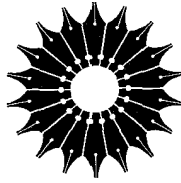


فیزیک حالت جامد آشنایی با

چارلز کیتل

ویراست هشتم

ترجمه
اعظم پورقازی
مهدی صفاصفهانی
جمشید عمیقیان



آشنایی با

فیزیک حالت جامد

(ویراست هشتم)

چارلز کیتل

ترجمه

اعظم پورقازی، مهدی صفاصفهانی، جمشید عمیقان

مرکز نشر دانشگاهی

بسم الله الرحمن الرحيم

فهرست

صفحه	عنوان
۱	در باره مؤلف
۳	پیشگفتار
۵	۱ ساختار بلوری
۵	آرایه‌های دوره‌ای آنها
۱۰	انواع اصلی شبکه‌ها
۱۳	دستگاه شاخص‌گذاری صفحات بلوری
۱۸	ساختارهای بلوری ساده
۲۶	تصویربرداری مستقیم از ساختار اتمی
۲۶	وقوع ساختارهای بلوری غیرایده‌آل
۲۷	داده‌های مربوط به ساختار بلوری
۲۷	چکیده
۳۰	مسائل

۳۱	پراش موج و شبکه وارون	۲
۳۱	پراش امواج توسط بلورها	
۳۳	دامنه موج پراکنده شده	
۴۱	منطقه‌های بریلوتن	
۴۸	تحلیل فوریه پایه	
۵۴	چکیده	
۵۵	مسائل	
۵۷	بستگی بلور و ثابتهای کشسانی	۳
۶۲	بلورهای گازهای بی اثر	
۷۱	بلورهای یونی	
۷۶	بلورهای کووالانسی	
۸۰	فلزها	
۸۱	پیوندهای هیدروژنی	
۸۲	شعاعهای اتمی	
۸۵	تحلیل کرنشهای کشسان	
۸۸	ثابتهای سفتی و تن دهی کشسانی	
۹۳	امواج کشسان در بلورهای مکعبی	
۹۹	چکیده	
۹۹	مسائل	
۱۰۴	فونونها (۱). ارتعاشهای بلوری	۴
۱۰۴	ارتعاشهای بلورهای با پایه تک‌اتمی	
۱۰۹	سرعت گروه	
۱۱۱	دو اتم در پایه بسیط	
۱۱۶	کوانتس امواج کشسان	
۱۱۷	تکانه فونون	
۱۱۸	پراکندگی ناکشسان توسط فونونها	
۱۱۹	چکیده	
۱۲۰	مسائل	

۱۲۳	۵	فونونها (۲). ویژگیهای گرمایی
۱۲۳		ظرفیت گرمایی فونون
۱۳۷		برهمکنشهای ناهماهنگ در بلورها
۱۴۰		رسانندگی گرمایی
۱۴۷		مسائل
۱۵۰	۶	گاز فرمی الکترون آزاد
۱۵۲		ترازهای انرژی در یک بعد
۱۵۴		اثر دما روی توزیع فرمی-دیراک
۱۵۵		گاز الکترون آزاد در سه بعد
۱۶۰		ظرفیت گرمایی گاز الکترون
۱۶۷		رسانندگی الکتریکی و قانون اهم
۱۷۳		حرکت در میدانهای مغناطیسی
۱۷۷		رسانندگی گرمایی فلزها
۱۷۸		مسائل
۱۸۲	۷	نوارهای انرژی
۱۸۴		مدل الکترون تقریباً آزاد
۱۸۸		توابع بلوخ
۱۸۹		مدل کرونیگ-پنی
۱۹۰		معادله موج الکترون در پتانسیل دوره‌ای
۲۰۲		تعداد اوربیتالها در نوار
۲۰۴		چکیده
۲۰۵		مسائل
۲۰۷	۸	بلورهای نیمرسانا
۲۱۰		گاف نواری
۲۱۱		معادلات حرکت
۲۲۷		غلظت حاملهای ذاتی
۲۳۳		رسانندگی ناخالصی
۲۳۸		آثار ترموالکتریکی

۲۴۰	نیمه فلزها	
۲۴۱	ابر شبکه‌ها	
۲۴۳	چکیده	
۲۴۳	مسائل	
۲۴۵	سطوح فرمی و فلزات	۹
۲۴۹	ترسیم سطوح فرمی	
۲۵۴	مدارهای الکترون، مدارهای حفره، و مدارهای باز	
۲۵۶	محاسبه نوارهای انرژی	
۲۶۹	روشهای تجربی در بررسیهای سطح فرمی	
۲۸۰	چکیده	
۲۸۱	مسائل	
۲۸۵	ابرسیانایی	۱۰
۲۸۶	مروری بر کارهای تجربی	
۲۹۹	مرور نظری	
۳۲۶	ابرسیاناهای دمای بالا	
۳۲۷	چکیده	
۳۲۷	مسائل	
۳۳۰	دیامغناطیس و پارامغناطیس	۱۱
۳۳۲	معادله لانژون در مورد دیامغناطیس	
۳۳۳	نظریه کوانتومی دیامغناطیس در مورد دستگاههای تک هسته‌ای	
۳۳۴	پارامغناطیس	
۳۳۴	نظریه کوانتومی پارامغناطیس	
۳۴۶	سرمایش به وسیله و امغناطیدگی آیزنتروپیک	
۳۴۹	پذیرفتاری پارامغناطیسی الکترونیهای رسانش	
۳۵۲	چکیده	
۳۵۲	مسائل	

۳۵۶	۱۲	فرومغناطیس و پادفرومغناطیس
۳۵۶		نظم فرومغناطیسی
۳۶۴		مگنون
۳۷۰		پراکندگی مغناطیسی نوترون
۳۷۱		نظم فری مغناطیسی
۳۷۶		نظم پادفرومغناطیسی
۳۹۱		ذرات تک حوزه
۳۹۵		چکیده
۳۹۵		مسائل
۳۹۹	۱۳	تشدید مغناطیسی
۴۰۰		تشدید مغناطیسی هسته
۴۰۸		پهنای خط
۴۱۱		شکافتگی فوق ریز
۴۱۷		تشدید چهارقطبی هسته‌ای
۴۱۸		تشدید فرومغناطیسی
۴۲۵		تشدید پارامغناطیسی الکترون
۴۲۶		اساس کار میزر
۴۳۰		چکیده
۴۳۱		مسائل
۴۳۳	۱۴	پلاسمونها، پولاریتونها، و پولارونها
۴۳۳		تابع دی‌الکتریک گاز الکترونی
۴۴۱		پلاسمونها
۴۴۱		استتار الکتروستاتیکی
۴۵۲		پولاریتونها
۴۵۸		برهم‌کنش الکترون-الکترون
۴۶۳		برهم‌کنش الکترون-فونون: پولارونها
۴۶۶		ناپایداری پایرلز در فلزات خطی
۴۶۸		چکیده
۴۶۹		مسائل

۴۷۲	۱۵	فرایندهای اپتیکی و اکسیتونها
۴۷۳		بازتاب اپتیکی
۴۷۹		اکسیتونها
۴۹۰		اثر رامان در بلورها
۴۹۴		اتلاف انرژی ذرات سریع در جامدها
۴۹۶		چکیده
۴۹۷		مسائل
۵۰۰	۱۶	دی الکتریکها و فروالکتریکها
۵۰۲		میدان الکتریکی ماکروسکوپی
۵۰۶		میدان الکتریکی موضعی در محل اتم
۵۱۰		ثابت دی الکتریک و قطبش پذیری
۵۱۴		گذارهای فاز ساختاری
۵۱۵		بلورهای فروالکتریک
۵۲۰		گذارهای جابه جاشونده
۵۳۲		چکیده
۵۳۳		مسائل
۵۳۷	۱۷	فیزیک سطح و فصل مشترک
۵۳۷		بازسازی و واهلش
۵۳۹		بلورنگاری سطح
۵۴۴		ساختار الکترونی سطح
۵۴۸		مغناطومقاومت در کانال دوبعدی
۵۵۴		پیوندگاههای $p-n$
۵۵۹		ساختارهای چندگن (هترو ساختارها)
۵۶۲		لیزرهای نیمرسانا
۵۶۴		دیودهای نور گسیل
۵۶۵		مسائل
۵۶۸	۱۸	نانوساختارها
۵۷۰		روشهای تصویر برداری از نانوساختارها

۵۸۱	ساختار الکترونی دستگاههای ۱D	
۵۸۷	ترابرد الکتريکي در ۱D	
۵۹۸	ساختار الکترونی دستگاههای ۰D	
۶۰۷	ترابرد الکتريکي در ۰D	
۶۱۳	ویژگیهای ارتعاشی و گرمایی	
۶۱۹	چکیده	
۶۱۹	مسائل	
۶۲۲	جامدهای نانوبلورین	۱۹
۶۲۲	نقش پراش	
۶۳۰	شیشه‌ها	
۶۳۲	فرومغناطیسهای بی‌شکل	
۶۳۳	نیمرساناهای بی‌شکل	
۶۳۵	برانگیختگیهای با انرژی پایین در جامدهای بی‌شکل	
۶۳۸	تارهای نوری	
۶۴۰	مسئله	
۶۴۱	ناراستیهای نقطه‌ای	۲۰
۶۴۲	تهیج‌های شبکه	
۶۴۵	پخش	
۶۴۹	مراکز رنگ	
۶۵۳	مسائل	
۶۵۵	دررفتگیها	۲۱
۶۵۶	مقاومت برشی تک‌بلورها	
۶۵۹	دررفتگیها	
۶۷۲	مقاومت آلیاژها	
۶۷۴	دررفتگیها و رشد بلور	
۶۷۶	سختی مواد	
۶۷۸	مسائل	

۶۷۹	۲۲	آلیاژها
۶۷۹		ملاحظات کلی
۶۸۳		محلولهای جامد جانشانی شده — قواعد هیوم-روتیری
۶۸۷		تبدیل بانظم - بی نظم
۶۹۲		نمودارهای فازي
۶۹۴		آلیاژهای فلزات واسطه
۶۹۸		اثر کاندو
۷۰۰		مسائل
۷۰۱		پیوست الف وابستگی خطوط بازتاب به دما
۷۰۵		پیوست ب روش محاسبه اوالد برای جمع زنیهای شبکه‌ای
۷۱۱		پیوست ج کوانتس امواج کشسان: فونونها
۷۱۷		پیوست د تابع توزیع فرمی-دیراک
۷۲۱		پیوست ه به دست آوردن معادله dk/dt
۷۲۴		پیوست و معادله ترابرد بولترمن
۷۳۱		پیوست ز پتانسیل برداری، تکانه میدان، و تبدیلات پیمانه‌ای
۷۳۷		پیوست ح زوجهای کوپر
۷۴۰		پیوست ط معادله گینزبرگ-لانداؤ (GL)
۷۴۵		پیوست ی برخوردهای الکترون-فونون
۷۴۹		نمایه

در باره مؤلف

چارلز کیتل دوره کارشناسی فیزیک را در ام. آی. تی و آزمایشگاه کاوندیش دانشگاه کمبریج گذرانید و درجه دکتري (Ph.D.) را از دانشگاه ویسکانسین گرفت. او همراه با باردین و شاکلی در گروه حالت جامد آزمایشگاههای بل کار کرد و در سال ۱۹۵۱ برای تأسیس گروه فیزیک حالت جامد نظری در برکلی آنجا را ترک گفت. پژوهشهای وی عمدتاً در زمینه مغناطیس و نیمرساناها بوده است. در باب مغناطیس، وی نظریه‌های تشدید فرومغناطیسی و پادمغناطیسی و نظریه تک‌حوزه‌های فرومغناطیسی را بنا نهاده و نظریه بلوخ در باره مگنونها را هم گسترش داده است. در باب فیزیک نیمرساناها، در نخستین آزمایشهای تشدید پلاسما و سیکلوترون شرکت داشته، و نتایج این آزمایشها را به نظریه حالت‌های ناخالصی و به قطره‌های الکترون-حفره تعمیم داده است.

جوایز دریافتی کیتل شامل سه دوره عضویت گوگنهایم، جایزه اولیور باکلی در فیزیک حالت جامد، و مدال اورستد انجمن معلمان فیزیک امریکا به پاس خدمات آموزشی است. وی عضو فرهنگستان ملی علوم و فرهنگستان علوم و هنرهای امریکاست.

پیشگفتار

این کتاب ویراست هشتم کتاب درسی پایه در زمینه فیزیک حالت جامد یا ماده چگال برای دانشجویان سال آخر کارشناسی و سال اول تحصیلات تکمیلی رشته‌های علوم فیزیک، شیمی، و مهندسی است. موضوع این کتاب از زمان انتشار ویراست اول آن به این سوگسترش زیادی داشته و کاربردهای چشمگیری یافته است. مطرح کردن مباحث مهم جدید، در حالتی که در نظر باشد سطح پایه کتاب حفظ شود، چالشی برای مؤلف بوده است. دریغ بود که برخی از این‌گونه مباحث ملموس فیزیکی، در صورتبندی کتاب، در قالب تمرین ارائه شوند.

در زمان انتشار ویراست اول این کتاب در ۱۹۵۳، اَبَرسانایی فهمیده نشده بود؛ آن زمان سرآغاز کشف سطحهای فرمی فلزات بود و تشدید سیکلوترونی در نیمرساناها را تازه مشاهده کرده بودند؛ شناخت فریتها و آهنرباهای دائمی تازه در آغاز راه بود؛ تنها شمار اندکی از فیزیک‌پیشگان واقعیت امواج اسپینی را باور داشتند. چهل سال به پیدایش نانوفیزیک مانده بود. در دیگر زمینه‌ها، ساختار دی ان ای مشخص شده و رانش قاره‌ها روی زمین هم به اثبات رسیده بود. آن زمان نیز، مثل امروز، پرداختن به علوم کار بسیار جالبی بود. من در ویراستهای پی‌درپی این کتاب تلاش کرده‌ام نسلهای جدید را با این هیجانها و شگفتیها آشنا سازم. این ویراست در مقایسه با ویراست هفتم، علاوه بر شفاف‌سازیهایی زیاد، حاوی شماری از تغییرات است:

- فصل مهمی در باب نانوفیزیک توسط استاد پاؤل ل. مک اوئن از دانشگاه کورنل، که از دست‌اندرکاران فعال در این زمینه است، اضافه شده است. نانوفیزیک، علم موادی است که یک، دو، یا سه بعد کوچک دارند، «کوچک» به معنای نانومتر (10^{-9} m). این مبحث، دقیقترین و مهیجترین مبحثی است که در دهه اخیر به علم حالت جامد افزوده شده است.

- ساده‌سازی‌هایی که با دسترس‌پذیری جهانی رایانه‌ها میسر شده است، در کتاب به کار گرفته شده‌اند. کتاب‌شناسیها و مرجعها تقریباً حذف شده‌اند، زیرا جستجوهای ساده رایانه‌ای با استفاده از کلیدواژه‌ها روی ماشینهای جستجو، نظیر گوگل، بسیاری از مرجعهای مفید و جدیدتر را به سرعت در اختیار می‌گذارد. برای مثالی از آنچه می‌توان روی وب انجام داد، مدخل <http://www.physicsweb.org/bestof/cond-mat> را جستجو کنید. حذف مراجع اولیه یا رایج به معنای ناسپاسی از کسانی که نخستین مسائل حالت جامد را بررسی کرده‌اند، نیست.
- ترتیب فصلها تغییر کرده است: ابررسانایی و مغناطیس زودتر ارائه می‌شوند، که در نتیجه تنظیم یک دورهٔ نیمسال جالب ساده‌تر می‌شود.

نمادگذارهای بلورشناسی منطبق با کاربردهای متداول در فیزیک است. معادله‌های مهم هر جا که برحسب یکاهای SI و CGS گاوسی صورتهای متفاوتی داشته باشند، به هر دو صورت داده شده‌اند، مگر در مواردی که یک جاگذاری مشخص معادله را از CGS به SI تبدیل کند. این کاربری دوگانه در کتاب، مفید و مقبول بوده است. جدولها برحسب یکاهای متداول داده شده‌اند. نماد e نشانگر بار پروتون مثبت است. نماد (۱۸) به معادلهٔ ۱۸ از فصلی که در دست مطالعه است، و نماد (۳-۱۸) به معادلهٔ ۱۸ از فصل ۳ مربوط می‌شود. کلاهک (\wedge) در بالای بردار، بردار یکه را نشان می‌دهد.

شمار اندکی از تمرینها کاملاً ساده در نظر گرفته شده‌اند: بیشتر تمرینها به منظور گسترش مبحث فصل طراحی شده‌اند. بجز بعضی از تمرینها، بقیهٔ آنها همان تمرینهای آورده شده در ویراستهای ششم و هفتم‌اند. نماد QTS مشخص‌کنندهٔ کتاب دیگر من با عنوان نظریهٔ کوانتومی جامدها و پاسخهای تهیه شده توسط س. ی. فونگ است؛ و TP کتاب فیزیک گرما را مشخص می‌کند که با همکاری ه. کرومر تألیف کرده‌ام. همهٔ متن ویراست حاضر را استاد پاؤل ل. مک اوئن از دانشگاه کورنل و استاد راجر لویی از دانشگاه ولانگانگ استرالیا به تفصیل مرور کرده‌اند که بسیار مدیون آنها هستیم. کمکهای آنان موجب شد که خواندن و درک کتاب بسیار آسانتر شود. علاوه بر این، بجاست که مسئولیت ارتباط نزدیک بین متن حاضر و ویراستهای پیشین آن را بپذیریم. در پیشگفتارهای آن ویراستها نسبت به پیشنهادها، مرورها، و بهره‌برداری از عکسها ابراز حق شناسی شده است. به استوارت جانسون، ناشرم در وایلی؛ سوزان اینگراؤ، ویراستارم؛ و باربارا بل دستیار شخصی‌ام بسیار مدیونم.

