد و به همین دلیل است که کتاب پیش رو را می‌توان، علیرغم تفاوت‌هایی که در چینش فصل‌ها و تبویب آن دارد، تا اندازه‌ای شرح کتاب‌های موجود حالت جامد دانست.

در برخی فصل‌ها، چند بخش با علامت ستاره مشخص شده است. خوانندهٔ مبتدی می‌تواند خواندنِ این

---

۱. با همین استدلال و نیز از آنجا که بلورشناسی علم مفصلی است، مطالب بلورشناسی را در این کتاب نیاورده‌ام؛ خوانندگان علاقه‌مند می‌توانند به کتاب بلورشناسی، فتحی، مراجعه کنند.

www.ketab.ir

بخش‌ها را، با همهٔ اهمیتشان، به زمانی دیگر که، به مطالب پیشرفتهٔ حالت جامد نیاز یافت، موکول کند.

کتابِ حاضر سومین عضو از مجموعهٔ فیزیک مادهٔ چگالِ اینجانب است: ۱. بلورشناسی، ۲. دینامیک سیالات برای فیزیک‌دانان (نوشته: تام ای. فِیبر، ترجمه: فتحی)، ۳. فیزیک حالت جامد، جلد اول: ساختار الکترونی ماده. آنها را به هم‌وطنان و دیگر علاقه‌مندانِ کتب علم فیزیک به زبان فارسی تقدیم می‌کنم. امیدوارم پس از مطالعهٔ این کتاب، نویسنده را از نظرات ارزشمند خود بی‌نصیب نسازند.

محمدباقر فتحی — تهران، رمضان (فروردین ۱۴۰۳)

drfathi.blogfa.com; condmat.ir (aparat)

www.ketab.ir