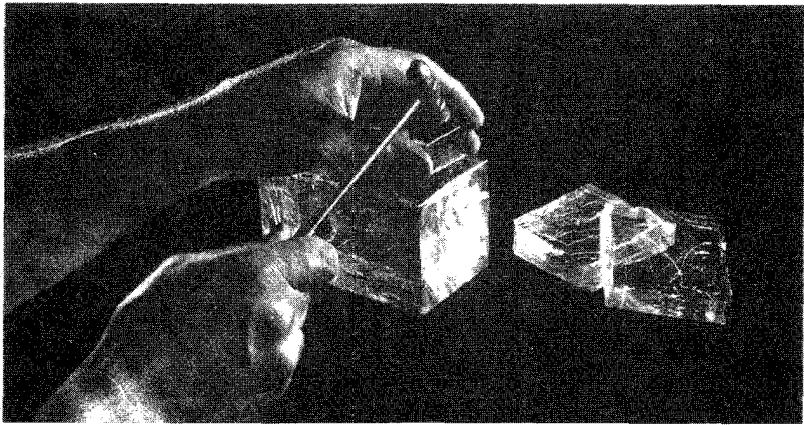
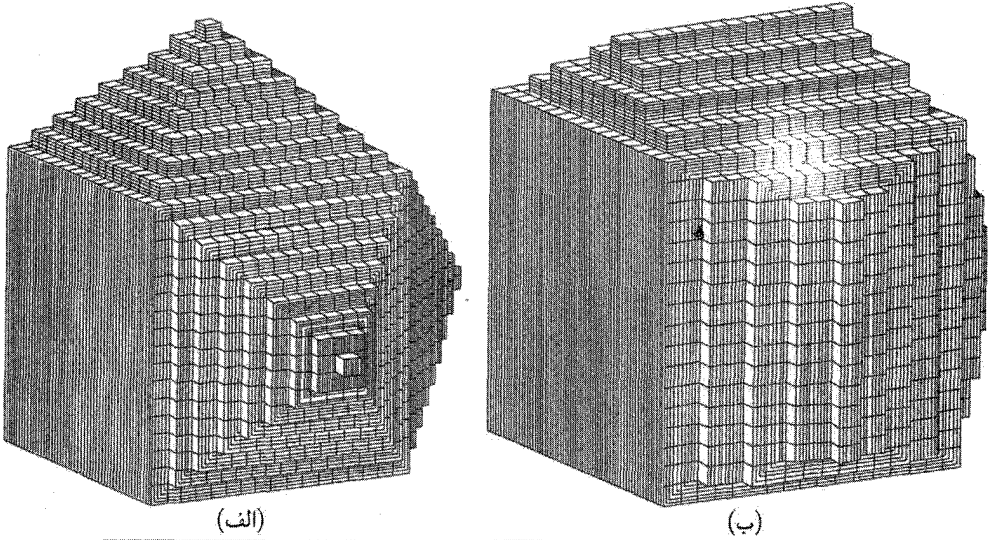
از دریافت تصحیحا و پیشنهادها بسیار استقبال می‌کنم که آنها را می‌توان از طریق پست الکترونیکی به آدرس kittel@berkeley.edu ارسال کرد.

ساختار بلوری

آرایه‌های دوره‌ای اتمها

بررسی جدی فیزیک حالت جامد، در پی کشف پراش پرتو x توسط بلورها و با انتشار یک رشته محاسبات ساده از ویژگیهای بلورها و الکترونها در بلورها آغاز شد. چرا جامدهای بلورین و نه جامدهای غیربلورین؟ به این دلیل که ویژگیهای الکترونی مهم جامدها در بلورها بهتر بیان می‌شود. برای نمونه، ویژگیهای الکترونی مهمترین نیمرساناها به این دلیل اساسی به ساختار بلور میزبان بستگی دارد که الکترونها مؤلفه‌های طول موج کوتاهی دارند که به‌طور چشمگیری به نظم اتمی دوره‌ای مرتب نمونه پاسخ می‌دهند. مواد غیربلورین، به‌طور بارز شیشه‌ها، از نظر انتشار نور اهمیت دارند، زیرا موجهای نوری طول موجی بلندتر از طول موج الکترونها دارند و موج نوری با میانگینی از نظم در شیشه رویه‌رو می‌شود و نه با کم‌نظمی موضعی.

کتاب را با بلورها آغاز می‌کنیم. بلور با افزوده شدن اتمها در شرایط محیطی ثابت، معمولاً در محلول، شکل می‌گیرد. شاید نخستین بلوری که دیده‌اید بلور طبیعی کوارتز باشد که طی یک فرایند



شکل ۱. رابطه شکل خارجی بلورها با شکل سنگ‌بناهای بنیادی. سنگ‌بناها در (الف) و (ب) همانندند، ولی در هر یک وجوه بلوری متفاوتی گسترش یافته است. (ج) رخ‌زنی بلور سنگ نمک.

کند زمین‌شناختی از محلول سیلیکات در آب داغ تحت فشار رشد می‌کند. ریخت بلور با افزوده شدن مداوم سنگ‌بناهای همانند گسترش می‌یابد. تصویر آرمانی فرایند رشد، به گونه‌ای که دو قرن پیش متصور بود، در شکل ۱ نشان داده شده است. در اینجا، سنگ‌بناها، اتمها یا گروههایی از اتمها هستند. بلوری که به این ترتیب شکل گرفته است، آرایه دوره‌ای سه‌بعدی از سنگ‌بناهای بنیادی همانند و عاری از هر ناکاملی و ناخالصی است که ممکن است به‌طور اتفاقی در ساختار وارد شده باشد. گواه تجربی اصلی دوره‌ای بودن ساختار، به این کشف معدن‌شناسان برمی‌گردد که عددهای شاخصی که

سمتگیری رخیهای بلور را توصیف می‌کنند، عددهای درست دقیقی‌اند. در سال ۱۹۱۲، لاوّه نظریهٔ پراش پرتو x توسط یک آرایهٔ دوره‌ای را تعمیم داد و همکارانش نخستین مشاهدهٔ تجربی پراش پرتو x توسط بلورها را گزارش کردند. به این ترتیب، کشف پراش پرتو x توسط بلورها گواهِ تجربی پیشین را تأیید کرد. اهمیت پرتوهای x در این موضوع، آن است که این پرتوها موج‌اند و طول موجی قابل مقایسه با طول سنگ بنای ساختار دارند. همین‌گونه بررسی را می‌توان توسط پراشهای نوترون و الکترون نیز انجام داد، ولی پرتوهای x در این خصوص ابزار برگزیده‌اند. بررسیهای پراش با قاطعیت ثابت کرد که بلورها از آرایه‌های دوره‌ای از اتمها، یا گروههایی از اتمها، ساخته شده‌اند. فیزیک‌پیشگان، با در دست داشتن یک مدل تثبیت‌شدهٔ اتمی برای بلور، توانستند به جنبه‌های فراتر بپردازند، گسترش نظریهٔ کوانتومی نیز اهمیت زیادی در تولد فیزیک حالت جامد داشت. بررسیهای مرتبطی نیز در باب جامدهای غیربلورین و شاره‌های کوانتومی صورت گرفته است. این زمینهٔ وسیعتر به فیزیک مادهٔ چگال معروف و از بزرگترین و دقیقترین زمینه‌های فیزیک است.

بردارهای انتقال شبکه

بلور ایده‌آل از تکرار بی‌پایان گروههای همانندی از اتمها به وجود می‌آید (شکل ۲). هر گروه را یک پایه می‌نامند. مجموعهٔ نقطه‌های ریاضی‌ای که پایه به آنها متصل است، شبکه می‌نامند. شبکه را می‌توان در سه بعد، یا سه بردار انتقال a_1 ، a_2 ، a_3 تعریف کرد، به‌گونه‌ای که آرایش اتمها در بلور از دید نقطهٔ r از دید هر نقطهٔ r' ، که به اندازهٔ مضربهای عدد درستی از a ها نسبت به r انتقال یافته باشد، یکسان به نظر آید:

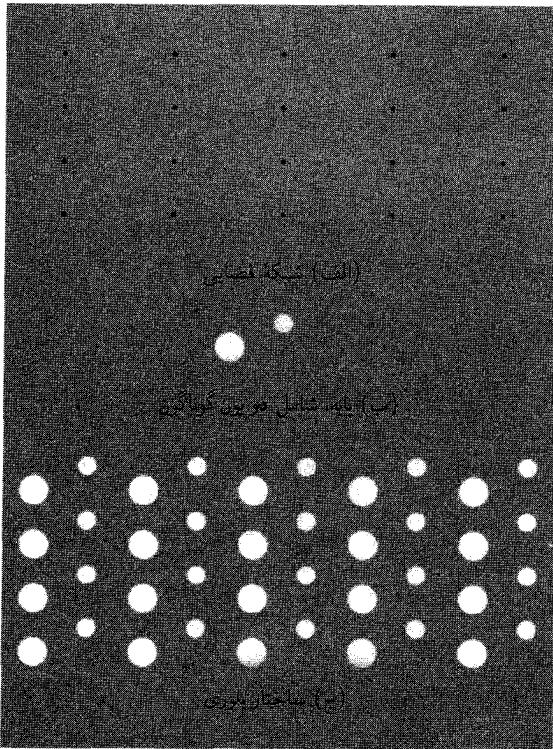
$$r' = r + u_1 a_1 + u_2 a_2 + u_3 a_3 \quad (1)$$

در اینجا u_1 ، u_2 ، u_3 عددهای درست اختیاری‌اند. مجموعهٔ نقطه‌های r' ، که به‌ازای تمام مقادیرهای عدد درست u_1 ، u_2 ، u_3 با رابطهٔ (۱) تعریف می‌شوند، شبکه را تعریف می‌کنند.

شبکه را در صورتی بسیط می‌نامند که هر دو نقطه که از آنها آرایش اتمها همانند به نظر می‌آید، همواره، با گزینش مناسب عددهای درست u_i در رابطهٔ (۱) صدق کنند. این گزاره بردارهای انتقال بسط a_i را معرفی می‌کند. هیچ یاخته‌ای را با حجم کمتر از $a_1 \cdot a_2 \times a_3$ نمی‌توان به صورت سنگ‌بنای ساختار بلور به‌کار برد. اغلب، بردارهای انتقال بسیط شبکه را برای تعریف محوره‌های بلور به‌کار می‌بریم، که این محوره‌های سه یال مجاور متوازی‌السطوح بسیط را تشکیل می‌دهند. اگر محوره‌های غیربسیط ارتباط ساده‌ای با تقارنهای ساختار داشته باشند، اغلب آنها را به‌کار می‌برند.

پایه و ساختار بلوری

پس از گزینش محوره‌های بلور، پایهٔ ساختار بلور را می‌توان مشخص کرد. شکل ۲ نشان می‌دهد که چگونه با افزودن یک پایه به هر نقطهٔ شبکه‌ای بلور ساخته می‌شود. روشن است که نقطه‌های شبکه، تنها، ساختارهایی



شکل ۲. ساختار بلوری با افزودن پایه (ب) به هر نقطه شبکه‌ای (الف) به وجود می‌آید. با توجه به قسمت (ج)، می‌توان ابتدا پایه را مشخص و سپس شبکه فضایی را تجرید کرد. محل قرارگرفتن پایه نسبت به یک نقطه شبکه‌ای مهم نیست.

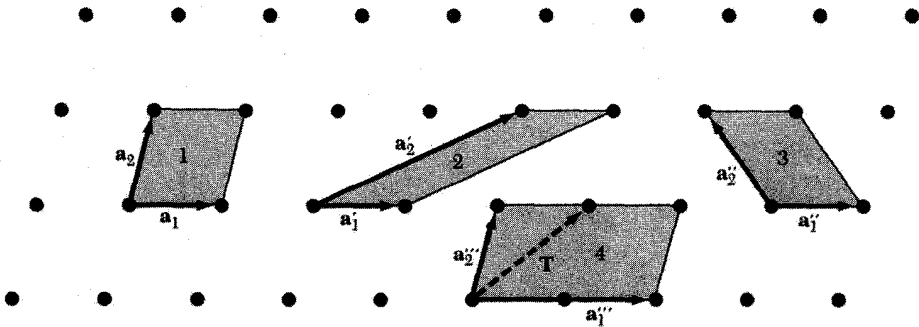
ریاضی‌اند. در یک بلور معین پایه‌ها از نظر ترکیب، آرایش، و سمتگیری یکسان‌اند. تعداد اتمهای پایه ممکن است یک یا بیشتر باشد. مکان مرکز اتم Z_j پایه نسبت به نقطه شبکه‌ای وابسته به آن عبارت است از

$$\mathbf{r}_j = x_j \mathbf{a}_1 + y_j \mathbf{a}_2 + z_j \mathbf{a}_3 \quad (2)$$

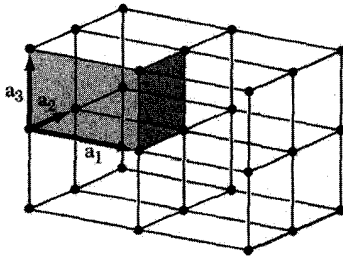
می‌توان مبدأ را، که نقطه شبکه‌ای وابسته نامیده‌ایم، چنان برگزید که $0 \leq x_j, y_j, z_j \leq 1$.

یاخته بسیط شبکه

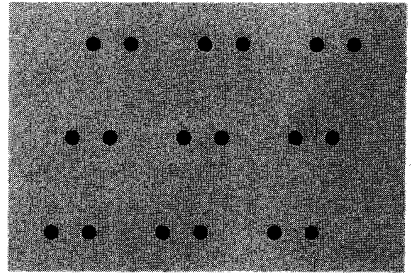
متوازی‌السطوحی که محورهای بسیط a_1, a_2, a_3 آن را تعریف می‌کنند، یاخته بسیط نام دارد (شکل ۳ ب). یاخته بسیط نوعی یاخته یا یاخته یکه است. (یکه صفتی زاید و غیرضروری است). یک یاخته، با تکرار عملهای انتقال مناسب بلور، همه فضا را پر می‌کند. یاخته بسیط، یاخته‌ای کمین حجم است. در یک شبکه معین، محورهای بسیط و یاخته بسیط را به طرق مختلف می‌توان برگزید. در یک ساختار بلوری معین، تعداد آنها در یاخته بسیط یا پایه بسیط همواره یکسان است.



(الف)



(ب)

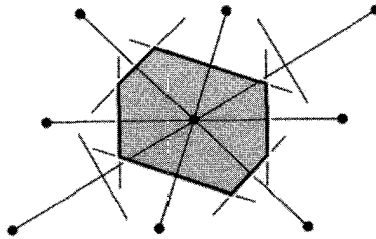


(ج)

شکل ۳. (الف) نقطه‌های شبکه‌ای یک شبکه فضایی در دو بعد. همه زوج بردارهای a_1 و a_2 بردارهای انتقال شبکه‌اند. ولی a_1'' و a_2'' بردارهای انتقال بسیط نیستند، زیرا نمی‌توانیم با هیچ ترکیب عدد درستی از a_1'' و a_2'' انتقال شبکه‌ای T را تشکیل دهیم. تمامی زوجهای نشان‌داده شده دیگر a_1 و a_2 را می‌توان بردارهای انتقال بسیط شبکه در نظر گرفت. متوازی‌الاضلاعهای ۱، ۲، و ۳ از نظر مساحت با هم برابرند و هر یک از آنها را می‌توان یاخته بسیط در نظر گرفت. مساحت متوازی‌الاضلاع ۴ دو برابر مساحت یاخته بسیط است. (ب) یاخته بسیط یک شبکه فضایی در سه بعد. (ج) فرض کنید نقطه‌ها اتمهای همانندند: روی شکل مجموعه‌ای از نقطه‌های شبکه‌ای، گزینشی از محورهای بسیط، یک یاخته بسیط، و پایه اتمهای وابسته به یک نقطه شبکه‌ای را رسم کنید.

در هر یاخته بسیط همواره یک نقطه شبکه‌ای وجود دارد. اگر یاخته بسیط متوازی‌السطوحی باشد که نقطه‌های شبکه‌ای در هشت گوشه‌اش واقع باشند، هر نقطه شبکه‌ای بین هشت یاخته مشترک خواهد بود، به طوری که تعداد کل نقطه‌های شبکه‌ای برابر یک شود: $1 = 8 \times \frac{1}{8}$. با استفاده از آنالیز برداری مقدماتی، حجم متوازی‌السطوحی با محورهای a_1 ، a_2 ، و a_3 برابر است با

$$V_c = |a_1 \cdot a_2 \times a_3| \quad (3)$$



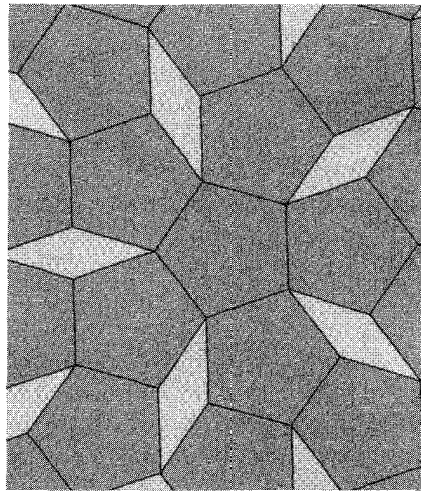
شکل ۴. یاخته بسیط را با دنیال کردن شگرد زیر نیز می‌توان برگزید: (۱) خطوطی رسم کنید که یک نقطه شبکه‌ای مفروض را به همه نقطه‌های شبکه‌ای نزدیک به آن متصل سازد؛ (۲) خطوط یا صفحه‌های عمود منصف این خطوط را رسم کنید. کوچکترین حجمی که به این ترتیب محاط می‌شود، یاخته بسیط ویگنر-سایتس است. این یاخته‌ها نیز درست مانند یاخته‌های شکل ۳، می‌توانند تمامی فضا را پر کنند.

پایه وابسته به یک یاخته بسیط را پایه بسیط می‌نامند. تعداد اتمهای هیچ پایه‌ای کمتر از تعداد اتمهای پایه بسیط نیست. در شکل ۴ روش دیگری برای گزینش یاخته بسیط داده شده است. فیزیک‌پیشگان این یاخته را یاخته ویگنر-سایتس می‌نامند.

انواع اصلی شبکه‌ها

شبکه‌های بلوری را می‌توان توسط انتقالهای شبکه‌ای T و عملهای تقارنی مختلف دیگر، بر خودشان برگردانید یا نگاشت. دوران حول محوری که از نقطه شبکه‌ای می‌گذرد، نمونه عمل تقارنی است. شبکه‌هایی می‌توان یافت که در آنها محورهای دوران یکتایه، دوتایه، سه‌تایه، چهارتایه، و شش‌تایه، متناظر با دورانهای 2π ، $2\pi/2$ ، $2\pi/3$ ، $2\pi/4$ ، و $2\pi/6$ رادیان و مضر بهای درستی از آنها، شبکه را بر خودش برمی‌گردانند. این محورهای دوران را، به ترتیب، با علامتهای ۱، ۲، ۳، ۴، و ۶ نشان می‌دهند.

هیچ شبکه‌ای نمی‌توان یافت که تحت دورانهای دیگر، چون $2\pi/7$ رادیان یا $2\pi/5$ رادیان، بر خودش برگردد. یک تک‌مولکول با طرح مناسب، می‌تواند هر مرتبه از تقارن دورانی را دارا باشد، ولی شبکه دوره‌ای بی‌پایان این‌طور نیست. می‌توانیم از مولکولهایی که هر کدام یک محور پنج‌تایه دارند، بلور بسازیم، ولی نباید انتظار داشته باشیم که شبکه حاصل محور دوران پنج‌تایه داشته باشد. در شکل ۵ نشان داده‌ایم که اگر بخواهیم یک شبکه دوره‌ای با تقارن پنج‌تایه بسازیم چه اتفاقی روی می‌دهد: پنج ضلعیها برای پر کردن همه فضا با هم جور نمی‌شوند، و این نشان می‌دهد که نمی‌توانیم تقارن نقطه‌ای پنج‌تایه را با دوره‌ای بودن انتقالی لازم ترکیب کنیم. منظور از گروه نقطه‌ای شبکه، مجموعه عملهای تقارنی‌ای است که اگر حول یک نقطه شبکه‌ای اعمال شوند، شبکه را بر خودش برمی‌گردانند. فهرست دورانهای ممکن را پیش از این داده‌ایم. می‌توانیم بازتابهای آینده‌ای m را نسبت به صفحه‌ای که از یک نقطه شبکه می‌گذرد، در نظر بگیریم. عمل وارونی ترکیب یک



شکل ۵. در شبکه‌ی دوره‌ای نمی‌توان محور تقارن پنج‌تاییه داشت، زیرا نمی‌توان مساحت صفحه را با آرایه‌ی متصلی از پنج ضلعیهای منظم پر کرد، ولی می‌توان آن را با استفاده از تنها دو طرح متفاوت «آجرها» یا چندضلعیهای بنیادی پر کرد.

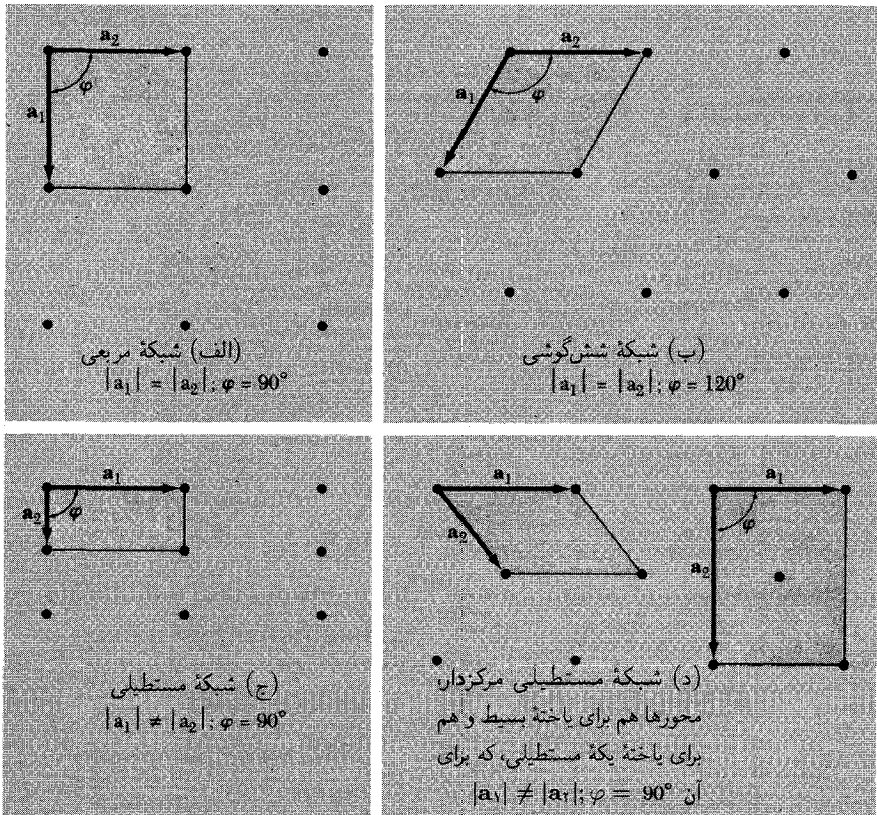
دوران π و در پی آن یک بازتاب از صفحه‌ی عمود بر محور دوران است؛ و اثر کلی آن این است که \mathbf{r} را به $-\mathbf{r}$ تبدیل می‌کند. محورها و صفحه‌های تقارنی مکعب در شکل ۶ نشان داده شده‌اند.

انواع شبکه‌های دوبعدی

شبکه‌ی شکل ۳ (الف) برای بردارهای اختیاری \mathbf{a}_1 و \mathbf{a}_2 رسم شده است. چنین شبکه‌ی عامی را شبکه‌ی مایل می‌نامند. این شبکه تنها تحت دورانهای π و 2π حول هر نقطه‌ی شبکه ناورداست. ولی انواع خاصی از شبکه‌های مایل ممکن است تحت دورانهای $2\pi/3$ ، $2\pi/4$ ، یا $2\pi/6$ یا بازتاب آینه‌ای نیز ناوردا باشند. برای بنا کردن شبکه‌ای که تحت یک یا چند عمل از این عملهای جدید ناوردا باشد، باید شرایط محدودکننده‌ای روی \mathbf{a}_1 و \mathbf{a}_2 وضع کنیم. چهار نوع محدودیت متمایز وجود دارد که هر یک به شبکه‌ای می‌انجامد، که می‌توان آن را یک نوع شبکه‌ی خاص نامید. بنابراین در فضای دوبعدی، پنج نوع شبکه‌ی متمایز وجود دارد: یک شبکه‌ی مایل و چهار شبکه‌ی خاص که در شکل ۷ نشان داده شده‌اند. شبکه‌ی براوه، عبارت متداول برای هر نوع شبکه‌ی متمایز است؛ می‌گوییم در فضای دوبعدی پنج شبکه‌ی براوه وجود دارد.

انواع شبکه‌های سه‌بعدی

گروههای تقارنی نقطه‌ای در سه بعد چهارده نوع شبکه‌ی مختلف را ایجاد می‌کنند، که در جدول ۱ فهرست‌بندی شده‌اند. شبکه‌ی عام سه‌میلی است و ۱۳ شبکه‌ی خاص وجود دارد. این شبکه‌ها را برای راحتی،



شکل ۷. چهار شبکه خاص در دو بعد.

$\frac{1}{2}$ ، $\frac{1}{3}$ و $\frac{1}{6}$ هستند. در دستگاه شش‌گوشی، یاخته بسیط منشور قائمی است که قاعده‌اش یک لوزی با زاویه رأس 120° است. رابطه بین این یاخته با قاعده لوزی و منشور شش‌گوش در شکل ۱۲ نشان داده شده است.

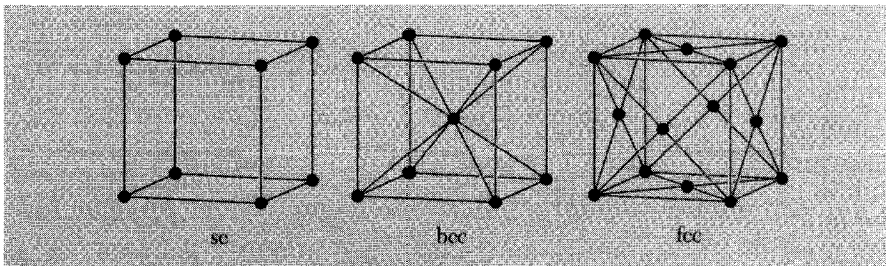
دستگاه شاخص‌گذاری صفحات بلوری

سمتگیری صفحه بلور را سه نقطه غیرهم‌خط در آن صفحه مشخص می‌کنند. اگر هر نقطه روی یکی از محورها بلور واقع باشد، صفحه را می‌توان با دادن مختصات این نقطه‌ها برحسب ثابتهای شبکه a_1 ، a_2 و a_3 مشخص کرد. ولی برای تحلیل ساختاری، چنین برمی‌آید که مفیدتر است سمتگیری صفحه را با شاخصهایی مشخص کنیم که با قاعده‌های زیر تعیین می‌شوند (شکل ۱۳).

• محل تقاطع صفحه را با محورهای a_1 ، a_2 و a_3 برحسب ثابتهای شبکه پیدا می‌کنیم. این محورها می‌توانند مربوط به یاخته‌های بسیط یا غیربسیط باشند.

جدول ۱. چهارده نوع شبکه در سه بعد

محدودیت‌های موجود در مورد محورها و زاویه‌های یاخته	تعداد شبکه‌ها	دستگاه
$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	۱	سه میلی
$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	۲	تک میلی
$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	۴	راستگوشی
$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	۲	چهارگوشی
$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	۳	مکعبی
$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$	۱	سه گوشه
$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	۱	شش گوشه

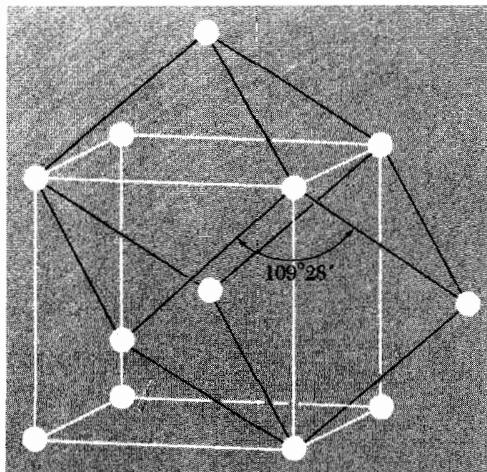


شکل ۸. شبکه‌های فضایی مکعبی. یاخته‌های نشان داده شده، یاخته‌های قراردادی‌اند.

جدول ۲. مشخصات شبکه‌های مکعبی*

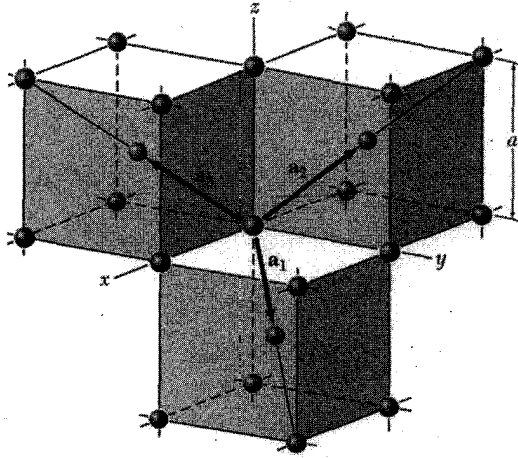
مرکز سطحی	مرکز حجمی	ساده	
a^3	a^3	a^3	حجم یاخته قراردادی
۴	۲	۱	تعداد نقطه‌های شبکه‌ای در هر یاخته
$\frac{1}{4}a^3$	$\frac{1}{4}a^3$	a^3	حجم یاخته بسیط
$4/a^3$	$2/a^3$	$1/a^3$	تعداد نقطه‌های شبکه‌ای در واحد حجم
۱۲	۸	۶	تعداد همسایه‌های اول
$a/2^{1/2} = 0.707a$	$3^{1/2}a/2 = 0.866a$	a	فاصله تا همسایه اول
۶	۶	۱۲	تعداد همسایه‌های دوم
a	a	$2^{1/2}a$	فاصله تا همسایه دوم
$\frac{1}{6}\pi\sqrt{2}$	$\frac{1}{8}\pi\sqrt{3}$	$\frac{1}{6}\pi$	کسر انباشتگی*
$= 0.740$	$= 0.680$	$= 0.524$	

* کسر انباشتگی برابر است با مقدار بیشینه کسری از حجم که امکان دارد با کره‌های سخت پر شود.

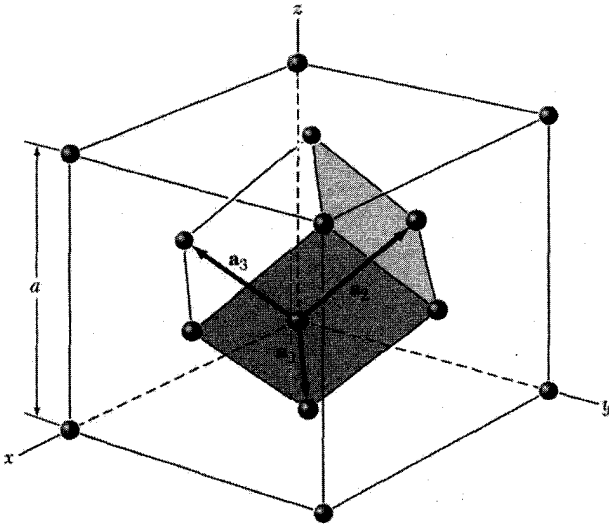


شکل ۹. شبکه مکعبی مرکزحجمی که یاخته‌ای بسیط را نشان می‌دهد. این یاخته بسیط، لوزی‌رخی است با یال $\frac{1}{2}\sqrt{3}a$ که زاویه بین یالهای مجاورش $109^\circ 28'$ است.

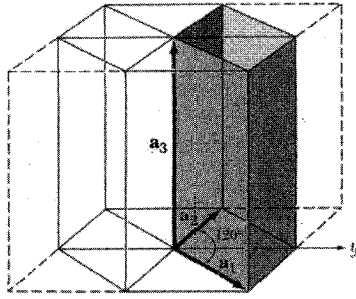
• اعداد حاصل را وارون می‌کنیم. آنگاه آنها را به سه عدد درستی که دارای همان نسبتها باشند، تقلیل می‌دهیم. معمولاً کوچکترین سه عدد درست را اختیار می‌کنیم. نتیجه را به صورت (hkl) در پرانتز قرار می‌دهیم و آن را شاخص صفحه می‌خوانیم.



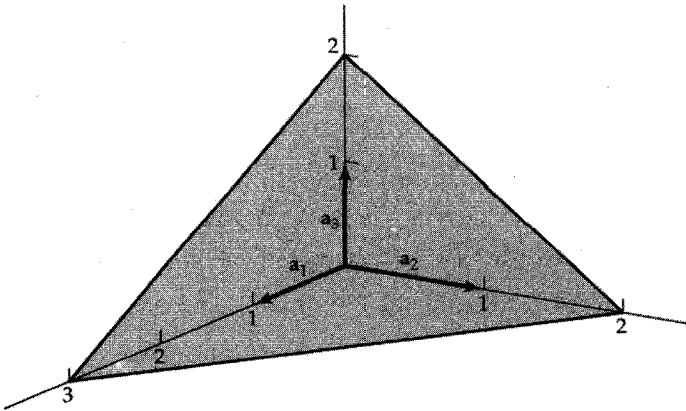
شکل ۱۰. بردارهای انتقال بسیط شبکه مکعبی مرکزجسمی؛ این بردارها نقطه شبکه‌ای واقع در مبدأ را به نقطه‌های شبکه‌ای واقع در مراکز حجم وصل می‌کنند. یاخته بسیط با کامل کردن یک لوزی رخ روی این سه بردار به دست می‌آید. بردارهای انتقال بسیط برحسب یال مکعب، a ، عبارت‌اند از $\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$ ، $\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$ و $\mathbf{a}_3 = \frac{1}{2}a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$ در اینجا \hat{x} ، \hat{y} و \hat{z} بردارهای یکه دکارتی‌اند.



شکل ۱۱. یاخته بسیط لوزی رخ بلور مکعبی مرکزسطحی. بردارهای انتقال بسیط \mathbf{a}_1 ، \mathbf{a}_2 و \mathbf{a}_3 نقطه شبکه‌ای واقع در مبدأ را به نقطه‌های شبکه‌ای در مراکز وجوه وصل می‌کنند. بردارهای بسیطی که رسم شده‌اند، عبارت‌اند از $\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y})$ ، $\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}a(\hat{y} + \hat{z})$ ، $\mathbf{a}_3 = \frac{1}{2}a(\hat{z} + \hat{x})$. زاویه بین محورها برابر است با 60° .

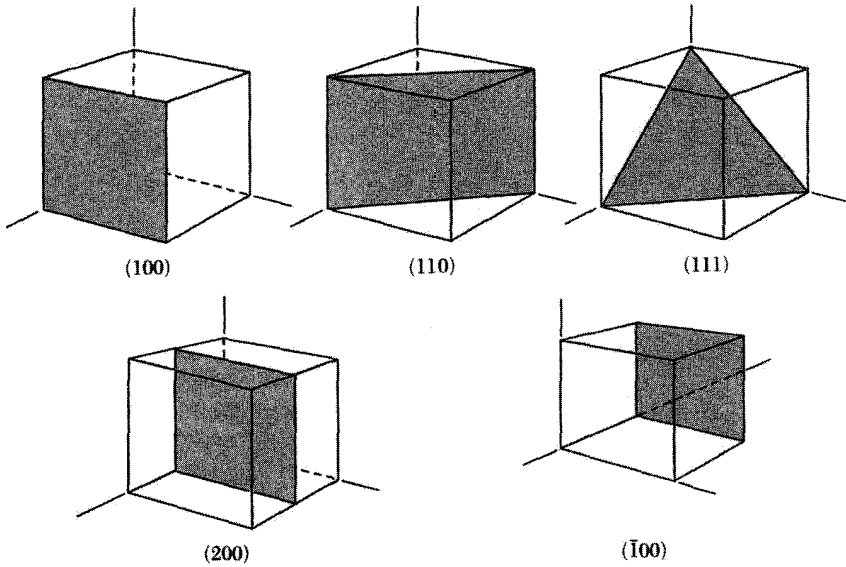


شکل ۱۲. رابطه بین یاخته بسیط در دستگاه شش گوشه (خطهای پررنگ) و منشوری با تقارن شش گوشه. در اینجا $a_1 = a_2 \neq a_3$.



شکل ۱۳. این صفحه محورهای a_1 ، a_2 ، و a_3 را در $2a_3$ و $2a_1$ ، $2a_2$ قطع می‌کند. وارون این اعداد عبارت‌اند از $\frac{1}{3}$ ، $\frac{1}{3}$ ، و $\frac{1}{3}$ و کوچکترین سه عدد درستی که دارای همین نسبتها باشند عبارت‌اند از ۲، ۳، و ۳. در نتیجه شاخص این صفحه عبارت است از (۲۳۳).

وارون اعداد صفحه‌ای که محل تقاطع آن با محورها ۱، ۲ و ۴ باشد، به ترتیب، برابر $\frac{1}{4}$ ، ۱، و $\frac{1}{4}$ است و کوچکترین سه عدد درستی که همین نسبتها را دارند، برابرند با (۱۴۲). شاخص مربوط به تقاطع واقع در بینهایت، صفر است. شاخصهای برخی از صفحات مهم بلور مکعبی در شکل ۱۴ نشان داده شده‌اند. شاخصهای (hkl) ممکن است نمایانگر تک صفحه یا مجموعه‌ای از صفحه‌های موازی باشند. اگر صفحه‌ای محوری را در طرف منفی مبدأ قطع کند، شاخص متناظر منفی خواهد بود، که آن را با قراردادن علامت منها در بالای شاخص مربوط مشخص می‌کنند (hkl) . وجه مکعب در بلور مکعبی عبارت‌اند از (۱۰۰)، (۰۱۰)، (۰۰۱)، (۱۰۰)، (۰۱۰)، (۰۰۱) و (۰۰۱). صفحاتی را که از نظر تقارنی معادل‌اند، می‌توان با قراردادن



شکل ۱۴. شاخصهای صفحات مهم بلور مکعبی. صفحه (200) با صفحه‌های (100) و $(\bar{1}00)$ موازی است.

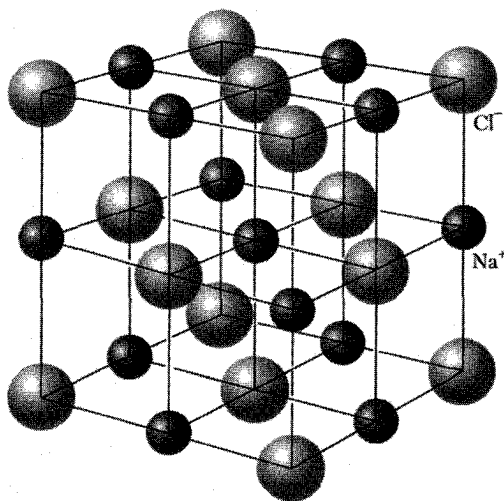
درون آکولاد مشخص کرد؛ مجموعهٔ وجوه مکعب عبارت‌اند از $\{100\}$. وقتی از صفحه (200) صحبت می‌شود، مقصود صفحه‌ای است که با صفحه (100) موازی است ولی محور a_1 را در $\frac{1}{2}a$ قطع می‌کند. شاخصهای $[uvw]$ یک جهت در بلور، نسبت به یک دستگاه مختصات، عبارت‌اند از مجموعهٔ کوچکترین عددهای درستی که نسبت‌شان مانند مؤلفه‌های یک بردار در آن جهت است. محور a_1 در جهت $[100]$ و محور a_2 - در جهت $[0\bar{1}0]$ است. در بلورهای مکعبی جهت $[hkl]$ بر صفحه $[hkl]$ ، که دارای همان شاخصها باشد، عمود است، ولی این مطلب در دیگر دستگاههای بلوری عمومیت ندارد.

ساختارهای بلوری ساده

در بارهٔ ساختارهای بلوری ساده و مورد توجه همگانی سدیم کلرید، سزیم کلرید، تنگ‌چین شش‌گوشی، الماسی، و روی سولفید مکعبی بحث می‌کنیم.

ساختار سدیم کلرید

ساختار سدیم کلرید، NaCl، در شکل‌های ۱۵ و ۱۶ نشان داده شده است. شبکه مکعبی مرکزسطحی است. پایه شامل یک یون Na^+ و یک یون Cl^- است که به اندازهٔ نصف قطر اصلی مکعب از هم فاصله



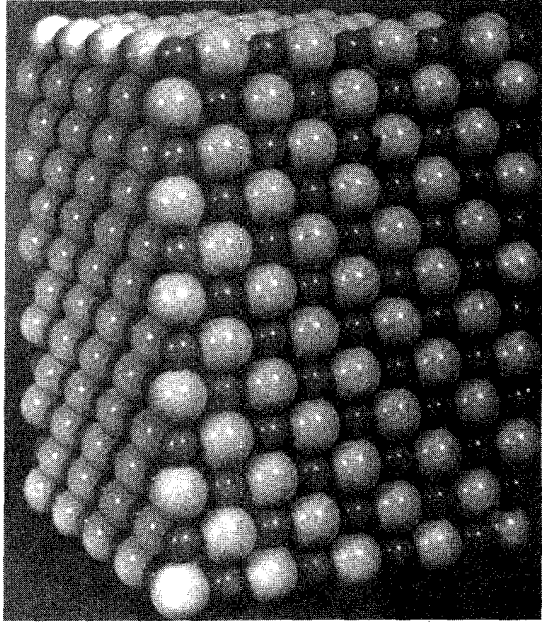
شکل ۱۵. ساختار بلوری سدیم کلرید را می‌توان با قراردادن یونهای Na^+ و Cl^- به‌طور یک در میان روی نقاط شبکه‌ای یک شبکه مکعبی ساده بنا کرد. در این بلور هر یون با شش همسایه اول با بار مخالف احاطه شده است. شبکه فضایی fcc است و پایه یک یون Cl^- در 000 و یک یون Na^+ در $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ دارد. این شکل یک یاخته مکعبی قراردادی را نشان می‌دهد. در اینجا، برای روشنتر شدن آرایش فضایی، قطرهای یونی نسبت به ابعاد یاخته کوچکتر نشان داده شده‌اند.

دارند. در هر مکعب یکه چهار واحد NaCl وجود دارد، و مکانهای اتمها عبارت‌اند از

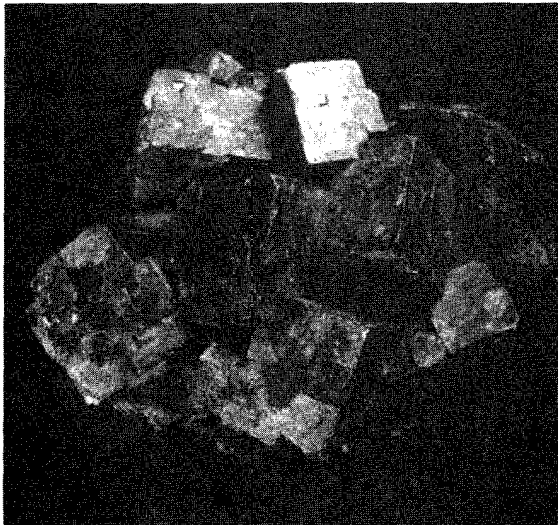


هر اتم، شش همسایه اول از نوع مخالف دارد. برخی بلورهایی که آرایش NaCl دارند، در جدول بعدی آمده‌اند. یال مکعب، a ، برحسب آنگستروم داده شده است؛ $1\text{Å} \equiv 10^{-8}\text{cm} \equiv 10^{-10}\text{m} \equiv 0.1$. شکل ۱۷ عکسی است از بلورهای سرب سولفید (PbS) از جاپلین^۱ در میسوری. نمونه‌های جاپلین به‌صورت مکعبهای زیبایی شکل می‌گیرند.

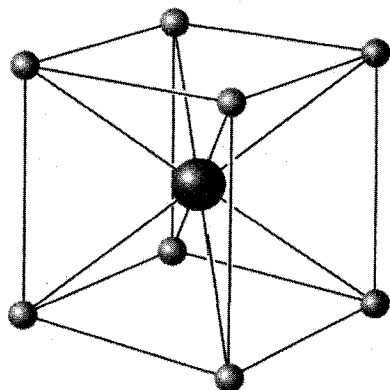
a	بلور	a	بلور
5.77Å	AgBr	4.08Å	LiH
5.92	PbS	4.20	MgO
6.29	KCl	4.43	MnO
6.59	KBr	5.63	NaCl



شکل ۱۶. مدل سدیم کلرید. یونهای سدیم از یونهای کلر کوچکترند.



شکل ۱۷. بلورهای طبیعی سرب سولفید، PbS، که دارای ساختار بلوری NaCl است.



شکل ۱۸. ساختار بلوری سزیم کلرید. شبکه فضایی مکعبی ساده است و پایه یک یون Cs^+ در 000 و یک یون Cl^- در $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ دارد.

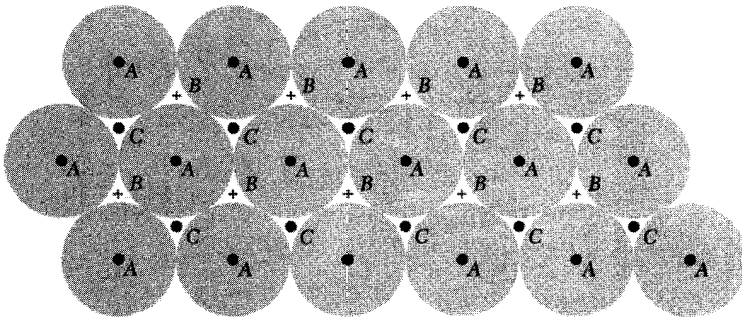
ساختار سزیم کلرید

ساختار سزیم کلرید در شکل ۱۸ نشان داده شده است. در هر یاخته بسیط یک مولکول وجود دارد که اتمهای آن در گوشه‌ها، 000 ، و در مراکز $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ ، شبکه فضایی مکعبی ساده قرار دارند. هر اتم را می‌توان در مرکز مکعبی از اتمهای نوع مخالف در نظر گرفت، بنابراین تعداد همسایه‌های اول، یا عدد هم‌ارایی، برابر هشت است.

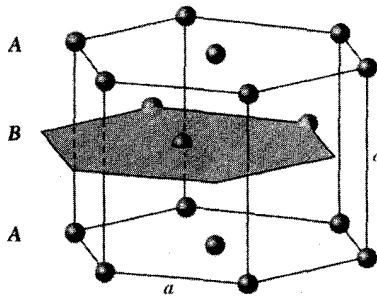
a	بلور	a	بلور
$3,29 \text{ \AA}$	LiHg	$2,70 \text{ \AA}$	BeCu
$3,87$	NH_4Cl	$2,88$	AlNi
$3,97$	TlBr	$2,94$	CuZn (برنج بتا)
$4,11$	CsCl	$2,99$	CuPd
$4,20$	TlI	$3,28$	AgMg

ساختار تنگ‌چین شش‌گوشی (hcp)

تعداد روشهای آراستن کره‌های یکسان در یک آرایه مرتب، به‌گونه‌ای که کسر انباشتگی بیشینه شود، بی‌شمار است (شکل ۱۹). یکی از این روشها، ساختار مکعبی مرکزسطحی است، و یک راه دیگر ساختار تنگ‌چین شش‌گوشی است (شکل ۲۰). در هر دوی این ساختارها کسری از حجم کل که توسط کره‌ها اشغال می‌شود، 74% است. هیچ ساختار منظم یا نامنظم دیگری وجود ندارد که انباشتگی چگالتری داشته باشد.



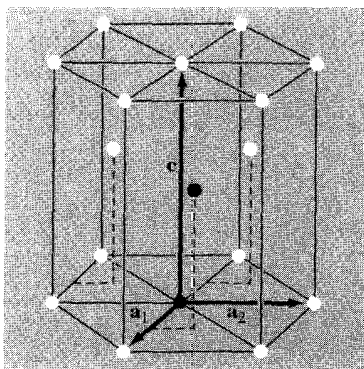
شکل ۱۹. یک لایه تنگ‌چین از کره‌ها با مراکز که در نقطه‌های A قرار دارند، نشان داده شده است. لایه یکسان دوم کره‌ها را می‌توان به‌گونه‌ای روی این لایه به موازات صفحه شکل قرار داد که مراکز کره‌ها بالای نقاط B قرار گیرند. برای لایه سوم دو گزینه وجود دارد. این لایه ممکن است بالای A یا بالای C قرار گیرد. اگر بالای A قرار گیرد، دنباله $ABABAB \dots$ به‌وجود می‌آید و ساختار، تنگ‌چین شش‌گوشی می‌شود. اگر لایه سوم روی C قرار گیرد، دنباله $ABCABCABC \dots$ پدید می‌آید و ساختار، مکعبی مرکزسطحی می‌شود.



شکل ۲۰. ساختار تنگ‌چین شش‌گوشی. در این ساختار، مکانهای اتمی شبکه فضایی ایجاد نمی‌کنند. شبکه فضایی، شش‌گوشی ساده است که به هر نقطه شبکه‌ای آن پایه‌ای با دو اتم یکسان مربوط می‌شود. پارامترهای شبکه a و c در شکل نشان داده شده‌اند. a در صفحه قاعده قرار دارد و c بزرگی محور z در شکل ۱۲ است.

در تک‌لایه تنگ‌چین A ، کره‌ها به این گونه مرتب می‌شوند که هر کره در تماس با شش کره دیگر واقع در همان صفحه قرار می‌گیرد. این لایه ممکن است یا صفحه قاعده در ساختار hcp یا صفحه (۱۱۱) در ساختار fcc باشد. لایه مشابه دوم B را می‌توان با قراردادن هر کره از B در تماس با سه کره از لایه زیرین، به‌گونه شکلهای ۱۹ تا ۲۱، اضافه کرد. لایه سوم C را می‌توان به دو طریق افزود. اگر کره‌های لایه سوم، بالای فرورفتگی‌های لایه اول که توسط B اشغال نشده‌اند قرار گیرند، ساختار fcc را به‌دست می‌آوریم. اگر کره‌های لایه سوم درست بالای کره‌های لایه اول قرار گیرند، ساختار hcp حاصل خواهد شد.

تعداد همسایه‌های اول در هر دو ساختار fcc و hcp برابر ۱۲ است. اگر انرژی بستگی (یا انرژی آزاد)



شکل ۲۱. در یاختهٔ بسیط، $a_1 = a_2$ و زاویهٔ بین آنها 120° است. محور c (یا a_3) بر صفحهٔ a_1 و a_2 عمود است. در ساختار ایده‌آل hcp $c = 1.633a$. دو اتم مربوط به یک پایه در شکل با دایره‌های سیاه نشان داده شده‌اند. یکی از اتمهای پایه در مبدأ و اتم دیگر در $\frac{2}{3}a_1, \frac{1}{3}a_2, \frac{1}{2}c$ یعنی در مکان $\mathbf{r} = \frac{2}{3}a_1 + \frac{1}{3}a_2 + \frac{1}{2}a_3$ قرار دارد.

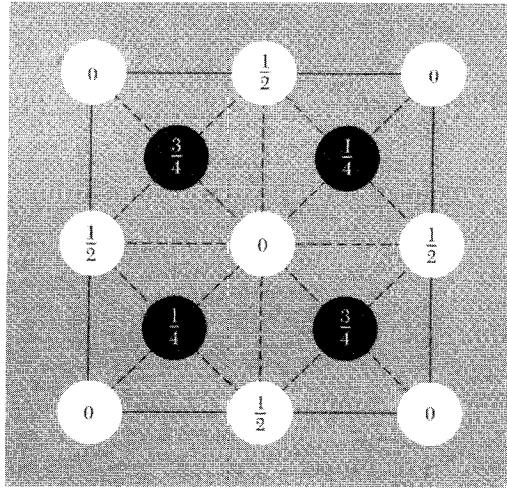
تنها به تعداد پیوندهای با همسایگان اول هر اتم وابسته بود، هیچ تفاوتی در انرژی بین دو ساختار fcc و hcp وجود نمی‌داشت.

بلور	c/a	بلور	c/a	بلور	c/a
He	۱٫۶۳۳	Zn	۱٫۸۶۱	Zr	۱٫۵۹۴
Be	۱٫۵۸۱	Cd	۱٫۸۸۶	Gd	۱٫۵۹۲
Mg	۱٫۶۲۳	Co	۱٫۶۲۲	Lu	۱٫۵۸۶
Ti	۱٫۵۸۶	Y	۱٫۵۷۰		

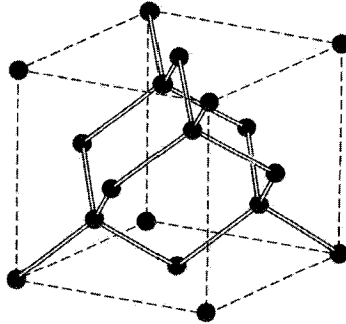
ساختار الماسی

ساختار الماسی، ساختار نیم‌رساناهای سیلیسیم و ژرمانیم است و با ساختار چند نیم‌رسانای مهم با ترکیب دوتایی ارتباط دارد. شبکهٔ فضایی الماس مکعبی مرکزسطحی است. همان‌گونه که در شکل ۲۲ نشان داده شده است، در ساختار الماسی به هر نقطهٔ شبکه‌ای fcc پایهٔ بسیطی شامل دو اتم یکسان با مختصات 000 و $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$ مربوط می‌شود. با توجه به آنکه مکعب یکهٔ قراردادی برای شبکهٔ fcc حاوی ۴ نقطهٔ شبکه‌ای است، نتیجه می‌شود که مکعب یکهٔ قراردادی حاوی $4 \times 2 = 8$ اتم است. به هیچ طریقی نمی‌توان یاختهٔ بسیطی برگزید که پایهٔ الماس تنها یک اتم داشته باشد.

پیوند چهاروجهی که مشخصهٔ ساختار الماسی است، در شکل ۲۳ نشان داده شده است. هر اتم چهار همسایهٔ اول و ۱۲ همسایهٔ دوم دارد. ساختار الماسی نسبتاً خالی است: بیشترین کسری از حجم موجود را که



شکل ۲۲. تصویر مکان آنها در یاخته مکعبی ساختار الماسی روی یک وجه مکعب. کسرهای ارتفاع از قاعده را برحسب طول یال مکعب مشخص می‌کنند. نقطه‌های 0 و $\frac{1}{4}$ روی شبکه fcc واقع‌اند؛ و آنهایی که در $\frac{1}{4}$ و $\frac{3}{4}$ قرار دارند، روی شبکه مشابهی واقع‌اند که در امتداد قطر اصلی مکعب به اندازه $\frac{1}{4}$ طولش جابه‌جا شده است. یا یک شبکه فضایی fcc، پایه شامل دو اتم یکسان در 000 و $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ است.



شکل ۲۳. ساختار بلور الماس که در آن آرایش پیوند چهاروجهی نشان داده شده است.

ممکن است کربن‌های سخت پرکنند فقط 34° است که 46 درصد ضریب پرشدگی تنگ‌چینترین ساختارها، مثل fcc یا hcp، است. ساختار الماسی نمونه‌ای است از پیوند کووالانسی جهتی که بین عناصر ستون چهارم جدول دوره‌ای یافت می‌شود. کربن، سیلیسیم، ژرمانیم، و قلع، به ترتیب، با ثابتهای شبکه a برابر 357 ، 357 ، 357 ، 357 ، 357 ، 357 ، و 357 رگسترورم با ساختار الماسی متبلور می‌شوند. در اینجا a یال یاخته مکعبی قراردادی است.

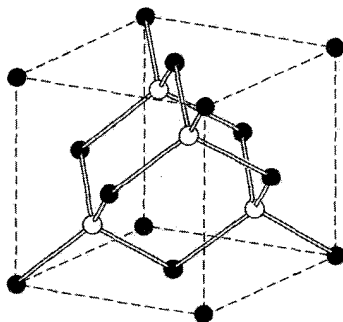
ساختار مکعبی روی سولفید

ساختار الماسی را می‌توان به صورت دو ساختار fcc در نظر گرفت، که نسبت به یکدیگر به اندازه یک چهارم قطر اصلی جابه‌جا شده‌اند. ساختار مکعبی روی سولفید (بلندروی)، همان‌گونه که در شکل ۲۴ نشان داده شده است، از قراردادن اتمهای Zn روی یک شبکه fcc و اتمهای S روی شبکه fcc دیگر نتیجه می‌شود. یاخته قراردادی مکعب است. مختصات اتمهای Zn عبارت‌اند از $0,0,0$ ، $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ ، $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$ و $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$ و مختصات اتمهای S عبارت‌اند از $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$ ، $\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}$ ، $\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$ و $\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$. شبکه fcc است. در هر یاخته قراردادی چهار مولکول ZnS وجود دارد. در اطراف هر اتم در فاصله‌های مساوی از آن چهار اتم از نوع مخالف قرار دارند که در گوشه‌های یک چهاروجهی منظم مرتب شده‌اند.

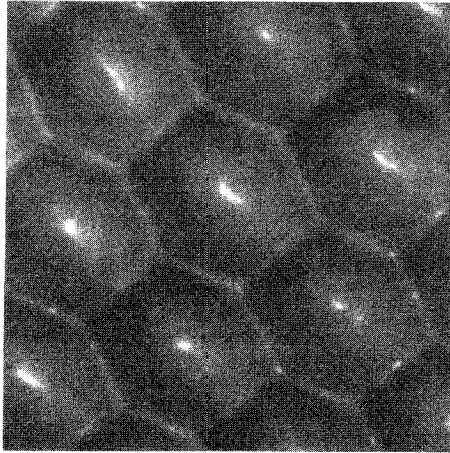
ساختار الماسی در وسط هر خطی که اتمهای همسایه اول را به هم وصل می‌کند، یک عمل تقارنی مرکز وارون‌سازی دارد. عمل وارون‌سازی، اتم واقع در r را به اتم واقع در $-r$ می‌برد. ساختار ZnS مکعبی دارای عمل وارون‌سازی نیست. مثالهایی از ساختار روی سولفید مکعبی عبارت‌اند از

a	بلور	a	بلور
۵٫۶۵Å	ZnSe	۴٫۳۵Å	SiC
۵٫۶۵	GaAs	۵٫۴۱	ZnS
۵٫۶۶	AlAs	۵٫۴۵	AlP
۶٫۴۶	InSb	۵٫۴۵	GaP

برابری نزدیک ثابت شبکه چند زوج، به‌ویژه $(Al, Ga)P$ و $(Al, Ga)As$ ساخت پیوندهای چندگن نیم‌رساناها را میسر می‌سازد (فصل ۱۹).



شکل ۲۴. ساختار بلوری روی سولفید مکعبی.



شکل ۲۵. تصویر میکروسکوپ تونلی روبشی از انتهای روی سطح (۱۱۱) پلاتین fcc در ۴K. فاصله تا همسایه اول $۲,۷۸\text{\AA}$ است.

تصویربرداری مستقیم از ساختار اتمی

میکروسکوپهای تراکسیل الکترونی تصویرهای مستقیمی از ساختار بلور تهیه کرده‌اند. شاید زیباترین تصویرها را میکروسکوپهای تونل‌زنی روبشی (STM) تهیه کرده باشند؛ در STM (فصل ۱۹) می‌توان از تغییرات زیاد تونل‌زنی کوآتومی به صورت تابعی از فاصله یک نوک فلزی ظریف بالای سطح بلور بهره گرفت. تصویر شکل ۲۵ به همین روش تهیه شده است. یک روش STM طوری تعمیم یافته است که تک‌اتمها را در یک ساختار لایه‌ای نانومتری سازمان‌یافته روی یک زیرنهشت بلوری سامان می‌دهد.

وقوع ساختارهای بلوری غیرایده‌آل

به‌نظر بلورشناسان قدیمی، بلور ایده‌آل تشکیل شده است از تکرار دوره‌ای واحدهای یکسان در فضا. ولی هیچ استدلال عامی برای اثبات اینکه بلور ایده‌آل در دمای صفر مطلق حالت کمیته انرژی اتمهای یکسان است، داده نشده است. در دهه‌های متناهی احتمال درست‌بودن این باور کم است. نمونه دیگری را در ادامه ارائه می‌کنیم.

روی هم‌چینی کاتوره‌ای و بسگونگی

ساختارهای fcc و hcp از صفحه‌های تنگ‌چین اتمی تشکیل شده‌اند. این ساختارها از نظر دنباله روی هم‌چینی صفحه‌ها با یکدیگر تفاوت دارند، fcc دارای دنباله $ABCABC\dots$ و hcp دارای

دنباله $ABABAB \dots$ است. ساختارهایی نیز یافت می‌شوند که در آنها دنباله روی هم‌چینی صفحات تنگ‌چین کاتوره‌ای است. این را روی هم‌چینی کاتوره‌ای گویند و می‌توان آن را به‌گونه بلورین در دو بعد و غیر بلورین یا شیشه‌گونه در بعد سوم در نظر گرفت.

بسگونگی با یک دنباله روی هم‌چینی با واحد تکرار طولانی در امتداد محور چیدمان مشخص می‌شود. بهترین نمونه شناخته‌شده این ساختار روی سولفید، ZnS، است که برای آن بیش از 15° بسگونه شناسایی شده که بسگونه با طولانیترین دوره آنها 36° لایه دارد. نمونه دیگر سیلیسیم‌کرید، SiC، است که در بیش از 45° دنباله چیدمان لایه‌های تنگ‌چین رخ می‌دهد. بسگونه‌ای از SiC، که به $393R$ معروف است، دارای یاخته بسیطی است با $a = 3.79 \text{ \AA}$ و $c = 98.96 \text{ \AA}$. درازترین یاخته بسیط مشاهده‌شده برای SiC دارای فاصله تکراری برابر با 594° لایه است. یک دنباله معین بارها در تک‌بلور تکرار می‌شود. سازوکاری که چنین نظم بلورنگاری بلندبردی را القا می‌کند، نیروی بلندبرد نیست. این سازوکار از حضور پله‌های ماریچی ناشی از دررفتگیهای موجود در هسته رشد (فصل ۲۱) سرچشمه می‌گیرد.

داده‌های مربوط به ساختار بلوری

در جدول ۳ فهرستی از ساختارهای بلوری متداولتر و ساختارهای شبکه‌ای عناصر آمده است. مقادیر چگالی و غلظت اتمی در جدول ۴ داده شده‌اند. بسیاری از عناصر چندساختار بلوری دارند که با تغییر فشار یا دما از یکی به دیگری تبدیل می‌شوند. گاهی دو نوع ساختار، تماماً در یک دما و یک فشار وجود دارند، گرچه ممکن است یکی از دیگری کمی پایدارتر باشد.

چکیده

- شبکه عبارت است از آرایه‌ای از نقاط که عملگر انتقال شبکه $\mathbf{T} = u_1 \mathbf{a}_1 + u_2 \mathbf{a}_2 + u_3 \mathbf{a}_3$ آنها را به هم مربوط می‌کند. u_1, u_2, u_3 و اعداد درست و $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ محورهای بلورند.
- برای تشکیل بلور به هر نقطه شبکه‌ای پایه‌ای مرکب از s اتم در مکانهای $\mathbf{r}_j = x_j \mathbf{a}_1 + y_j \mathbf{a}_2 + z_j \mathbf{a}_3$ در اینجا x, y و z را می‌توان به‌گونه‌ای برگزید که مقادیر بین صفر و یک داشته باشند.
- محورهای $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ برای یاخته‌ای با حجم کمیته $|\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3|$ بسیط‌اند. به کمک عملگر انتقال شبکه، \mathbf{T} ، و یک پایه در هر نقطه شبکه، می‌توان ساختار بلور را از این یاخته ساخت.

جدول ۳. ساختار بلوری عناصر

این جدول برای متالورژی و همچنین در زمینه اتاق با دمای درگشته و محاسبه کولین داده شده است.

H ¹ 4K	hcp	3.75	6.12	He ² 2K	hcp	3.57	5.83
Li 7K	bcc	3.491	3.59	B	rhomb		
Be	hcp	2.27	3.59	C	diamond	cube	20K
Na 3K	bcc	4.225	3.21	N	5.66	(O ₂)	
Mg	hcp	3.21	5.21	P	(N ₂)		
K 3K	fcc	5.58	5.27	S	complex	complex	
Ca	fcc	3.31	5.27	Se	hex	chains	
Rb 3K	fcc	6.08	5.73	Br	complex	(Br ₂)	
Sr	fcc	3.65	5.73	Kr 4K	fcc	5.64	
Y	fcc	3.65	5.73	Sc	hcp	2.95	3.03
Zr	hcp	3.23	3.30	Ti	hcp	2.95	3.03
Nb	bcc	3.30	3.15	V	bcc	2.88	2.95
Mo	bcc	3.15	4.40	Cr	bcc	2.88	2.95
Tc	hcp	2.74	4.28	Mn	rhomb	complex	
Ru	hcp	2.71	4.28	Fe	bcc	2.87	2.95
Rh	fcc	3.80	4.07	Co	hcp	2.51	3.52
Pd	fcc	3.89	4.09	Ni	fcc	3.52	3.61
Ag	fcc	4.09	5.62	Cu	fcc	3.61	4.95
Cd	hcp	2.98	4.95	Zn	hcp	2.66	4.95
In	rhomb	3.25	4.95	Ga	complex		
Sn (α)	diamond	6.49		Ge	diamond	5.658	
Sb	rhomb			As	rhomb		
Te	hex	chains		Se	hex	chains	
I	complex	(I ₂)		Br	complex	(Br ₂)	
Xe 4K	fcc	6.13		Kr 4K	fcc	5.64	
Cs 3K	bcc	6.045	5.02	La	hcp	3.19	3.30
Ba	bcc	3.77	5.02	Hf	hcp	3.19	3.30
ABAC	5.05		Ta	bcc	3.30	3.16	4.16
W	bcc	3.16	4.16	Ra	hcp	2.76	4.32
Os	hcp	2.74	4.32	Ir	fcc	3.84	3.92
Pt	fcc	3.92	4.08	Au	fcc	4.08	
Hg	rhomb			Tl	hcp	3.46	5.52
Pb	fcc	4.95		Bi	rhomb		
Bi	rhomb			Po	sc	3.34	
Po	sc	3.34		At			
Rn							
Fr	Ra	Ac		Ce	fcc	5.16	
Th	fcc	5.08		Pr	hcp	3.67	3.66
Pa	hcp	3.92		Nd	hcp	3.66	
U	rhomb	3.24		Pm			
Np	complex			Sm	complex		
Pu	complex			Eu	bcc	4.58	3.63
Am	hcp	3.64		Gd	hcp	3.63	3.60
Cm				Tb	hcp	3.60	5.65
Bk				Dy	hcp	3.59	5.62
Cf				Ho	hcp	3.58	5.59
Es				Er	hcp	3.56	5.56
Fm				Tm	hcp	3.54	5.48
Md				Yb	fcc	5.48	5.55
No				Lu	hcp	3.50	5.55

جدول ۴. چگالی و غلظت اتمی
 این داده‌ها برای فشار جو و دمای اتاق یا دمای ذکر شده برحسب کلویین، داده شده‌اند.
 (ساختارهای بلوری مانند جدول ۳ است.)

H 4K	0.0688	He 2K	0.2005 (at 37 atm)
Li 78K	0.542	Ne 4K	1.51
4.700	1.82	F	1.44
3.023	2.22	O	3.16
Na 5K	0.910	Ar 4K	1.77
2.652	1.74	Cl 93K	2.03
4.30	4.30	S	2.02
3.659	3.20	P	2.35
K 5K	0.910	Ge	5.32
1.53	2.99	As	5.77
1.402	4.27	Se	4.81
4.525	3.25	Br 123K	4.05
Rb 5K	1.629	Kr 4K	3.09
2.58	4.48	Xe 4K	3.78
1.148	3.02	Te	6.25
4.837	3.55	I	4.95
Cs 5K	1.957	Pb	11.34
1.60	2.70	Bi	9.80
5.235	3.73	Po	2.67
Fr	---	At	---
Ra	---	Rn	---
Lu	9.84		
Yb	6.97		
Tm	9.32		
Er	9.04		
Ho	8.86		
Dy	8.53		
Tb	8.27		
Gd	7.89		
Eu	5.25		
Sm	7.94		
Pm	---		
Nd	6.78		
Pr	2.92		
Ce	6.77		
Th	11.72		
Pa	15.37		
U	19.05		
Np	20.46		
Pu	19.81		
Pu	4.26		
Pu	2.96		
Np	3.1		
U	3.21		
Pa	2.75		
Th	3.60		
Ac	16.07		
Ra	2.66		
Fr	3.76		
Lu	9.84		
Yb	6.97		
Tm	9.32		
Er	9.04		
Ho	8.86		
Dy	8.53		
Tb	8.27		
Gd	7.89		
Eu	5.25		
Sm	7.94		
Pm	---		
Nd	6.78		
Pr	2.92		
Ce	6.77		
Th	11.72		
Pa	15.37		
U	19.05		
Np	20.46		
Pu	19.81		
Pu	4.26		
Pu	2.96		
Np	3.1		
U	3.21		
Pa	2.75		
Th	3.60		
Ac	16.07		
Ra	2.66		
Fr	3.76		
Lu	9.84		
Yb	6.97		
Tm	9.32		
Er	9.04		
Ho	8.86		
Dy	8.53		
Tb	8.27		
Gd	7.89		
Eu	5.25		
Sm	7.94		
Pm	---		
Nd	6.78		
Pr	2.92		
Ce	6.77		
Th	11.72		
Pa	15.37		
U	19.05		
Np	20.46		
Pu	19.81		
Pu	4.26		
Pu	2.96		
Np	3.1		
U	3.21		
Pa	2.75		
Th	3.60		
Ac	16.07		
Ra	2.66		
Fr	3.76		
Lu	9.84		
Yb	6.97		
Tm	9.32		
Er	9.04		
Ho	8.86		
Dy	8.53		
Tb	8.27		
Gd	7.89		
Eu	5.25		
Sm	7.94		
Pm	---		
Nd	6.78		
Pr	2.92		
Ce	6.77		
Th	11.72		
Pa	15.37		
U	19.05		
Np	20.46		
Pu	19.81		
Pu	4.26		
Pu	2.96		
Np	3.1		
U	3.21		
Pa	2.75		
Th	3.60		
Ac	16.07		
Ra	2.66		
Fr	3.76		

چگالی بر حسب g cm^{-3}
 غلظت بر حسب 10^{23} cm^{-3}
 واحد اتمی بر حسب 10^{-10} m

مسائل

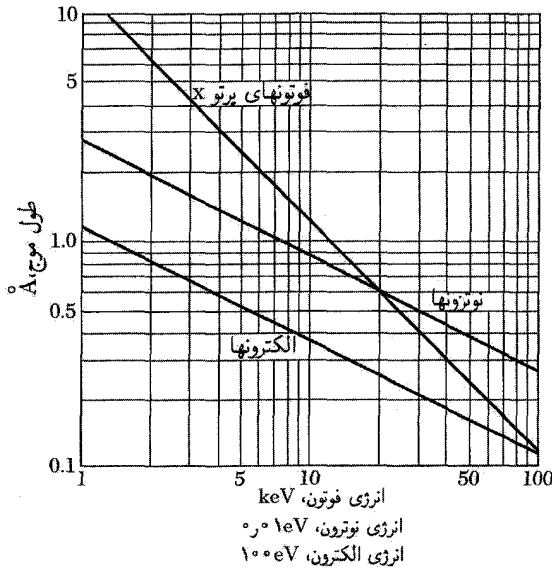
۱. زوایای چهاروجهی. زاویه بین پیوندهای چهاروجهی الماس، همان‌گونه که در شکل ۱۰ نشان داده شده، برابر با زاویه بین اقطار اصلی مکعب است. با استفاده از آنالیز برداری مقدماتی مقدار این زاویه را پیدا کنید.
۲. شاخصهای صفحات. در شبکه fcc صفحاتی را که نسبت به یاخته مکعبی قراردادی با شاخصهای (۱۰۰) و (۰۰۱) مشخص شده‌اند، در نظر بگیرید. این صفحات نسبت به محورهای بسیط شکل ۱۱ چه شاخصهایی دارند؟
۳. ساختار hcp. نشان دهید که نسبت c/a برای ساختار تنگ‌چین شش‌گوشی ایده‌آل برابر است با $1.633 = (\frac{8}{3})^{1/2}$. اگر c/a به‌طور قابل ملاحظه‌ای از این مقدار بزرگتر باشد، ساختار بلور را می‌توان به‌صورت صفحات تنگ‌چینی از آنها پنداشت که به‌طور واژچین روی هم چیده شده‌اند.

پراش موج و شبکه وارون

پراش امواج توسط بلورها قانون براگ

ساختار بلور را از طریق پراش فوتونها، نوترونها، و الکترونها بررسی می‌کنیم (شکل ۱). پراش به ساختار بلور و طول موج بستگی دارد. در طول موجهای اپتیکی مانند 5000 \AA ، برهم‌نهی امواجی که اتمهای این بلور به‌طور کشسان پراکنده می‌کنند، به شکست اپتیکی معمولی منجر می‌شود. اگر طول موج تابش با ثابت شبکه مقایسه‌پذیر یا کوچکتر از آن باشد، می‌توان باریکه‌های پراشیده را در جهتهای کاملاً متفاوت با جهت فرودی به‌دست آورد.

و. ل. براگ در مورد باریکه‌های پراشیده از بلور توضیح ساده‌ای ارائه کرد. با وجود اینکه محاسبه براگ ساده است، فقط به این دلیل که به نتیجه صحیح منجر می‌شود، متقاعدکننده است. فرض کنید امواج فرودی توسط صفحات اتمی موازی در بلور بازتاب آینه‌ای بیابند، به‌گونه‌ای که هر صفحه، مانند آینه‌ای که



شکل ۱. طول موج برحسب انرژی، برای فوتونها، نوترونها، و الکترونها.

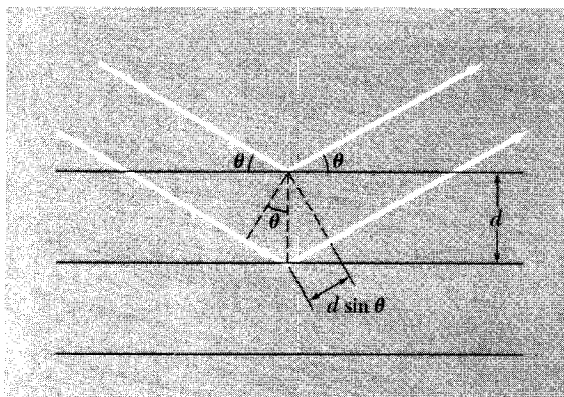
کمی نقره‌اندود شده باشد، فقط بخش کوچکی از پرتوها را بازتاب دهد. در بازتاب آینه‌ای زاویه فرودی با زاویه بازتاب برابر است. همان‌طور که در شکل ۲ نشان داده شده است، وقتی بازتابهای ناشی از صفحات اتمی موازی به‌طور سازنده تداخل کنند، باریکه‌های پراشیده ظاهر می‌شوند. در اینجا پراکندگی کشسان را، که در آن انرژی پرتو x در اثر بازتاب تغییر نمی‌کند، بررسی می‌کنیم.

صفحات موازی از شبکه را در نظر می‌گیریم، که به فاصله d از یکدیگر قرار دارند. تابش در صفحه کاغذ فرود می‌آید. اختلاف راه پرتوهایی که از دو صفحه متوالی بازتاب می‌یابند برابر $2d \sin \theta$ است، که در آن θ زاویه پرتو فرودی با این صفحه‌هاست. تابشهای حاصل از صفحات متوالی هنگامی با یکدیگر تداخل سازنده می‌کنند که اختلاف راهشان برابر مضرب درست n از طول موج λ باشد، بنابراین

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (1)$$

این قانون براگ است، که فقط برای طول موجهای $\lambda \geq 2d$ برآورده می‌شود.

با اینکه بازتاب حاصل از هر صفحه آینه‌ای است، بازتابهای ناشی از همه صفحات موازی فقط برای مقادیر معینی از زاویه θ به‌طور هم‌فاز با یکدیگر جمع می‌شوند و باریکه بازتابیده قوی ایجاد می‌کنند. اگر هر صفحه بازتابنده کامل می‌بود، فقط نخستین صفحه از مجموعه صفحات موازی، تابش را می‌دید و هر طول موجی بازتاب می‌یافت. ولی هر صفحه کسری برابر 10^{-3} تا 10^{-5} از پرتوهای فرودی را بازتاب



شکل ۲. به دست آوردن معادله براگ، $2d \sin \theta = n\lambda$ ؛ در اینجا d فاصله بین صفحات اتمی موازی و اختلاف فاز بین بازتابهای ناشی از صفحات متوالی برابر $2\pi n$ است. صفحات بازتابنده هیچ ارتباطی با سطوح خارجی نمونه ندارند.

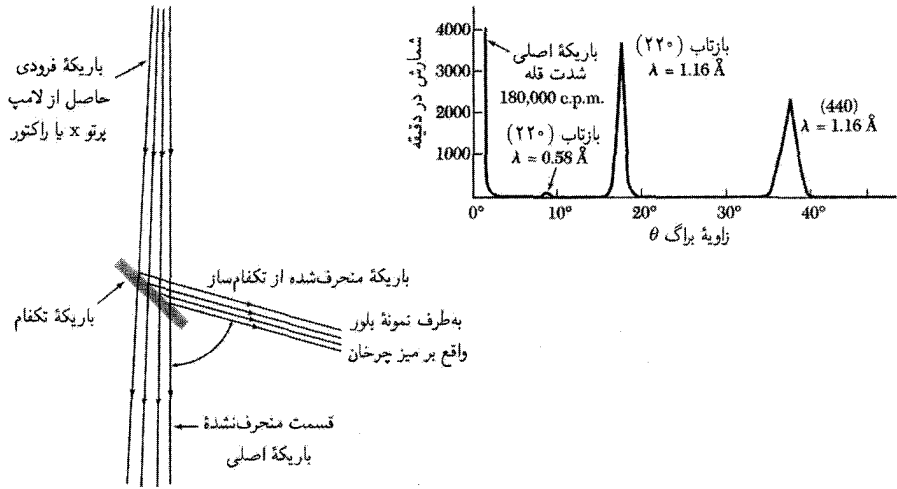
می دهد. به طوری که بلور کامل امکان دارد 10^3 تا 10^5 صفحه در تشکیل باریکه بازتابنده براگ شرکت جویند. بازتاب تک صفحه اتمی در فصل ۱۷ با عنوان فیزیک سطح بررسی می شود. قانون براگ نتیجه ای از دوره ای بودن شبکه است. توجه کنید که این قانون با ترکیب اتمهای پایه وابسته به هر نقطه شبکه ای ارتباطی ندارد. خواهیم دید که ترکیب پایه، شدت نسبی مرتبه های گوناگون پراش (که در بالا با n نشان داده شد) از مجموعه معینی از صفحات موازی را تعیین می کند. نتایج تجربی بازتاب براگ توسط یک تک بلور در شکل ۳ و توسط پودر در شکل ۴ داده شده اند.

دامنه موج پراکنده شده

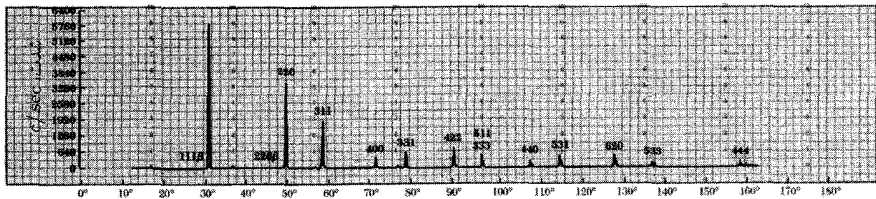
رهیافت براگ برای به دست آوردن شرط پراش (۱) گزاره ای دقیق در مورد شرط تداخل سازنده امواجی ارائه می دهد، که توسط نقاط شبکه ای پراکنده می شوند. برای تعیین شدت پراکنندگی ناشی از پایه ای از اتمها، یعنی توزیع فضایی الکترونها در داخل هر یاخته، به بررسی عمیقتری نیاز است.

تحلیل فوریه

دیدیم بلور تحت اثر هر انتقالی به صورت $\mathbf{T} = u_1 \mathbf{a}_1 + u_2 \mathbf{a}_2 + u_3 \mathbf{a}_3$ ناورداست، که u_1 ، u_2 و u_3 اعداد درست و \mathbf{a}_1 ، \mathbf{a}_2 و \mathbf{a}_3 محورهای بلورند. هر ویژگی فیزیکی موضعی بلور مانند غلظت بار، چگالی تعداد الکترونها، یا چگالی گشتاور مغناطیسی تحت اثر \mathbf{T} ناورداست. در اینجا مهمترین مسئله برای ما این است که چگالی تعداد الکترونها، $n(\mathbf{r})$ یک تابع دوره ای از \mathbf{r} با دوره های \mathbf{a}_1 ، \mathbf{a}_2 و \mathbf{a}_3 در امتداد سه



شکل ۳. طرح یک تکفام ساز که با استفاده از بازتاب براگ از یک باریکه فرودی با طیف وسیع، طیف باریکی از طول موجهای پرتو x یا نوترون را برمیگزیند. قسمت بالایی شکل، بررسی خلوص باریکه‌ای از نوترونهای 1.16 \AA را حاصل از بلور تکفام ساز کلسیم فلئورید را (که توسط بازتاب از یک بلور دیگر به دست آمده است) نشان می‌دهد.



شکل ۴. نتیجه پراش سنج پرتو x از سیلیسیم پودر شده که توسط شمارنده ثبت شده است.

محور بلور است. در این صورت:

$$n(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = n(\mathbf{r}) \quad (2)$$

این دوره‌ای بودن موقعیت مطلوبی برای استفاده از تحلیل فوریه به وجود می‌آورد. جالبترین ویژگیهای بلور را می‌توان به مؤلفه‌های فوریه چگالی الکترونها مربوط کرد.

ابتدا تابع یک بعدی $n(x)$ را با دوره a در راستای x در نظر می‌گیریم. این تابع را برحسب یک رشته سینوسی و کسینوسی فوریه بسط می‌دهیم:

$$n(x) = n_0 + \sum_{p>0} [C_p \cos(2\pi px/a) + S_p \sin(2\pi px/a)] \quad (3)$$

که در آن p ها اعداد درست و مثبت و C_p و S_p ثابتهای حقیقی‌اند و ضرایب بسط فوریه نامیده می‌شوند. ضریب $2\pi/a$ در شناسه‌ها نشانگر این است که دوره $n(x)$ برابر با a است:

$$\begin{aligned} n(x+a) &= n_0 + \sum [C_p \cos(2\pi px/a + 2\pi p) + S_p \sin(2\pi px/a) + 2\pi p] \\ &= n_0 + \sum [C_p \cos(2\pi px/a) + S_p \sin(2\pi px/a)] = n(x) \end{aligned} \quad (4)$$

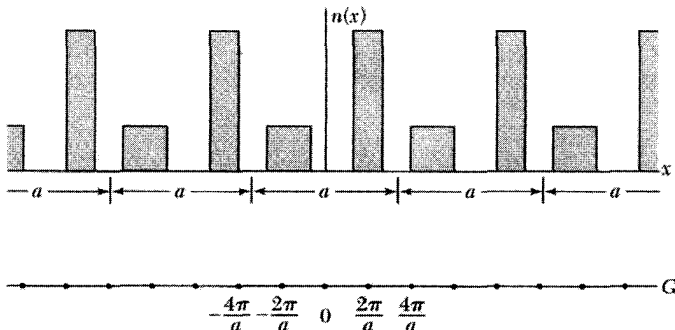
$2\pi p/a$ را نقطه‌ای در شبکه وارون با فضای فوریه بلور می‌گویند. در یک بعد این نقاط روی یک خط قرار می‌گیرند. نقاط شبکه وارون، جمله‌های مجاز را در رشته فوریه (۴) یا (۵) به ما می‌دهند. همان‌گونه که در شکل ۵ نشان داده شده است، یک جمله به شرطی که با دوره‌ای بودن بلور سازگار باشد، مجاز است؛ بقیه نقاط فضای وارون، در بسط فوریه تابع دوره‌ای، مجاز نیستند.

نوشتن رشته (۴) به شکل فشرده زیر بسیار مناسب است

$$n(x) = \sum_p n_p \exp(i2\pi px/a) \quad (5)$$

که در آن جمع روی همه اعداد درست p از مثبت، منفی، و صفر است. در اینجا ضرایب n_p اعداد مختلط‌اند. برای آنکه حقیقی بودن تابع $n(x)$ تضمین شود، لازم است

$$n_{-p}^* = n_p \quad (6)$$



شکل ۵. یک تابع دوره‌ای، $n(x)$ با دوره a و جملات $2\pi p/a$ که ممکن است در تبدیل فوریه $n(x) = \sum n_p \exp(i2\pi px/a)$ ظاهر شوند.

زیرا، در این صورت حاصل جمع جمله‌های مربوط به p و $-p$ حقیقی خواهد بود: n_{-p}^* نشانگر همیوگ مرکب n_{-p} است.

با گزینش $\varphi = 2\pi px/a$ ، به شرط برآورده شدن رابطه (۶)، مجموع جملات برحسب p و $-p$ در رابطه (۵) حقیقی‌اند. این جمع برابر است با

$$\begin{aligned} n_p(\cos \varphi + i \sin \varphi) + n_{-p}(\cos \varphi - i \sin \varphi) \\ = (n_p + n_{-p}) \cos \varphi + i(n_p - n_{-p}) \sin \varphi \end{aligned} \quad (7)$$

که به نوبه خود در صورتی که رابطه (۶) صادق باشد با تابع حقیقی زیر برابر خواهد بود

$$2\operatorname{Re}\{n_p\} \cos \varphi - 2\operatorname{Im}\{n_p\} \sin \varphi \quad (8)$$

در اینجا $\operatorname{Re}\{n_p\}$ و $\operatorname{Im}\{n_p\}$ به ترتیب، قسمت‌های حقیقی و موهومی n_p را نشان می‌دهند. در نتیجه چگالی تعداد $n(x)$ مطابق انتظار، تابع حقیقی است.

تعمیم تحلیل فوریه به توابع دوره‌ای سه‌بعدی ساده است. در این حالت، مجموعه‌ای از بردارهای \mathbf{G} را به‌گونه‌ای پیدا می‌کنیم که تابع

$$n(\mathbf{r}) \cdot \sum_{\mathbf{G}} n_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \quad (9)$$

تحت اثر تمامی انتقال‌های شبکه \mathbf{T} ، که بلور را ناورد باقی می‌گذارند، ناورد بماند. در زیر نشان خواهیم داد که مجموعه ضرایب فوریه $n_{\mathbf{G}}$ دامنه پراکندگی پرتو x را تعیین می‌کند.

وارون‌سازی رشته فوریه. اکنون نشان می‌دهیم که ضریب فوریه n_p در رشته (۵) با

$$n_p = a^{-1} \int_0^a dx n(x) \exp(-i2\pi px/a) \quad (10)$$

بیان می‌شود. با درج رشته (۵) در معادله (۱۰) داریم

$$n_p = a^{-1} \sum_{p'} n_{p'} \int_0^a dx \exp[i2\pi(p' - p)x/a] \quad (11)$$

اگر $p' \neq p$ مقدار انتگرال برابر است با

$$\frac{a}{i2\pi(p' - p)} (e^{i2\pi(p' - p)} - 1) = 0$$

زیرا $p' - p$ عددی درست است و $1 = \exp[i2\pi(\text{عدد درست})]$. برای جمله $p' = p$ انتگرالده برابر $\exp(i\phi) = 1$ و مقدار انتگرال برابر است با a ، در نتیجه $n_p a = a^{-1} n_p a = n_p$ که یک اتحاد است، بنابراین معادله (۱۰) یک اتحاد است.

همانند رابطه (۱۰)، وارون سازی معادله (۹) به رابطه زیر منجر می شود:

$$n_G = V_c^{-1} \int_{\text{یاخته}} dV n(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \quad (12)$$

در اینجا V_c حجم یاخته بلور است.

بردارهای شبکه وارون

برای تکمیل رشته فوریه مربوط به غلظت الکترون باید بردارهای \mathbf{G} مجموع فوریه $\sum n_G \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$ در رابطه (۹) به دست آوریم. روشی مؤثر و تا حدودی انتزاعی برای این کار وجود دارد. این روش اصول نظری را در مورد اغلب کارهای فیزیک حالت جامد، که در آن استفاده از تحلیل فوریه رایج است، تشکیل می دهد. بردارهای محوری b_1, b_2, b_3 و شبکه وارون به طریق زیر بنا می شوند:

$$b_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}; \quad b_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}; \quad b_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \quad (13)$$

ضریبهای 2π را بلورشناسان به کار نمی برند ولی در فیزیک حالت جامد مفیدند.

اگر a_1, a_2, a_3 بردارهای بسط شبکه بلور باشند، b_1, b_2, b_3 بردارهای بسط شبکه وارون خواهند بود. هر بردار در رابطه (۱۳) بر دو بردار محوری شبکه بلور عمود است. به این ترتیب b_1, b_2, b_3 دارای این ویژگی اند

$$b_i \cdot a_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (14)$$

که در آن $\delta_{ij} = 1$ اگر $i = j$ و $\delta_{ij} = 0$ اگر $i \neq j$.

نقاط شبکه وارون را مجموعه بردارهای \mathbf{b} ترسیم می کنند

$$\mathbf{G} = v_1 b_1 + v_2 b_2 + v_3 b_3 \quad (15)$$

که v_1, v_2, v_3 اعداد درست اند. هر بردار \mathbf{G} که به این شکل باشد بردار شبکه وارون نامیده می شود. بردارهای \mathbf{G} در رشته فوریه (۹) درست بردارهای شبکه وارون رابطه (۱۵) اند، زیرا در این صورت نمایش رشته فوریه برای چگالی الکترونها تحت اثر انتقال بلور $\mathbf{T} = v_1 a_1 + v_2 a_2 + v_3 a_3$ دارای ناوردایی مطلوب خواهد بود. از معادله (۹) داریم

$$n(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = \sum_{\mathbf{G}} n_G \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}) \quad (16)$$

ولی $\exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}) = 1$ زیرا

$$\begin{aligned} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}) &= \exp[i(v_1\mathbf{b}_1 + v_2\mathbf{b}_2 + v_3\mathbf{b}_3) \cdot (u_1\mathbf{a}_1 + u_2\mathbf{a}_2 + u_3\mathbf{a}_3)] \quad (17) \\ &= \exp[i2\pi(v_1u_1 + v_2u_2 + v_3u_3)] \end{aligned}$$

از آنجا که $v_1u_1 + v_2u_2 + v_3u_3$ مجموع حاصلضربهای اعداد درست است و بنابراین خود یک عدد درست است، شناسه تابع نمایی فوق به صورت حاصلضرب $2\pi i$ در یک عدد درست است. بنابراین با استفاده از رابطه (۹) نتیجه می شود ناوردایی مطلوب، یعنی $n(\mathbf{r}+\mathbf{T}) = n(\mathbf{r}) = \sum n_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$ وجود دارد.

به هر ساختار بلوری دو نوع شبکه، یکی شبکه بلور و دیگری شبکه وارون، مربوط می شود. همان گونه که خواهیم دید نقشه پراش بلور، نقشه شبکه وارون آن است. در حالی که تصویر حاصل از میکروسکوپ، اگر بتوان آن را بر روی مقیاسی نسبتاً ظریف تفکیک کرد، نقشه ساختار بلور در فضای واقعی است. تعریفهای (۱۳) این دو شبکه را به هم مربوط می کنند. وقتی بلوری را با نگهدارنده اش بچرخانیم، هر دو شبکه مستقیم و وارون می چرخند.

بردارهای شبکه مستقیم ابعاد [طول] دارند؛ در حالی که بردارهای شبکه وارون ابعاد [طول/۱] دارند. شبکه وارون، شبکه ای در فضای فوریه وابسته به بلور است. انگیزه استفاده از جمله فضای فوریه در ادامه آمده است. بردارهای موج همیشه در فضای فوریه رسم می شوند. هر مکانی در فضای فوریه ممکن است به معنی توصیفی از موج باشد، ولی نقاطی که مجموعه بردارهای \mathbf{G} تعریف می کنند، اهمیت ویژه ای دارند.

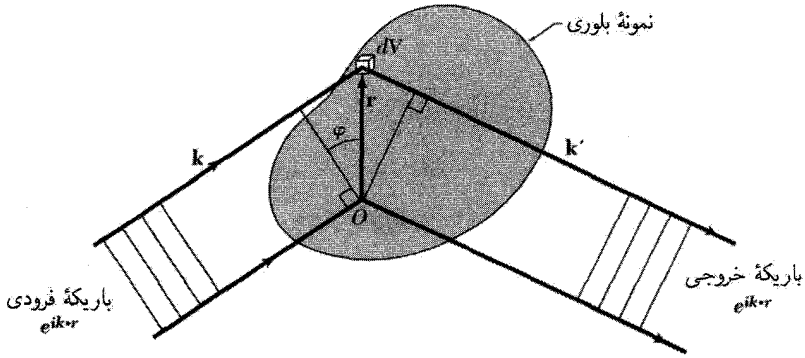
شرایط پراش

قضیه. مجموعه بردارهای شبکه وارون \mathbf{G} بازتابهای ممکن پرتو x را تعیین می کند.

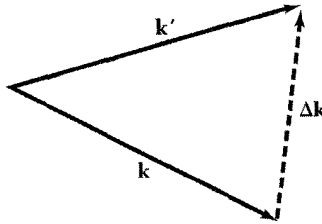
در شکل ۶ مشاهده می کنیم که اختلاف ضریبهای فاز بین دو باریکه پراکنده شده از دو عنصر حجم که به فاصله \mathbf{r} از یکدیگر واقع اند برابر است با $\exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}]$. \mathbf{k} و \mathbf{k}' بردارهای موج باریکه های ورودی و خروجی اند. دامنه موج پراکنده شده از هر عنصر حجم با تراکم موضعی الکترونها، $n(\mathbf{r})$ متناسب است. دامنه کل موج پراکنده شده در جهت \mathbf{k}' با انتگرال حاصلضرب $n(\mathbf{r})dV$ در فاکتور فاز $\exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}]$ روی تمامی بلور متناسب است.

به زبان دیگر، دامنه بردارهای میدان الکتریکی یا مغناطیسی در موج الکترومغناطیسی پراکنده شده متناسب با انتگرال زیر است که کمیت F به نام دامنه پراکندگی را تعریف می کند:

$$F = \int dV n(\mathbf{r}) \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}] = \int dV n(\mathbf{r}) \exp(-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (18)$$



شکل ۶. اختلاف راه بین موج فرودی k در نقاط O و r برابر $r \sin \varphi$ و اختلاف زاویه فاز بین این دو نقطه برابر است با $(2\pi r \sin \varphi) / \lambda$ که با $k \cdot r$ برابر است. در مورد موج پراشیده اختلاف زاویه فاز برابر $-k' \cdot r$ است. اختلاف کل در زاویه فاز برابر $(k - k') \cdot r$ است و موج پراکنده شده از dV در r فاکتور فاز $\exp[i(k - k') \cdot r]$ را نسبت به موج پراکنده شده از عنصر حجم واقع در مبدأ O دارد است.



شکل ۷. تعریف بردار پراکندگی Δk به گونه ای که $k + \Delta k = k'$. در پراکندگی کشسان بزرگی بردارهای موج در رابطه $k' = k$ صدق می کند. علاوه بر این، در پراکندگی براگ از یک شبکه دوره ای هر Δk مجاز باید با یک بردار شبکه وارون G برابر باشد.

که در آن $k - k' = -\Delta k$ ، یا

$$k + \Delta k = k' \quad (19)$$

در اینجا Δk تغییر بردار موج در اثر پراکندگی است و بردار پراکندگی نام دارد (شکل ۷). برای به دست آوردن بردار موج پراکنده شده k' ، Δk را با k جمع می کنیم.

مؤلفه های فوریه $m(r)$ ، رابطه (۹)، را در رابطه (۱۸) قرار می دهیم و عبارت زیر را برای دامنه پراکندگی

به دست می آوریم

$$F = \sum_G \int dV n_G \exp[i(G - \Delta k) \cdot r] \quad (20)$$

هنگامی که بردار پراکندگی $\Delta \mathbf{k}$ با بردار شبکه وارون \mathbf{G} برابر باشد،

$$\Delta \mathbf{k} = \mathbf{G} \quad (21)$$

شناسه تابع نمایی برابر صفر می شود و $F = V n_G$. به صورت ترمینی ساده (مسئله ۴) می توان نشان داد که هر گاه $\Delta \mathbf{k}$ با هر بردار شبکه وارون اختلاف عمده ای داشته باشد، F چشم پوشیدنی خواهد بود.

در پراکندگی کشسان انرژی $h\omega$ فوتون پایسته می ماند، در نتیجه بسامد، $\omega' = ck'$ ، باریکه خروجی با بسامد باریکه فرودی برابر است. بنابراین بزرگیهای k و k' مساوی اند، و $k'^2 = k^2$ ، نتیجه ای که در مورد پراکندگی کشسان باریکه های الکترونی و نوترونی معتبر است. با استفاده از رابطه (۲۱) دیدیم $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{G}$ یا $\mathbf{k} + \mathbf{G} = \mathbf{k}'$ در نتیجه شرط پراش به صورت $(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 = k^2$ یا

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} + G^2 = 0 \quad (22)$$

در می آید.

این رابطه نتیجه اصلی نظریه پراکندگی کشسان امواج در شبکه دوره ای است. اگر \mathbf{G} بردار شبکه وارون باشد، $-\mathbf{G}$ نیز برداری از شبکه وارون خواهد بود؛ بنابراین رابطه (۲۲) را می توان به صورت زیر نوشت

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = G^2 \quad (23)$$

این رابطه بخصوص غالباً به منزله شرط پراش به کار می رود.

معادله (۲۳) گزاره دیگری از شرط براگ (۱) است. از مسئله ۱ نتیجه می شود که فاصله $d(hkl)$ بین صفحات موازی شبکه، که بر جهت $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$ عمودند، به صورت $d(hkl) = 2\pi/|\mathbf{G}|$ است. بدین ترتیب، نتیجه $\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = G^2$ را می توان به صورت زیر نوشت

$$2 \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right) \sin \theta = \frac{2\pi}{d(hkl)}$$

یا $2d(hkl) \sin \theta = \lambda$. در اینجا زاویه θ زاویه بین باریکه فرودی و صفحه بلور است.

اعداد درست hkl که \mathbf{G} را تعریف می کنند، الزاماً با شاخصهای یک صفحه واقعی بلور یکسان نیستند. اعداد درستی که \mathbf{G} را تعریف می کنند، ممکن است شامل عامل مشترک n باشند، در حالی که در تعریف شاخصهای صفحات در فصل ۱، عامل مشترک حذف شده است. بنابراین، نتیجه براگ را به دست می آوریم:

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (24)$$

که در آن d فاصله بین صفحات موازی مجاور است که شاخصهایشان h/n ، k/n و l/n هستند.

معادلات لاوه

نتیجه اصلی نظریه پراش رابطه (۲۱)، یعنی $\Delta k = G$ ، را می‌توان به روش دیگری بیان کرد تا معادلات لاوه به دست آیند. این معادلات به خاطر نمایش هندسی آنها با ارزش‌اند. ضرب داخلی Δk و G را متوالیاً در a_1 ، a_2 ، و a_3 به دست می‌آوریم. از روابط (۱۴) و (۱۵) خواهیم داشت

$$a_1 \cdot \Delta k = 2\pi v_1; \quad a_2 \cdot \Delta k = 2\pi v_2; \quad a_3 \cdot \Delta k = 2\pi v_3 \quad (25)$$

این معادلات تعبیر هندسی ساده‌ای دارند. معادله اول، یعنی $a_1 \cdot \Delta k = 2\pi v_1$ ، نشان می‌دهد که Δk روی مخروط معینی حول a_1 قرار دارد. علاوه بر این، معادله دوم نشانه آن است که Δk باید روی مخروطی حول a_2 باشد و معادله سوم ایجاب می‌کند که Δk روی مخروطی حول a_3 باشد. بنابراین برای آنکه بازتابی صورت گیرد، Δk باید در هر سه معادله فوق صدق کند؛ یعنی باید در مرز مشترک سه مخروط باشد، که شرطی بس دشوار است و تنها با روبش یا کاوش در طول موج یا کاوش در سمتگیری بلور، یا به طور صرفاً تصادفی، می‌تواند برآورده شود.

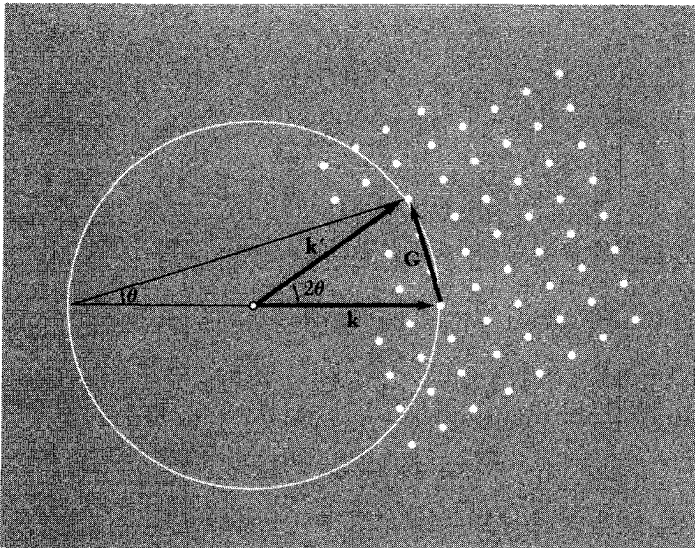
یک ترسیم هندسی مفید، به نام ترسیم اوالد، در شکل ۸ نشان داده شده است. ترسیم اوالد ما را در تجسم طبیعت تصادفی، که باید برای برآورده شدن شرط پراش در سه بعد رخ دهد، یاری می‌کند.

منطقه‌های بریلوتن

گزاره‌ای که بریلوتن برای شرط پراش ارائه کرد، در گستره بسیار وسیعی از فیزیک حالت جامد، یعنی در نظریه نواری انرژی الکترون و در دیگر برانگیختگیهای بنیادی به کار می‌رود. بنا به تعریف، منطقه بریلوتن یاخته بسیط و یگانه‌سایتس در شبکه وارون است. (بنا کردن این یاخته در شبکه مستقیم در شکل ۴ فصل ۱ نشان داده شده است). منطقه بریلوتن تعبیر هندسی روشنی از شرط پراش $G^2 = 2k \cdot G$ در معادله (۲۳) ارائه می‌دهد. دو طرف رابطه را بر ۴ تقسیم می‌کنیم و به دست می‌آوریم

$$k \cdot \left(\frac{1}{2}G\right) = \left(\frac{1}{2}G\right)^2 \quad (26)$$

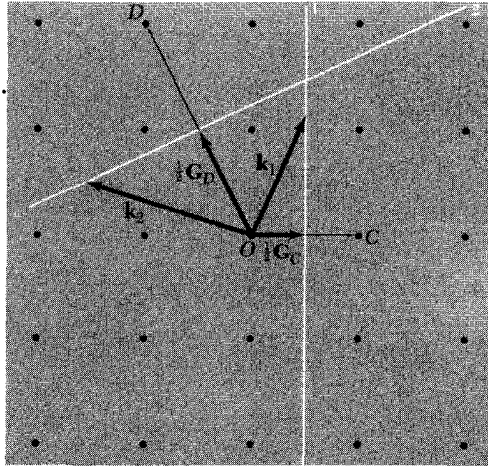
حال در فضای وارون، یعنی فضای k ها و G ها کار می‌کنیم. برداری مانند G ، که از مبدأ شروع و به نقطه‌ای از شبکه وارون ختم می‌شود، برمی‌گزینیم صفحه عمودمنصف بردار G را رسم می‌کنیم. این صفحه بخشی از مرز منطقه را تشکیل می‌دهد (شکل ۹ الف). باریکه پرتو x که بر بلور فرود می‌آید، به شرطی پراشیده می‌شود که بزرگی و جهت بردار موجش در رابطه (۲۶) صدق کند. همان‌طور که از معادله (۱۹) با $\Delta k = -G$ دیده می‌شود، باریکه پراشیده در جهت بردار $G - k$ خواهد بود. بنابراین بنای بریلوتن تمامی بردار موجهای nk ای را که توسط بلور بازتاب براگ می‌یابند، نمایش می‌دهد.



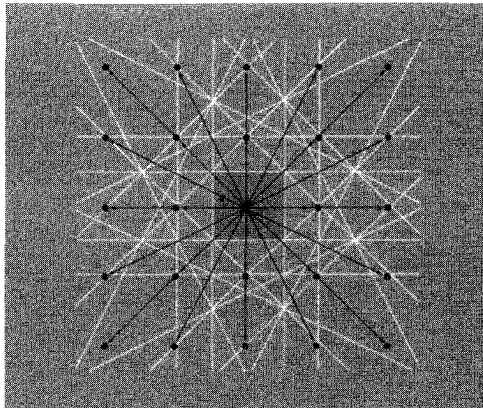
شکل ۸. نقاط سمت راست، نقاط شبکه وارون بلورند. بردار k در جهت باریکه x فرودی رسم شده است. مبدأ به‌گونه‌ای برگزیده شده است که k به یک نقطه شبکه وارون منتهی می‌شود. کره‌ای به شعاع $k = 2\pi/\lambda$ حول k رسم می‌کنیم. اگر این کره از هر نقطه دیگری از شبکه وارون بگذرد، باریکه پراشیده‌ای تشکیل خواهد شد. کره‌ای که در شکل رسم شده است، از نقطه دیگری می‌گذرد که بردار شبکه وارون G آن را به انتهای k وصل می‌کند. باریکه پرتو x پراشیده در جهت $k' = k + G$ خواهد بود. θ زاویه براگ در شکل ۲ است. این ترسیم را پ. ب. اوالد ابداع کرده است.

در نظریه انتشار امواج در بلورها، مجموعه صفحاتی که عمودمنصف بردارهای شبکه وارون‌اند اهمیت اساسی دارند، زیرا موجی که بردار موج آن از مبدأ شروع و به یکی از این صفحات ختم شود، شرایط پراش را برآورده می‌کند. همان‌گونه که در شکل ۹ ب برای شبکه مربعی نشان داده شده است، این صفحات فضای فوریه بلور را به قطعه‌های گوناگون تقسیم می‌کنند. مربع مرکزی یک یاخته بسط در شبکه وارون است. این یک یاخته ویگنر-سایتس از شبکه وارون است.

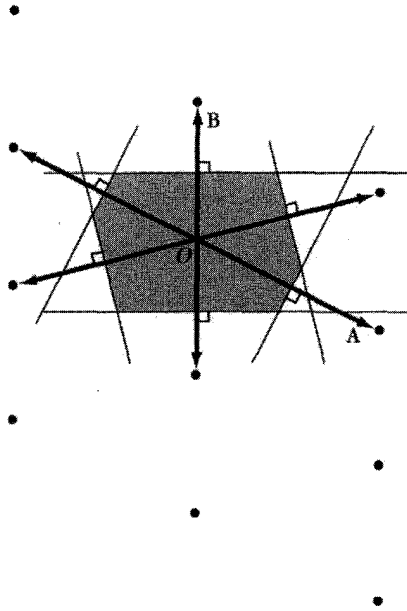
در نظریه جامدها، یاخته مرکزی شبکه وارون دارای اهمیت ویژه‌ای است و آن را منطقه اول بریلوئن می‌نامیم. منطقه اول بریلوئن کوچکترین حجمی است که صفحات عمودمنصف بردارهای شبکه وارونی که از مبدأ رسم شده‌اند آن را به‌طور کامل محصور کرده باشد. نمونه‌های آن در شکل‌های ۱۰ و ۱۱ نشان داده شده‌اند. از نظر تاریخی منطقه‌های بریلوئن بخشی از زبان تحلیل ساختارهای بلوری توسط پراش پرتو x نیست، بلکه این منطقه‌ها بخشی اساسی تحلیل ساختار نواری انرژی الکترونی بلور را تشکیل می‌دهند. کارایی ویژه منطقه اول در فصل ۹ نشان داده شده است.



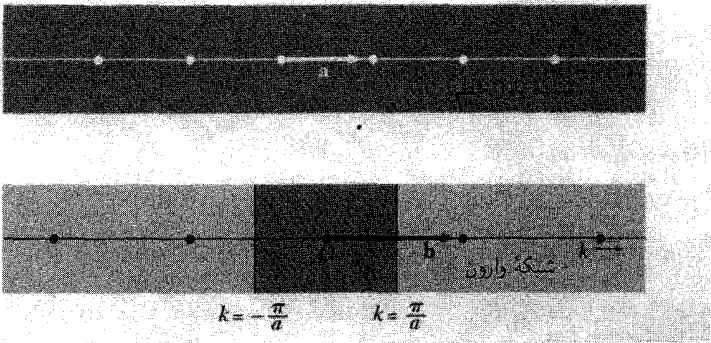
شکل ۹. الف. نقاط شبکه وارون. در نزدیکی نقطه O در مبدأ شبکه وارون. بردار شبکه وارون G_C نقاط O و C و بردار G_D نقاط O و D را به هم متصل می‌کند. دو صفحه ۱ و ۲ به ترتیب عمودمنصفهای G_C و G_D اند. هر برداری مانند k_1 که از مبدأ شروع و به صفحه ۱ ختم شود، در شرط پراش $k_1 \cdot (\frac{1}{V}G_C) = (\frac{1}{V}G_C)^2$ صدق می‌کند. هر برداری، مانند k_2 ، که از مبدأ شروع و به صفحه ۲ ختم شود، شرط پراش $k_2 \cdot (\frac{1}{V}G_D) = (\frac{1}{V}G_D)^2$ را برآورده می‌کند.



شکل ۹. ب. شبکه وارون مربعی همراه با بردارهای شبکه وارون که با خطوط سیاه رسم شده‌اند. خطوط سفید عمودمنصفهای بردارهای شبکه وارون‌اند. مربع مرکزی معرف کوچکترین حجمی حول مبدأ است که خطوط سفید آن را کاملاً محصور کرده‌اند. این مربع یاخته بسیط ویگنر-سایتس شبکه وارون است. این یاخته را منطقه اول بریلوتن می‌نامند.



شکل ۱۰. رسم منطقه اول بریلوتن یک شبکه مایل دوبعدی. ابتدا در شبکه وارون بردارهایی از نقطه O به نقاط مجاور رسم می‌کنیم. سپس خطوط عمودمنصف این بردارها را رسم می‌کنیم. کوچکترین سطح محصور، منطقه اول است.



شکل ۱۱. شبکه بلوریک بعدی و وارون آن. بردار b به طور $2\pi/a$ بردار پایه در شبکه وارون است. کوتاهترین بردارهای شبکه وارون که از مبدأ رسم شده‌اند عبارت‌اند از b و $-b$. عمودمنصفهای این بردارها مرزهای منطقه اول بریلوتن را تشکیل می‌دهند. مرزها در $k = \pm \frac{\pi}{a}$ واقع‌اند.

شبکه وارون شبکه sc

بردارهای انتقال بسیط شبکه مکعبی ساده را می‌توان به صورت مجموعه زیر در نظر گرفت

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{x}; \quad \mathbf{a}_2 = a\hat{y}; \quad \mathbf{a}_3 = a\hat{z} \quad (27\text{الف})$$

در اینجا \hat{x} ، \hat{y} ، و \hat{z} بردارهای یکه متعامند. حجم یاخته برابر $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 = a^3$ است. بردارهای انتقال بسیط شبکه وارون از دستورالعمل استاندارد رابطه (۱۳) به دست می‌آیند:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{x}; \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{y}; \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\hat{z} \quad (27\text{ب})$$

در اینجا شبکه وارون خود یک شبکه مکعبی ساده با ثابت شبکه $2\pi/a$ است. مرزهای منطقه اول بریلوفن عبارتند از صفحات عمودمنصف شش بردار شبکه وارون $\pm\mathbf{b}_1$ ، $\pm\mathbf{b}_2$ و $\pm\mathbf{b}_3$

$$\pm\frac{1}{2}\mathbf{b}_1 = \pm\frac{\pi}{a}\hat{x}; \quad \pm\frac{1}{2}\mathbf{b}_2 = \pm\frac{\pi}{a}\hat{y}; \quad \pm\frac{1}{2}\mathbf{b}_3 = \pm\frac{\pi}{a}\hat{z} \quad (28)$$

این شش صفحه مکعبی به ضلع $2\pi/a$ و حجم $(2\pi/a)^3$ تشکیل می‌دهند؛ این مکعب منطقه اول بریلوفن شبکه بلوری sc است.

شبکه وارون شبکه bcc

بردارهای انتقال بسیط شبکه bcc (شکل ۱۲) عبارت‌اند از

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}); \quad \mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}); \quad \mathbf{a}_3 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) \quad (29)$$

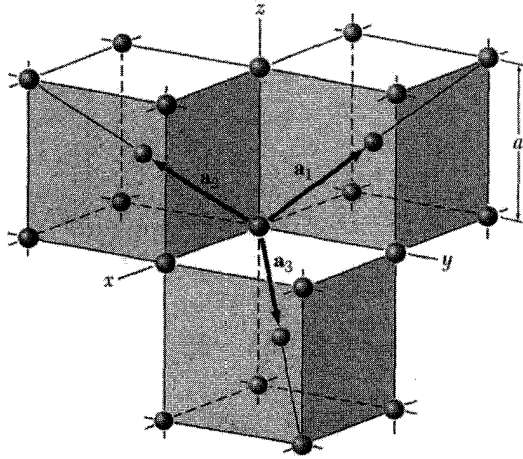
که a ضلع مکعب قراردادی است، \hat{x} ، \hat{y} ، \hat{z} بردارهای یکه و متعامدی‌اند که با اضلاع مکعب موازی‌اند. حجم یاخته بسیط برابر است با

$$V = |\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3| = \frac{1}{4}a^3 \quad (30)$$

بردارهای انتقال بسیط شبکه وارون با رابطه (۱۳) تعریف می‌شوند. با استفاده از رابطه (۲۸) داریم

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{y} + \hat{z}); \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{z}); \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y}) \quad (31)$$

در مقایسه با شکل ۱۴ ملاحظه می‌شود که این بردارها، بردارهای بسیط شبکه fcc هستند؛ بنابراین شبکه وارون bcc یک شبکه fcc است.



شکل ۱۲. بردارهای پایهٔ بسیط شبکهٔ مکعبی مرکز حجمی.

اگر v_1, v_2, v_3 اعداد درست باشند، بردار عمومی شبکهٔ وارون چنین است:

$$\mathbf{G} = v_1 \mathbf{b}_1 + v_2 \mathbf{b}_2 + v_3 \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a} [(v_2 + v_3)\hat{x} + (v_1 + v_3)\hat{y} + (v_1 + v_2)\hat{z}] \quad (32)$$

کوتاهترین \mathbf{G} ها عبارت‌اند از ۱۲ بردار که با گزینش مستقل علامتها به دست می‌آیند

$$\frac{2\pi}{a}(\pm\hat{y} \pm \hat{z}); \quad \frac{2\pi}{a}(\pm\hat{x} \pm \hat{z}); \quad \frac{2\pi}{a}(\pm\hat{x} \pm \hat{y}) \quad (33)$$

یاختهٔ بسیط شبکهٔ وارون متوازی‌السطوحی است که بر سه بردار $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ که با رابطهٔ (۳۱) تعریف می‌شوند، بنا شود. حجم این یاخته در شبکهٔ وارون برابر $2(2\pi/a)^3$ است. این یاخته شامل یک نقطهٔ شبکهٔ وارون است، زیرا هر یک از هشت رأس، بین هشت متوازی‌السطوح مشترک است: هر متوازی‌السطوح شامل یک هشتم هر یک از هشت رأس است (شکل ۱۲ را ببینید). یک یاختهٔ بسیط دیگر در شبکهٔ وارون یاختهٔ مرکزی (ویگنر-سایتس) قرار دارد که همان منطقهٔ اول بریلوئن است. در مرکز چنین یاخته‌ای یک نقطهٔ شبکه واقع است. این منطقه (برای شبکه bcc) را صفحات عمودمنصف ۱۲ بردار معادلهٔ (۳۳) محصور می‌کنند و همان‌گونه که در شکل ۱۳ نشان داده شده، دوازده‌وجهی لوزی‌رخ است.

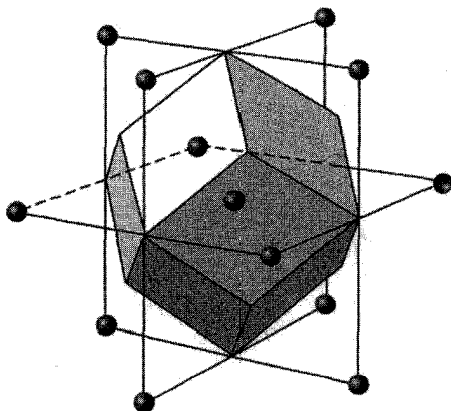
شبکهٔ وارون شبکهٔ fcc

بردارهای انتقال بسیط شبکهٔ fcc، که در شکل ۱۴ نشان داده شده‌اند، عبارت‌اند از

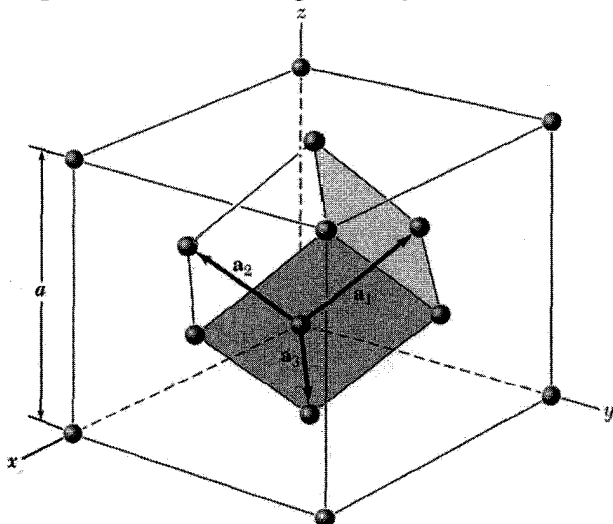
$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}a(\hat{y} + \hat{z}); \quad \mathbf{a}_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}a(\hat{x} + \hat{z}); \quad \mathbf{a}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}a(\hat{x} + \hat{y}) \quad (34)$$

حجم یاخته بسیط برابر است با

$$V = |\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3| = \frac{1}{\sqrt{3}}a^3 \quad (35)$$



شکل ۱۳. منطقه اول بریلوئن شبکه مکعبی مرکزجسمی. این شکل، یک دوازده‌وجهی لوزی‌رخ منظم است.



شکل ۱۴. بردارهای پایه بسیط شبکه مکعبی مرکزسطحی.

بردارهای انتقال بسیط شبکه وارون شبکه fcc عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= (\sqrt{\pi}/a)(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}); & \mathbf{b}_2 &= (\sqrt{\pi}/a)(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}); & (36) \\ \mathbf{b}_3 &= (\sqrt{\pi}/a)(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) \end{aligned}$$

این بردارها، بردارهای انتقال بسیط شبکه bcc‌اند. بنابراین شبکه وارون شبکه fcc شبکه bcc است. حجم یاخته بسیط شبکه وارون برابر $4(\sqrt{\pi}/a)^3$ است. کوتاهترین \mathbf{G} ها هشت بردار زیرند

$$(\sqrt{\pi}/a)(\pm\hat{x} \pm \hat{y} \pm \hat{z}) \quad (37)$$

بخش اعظم مرزهای یاخته مرکزی در شبکه وارون را هشت صفحه عمودمنصف این بردارها تشکیل می‌دهند، ولی گوشه‌های هشت‌وجهی حاصل را صفحات عمودمنصف شش بردار دیگر شبکه وارون یعنی

$$(\sqrt{\pi}/a)(\pm 2\hat{x}); \quad (\sqrt{\pi}/a)(\pm 2\hat{y}); \quad (\sqrt{\pi}/a)(\pm 2\hat{z}) \quad (38)$$

قطع می‌کنند. توجه داریم که $(\sqrt{\pi}/a)(2\hat{x})$ بردار شبکه وارون است، زیرا با $\mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3$ برابر است. منطقه اول بریلوئن، یعنی کوچکترین حجم محصور حول مبدأ، یک هشت‌وجهی است که شش گوشه آن قطع شده باشد (شکل ۱۵). شش صفحه فوق، مکعبی به ضلع $4\pi/a$ و به حجم $(4\pi/a)^3$ (قبل از قطع گوشه‌های مکعب) تشکیل می‌دهند.

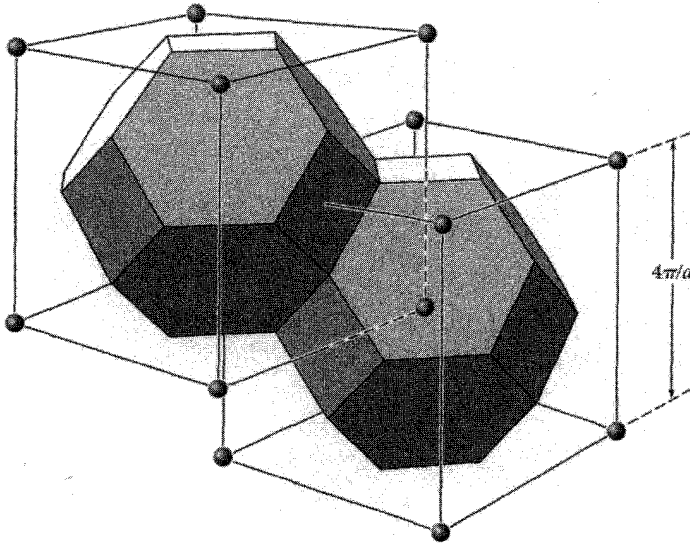
تحلیل فوریه پایه

هنگامی که شرط پراش $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{G}$ در معادله (۲۱) برآورده شود، دامنه پراکندگی رابطه (۱۸) برای بلوری با N یاخته به این صورت نوشته می‌شود

$$F_{\mathbf{G}} = N \int_{\text{یاخته}} dV n(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) = NS_{\mathbf{G}} \quad (39)$$

کمیت $S_{\mathbf{G}}$ عامل ساختار نامیده می‌شود و به صورت انتگرالی روی تک‌یاخته‌ای تعریف می‌شود که $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ در یک گوشه آن واقع است.

اغلب مناسبتر است که غلظت الکترونی $n(\mathbf{r})$ را به صورت برهم‌نهی توابع غلظت الکترونی n_j مربوط به اتم j در یاخته، بنویسیم. اگر مرکز اتم j را با بردار \mathbf{r}_j نشان دهیم، سهم این اتم در غلظت



شکل ۱۵. منطقه‌های بریلوئن شبکه مکعبی مرکز سطحی، یاخته‌ها در فضای وارون‌اند و شبکه وارون مرکز حجمی است.

الکترونی در نقطه \mathbf{r} با $n_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$ تعریف می‌شود. غلظت الکترونی کل مربوط به همه اتم‌های تک‌یاخته در \mathbf{r} برابر است با مجموع

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^s n_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \quad (40)$$

روی s اتم موجود در پایه. از آنجا که همیشه نمی‌توان گفت که چقدر بار به هر اتم وابسته است، تجزیه $n(\mathbf{r})$ به صورت فوق یکتا نیست. این موضوع مشکل مهمی نیست.

اکنون می‌توان عامل ساختار را، که با رابطه (۳۹) تعریف می‌شود، به صورت انتگرالهایی روی s اتم یک یاخته نوشت:

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{G}} &= \sum_j \int dV n_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \\ &= \sum_j \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j) \int dV n_j(\boldsymbol{\rho}) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \boldsymbol{\rho}) \quad (41) \end{aligned}$$

که در آن $\rho = \mathbf{r} - \mathbf{r}_j$. اکنون عامل شکل اتمی را به طریق زیر تعریف می‌کنیم

$$f_j = \int dV n_j(\rho) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \rho) \quad (42)$$

که انتگرال‌گیری روی تمامی فضاست. اگر $n_j(\rho)$ ویژگی اتمی باشد، f_j نیز ویژگی اتمی خواهد بود. از ترکیب روابط (۴۱) و (۴۲) عامل ساختار پایه به صورت زیر درمی‌آید

$$S_{\mathbf{G}} = \sum_j f_j \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j) \quad (43)$$

شکل معمولی این نتیجه با استفاده از رابطه (۲) از فصل ۱ برای اتم j دنبال می‌شود:

$$\mathbf{r}_j = x_j \mathbf{a}_1 + y_j \mathbf{a}_2 + z_j \mathbf{a}_3 \quad (44)$$

برای بازتابی که با v_1, v_2, v_3 مشخص می‌شود، داریم

$$\begin{aligned} \mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j &= (v_1 \mathbf{b}_1 + v_2 \mathbf{b}_2 + v_3 \mathbf{b}_3) \cdot (x_j \mathbf{a}_1 + y_j \mathbf{a}_2 + z_j \mathbf{a}_3) \\ &= 2\pi(v_1 x_j + v_2 y_j + v_3 z_j) \end{aligned} \quad (45)$$

در نتیجه رابطه (۴۳) به صورت زیر درمی‌آید

$$S_{\mathbf{G}}(v_1 v_2 v_3) = \sum_j f_j \exp[-i 2\pi(v_1 x_j + v_2 y_j + v_3 z_j)] \quad (46)$$

عامل ساختار S لزومی ندارد حقیقی باشد؛ زیرا شدت پراکندگی به کمیت حقیقی $S^* S$ وابسته است، که در آن S^* همیوگ مختلط S و در نتیجه $S^* S$ حقیقی است.

عامل ساختار شبکه bcc

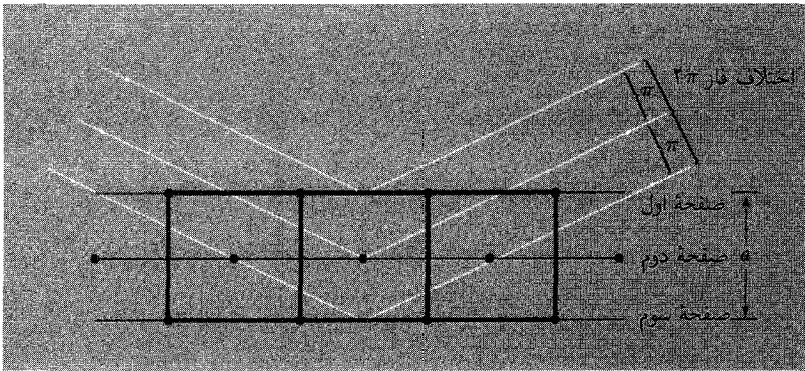
پایه ساختار bcc، نسبت به یاخته مکعبی، اتمهای یکسانی در نقاط $x_1 = y_1 = z_1 = 0$ و $x_2 = y_2 = z_2 = \frac{1}{2}$ دارد. در نتیجه (۴۶) به صورت زیر درمی‌آید

$$S(v_1 v_2 v_3) = f \{ 1 + \exp[-i\pi(v_1 + v_2 + v_3)] \} \quad (47)$$

که در آن f عامل شکل اتم است. هرگاه قسمت نمایی برابر ۱- شود، یعنی هرگاه شناسه برابر حاصلضرب $-i\pi$ در یک عدد درست فرد باشد، مقدار S صفر می‌شود. در نتیجه داریم

$$S = 0 \quad \text{اگر} \quad \text{عدد درست فرد} = v_1 + v_2 + v_3$$

$$S = 2f \quad \text{اگر} \quad \text{عدد درست زوج} = v_1 + v_2 + v_3$$



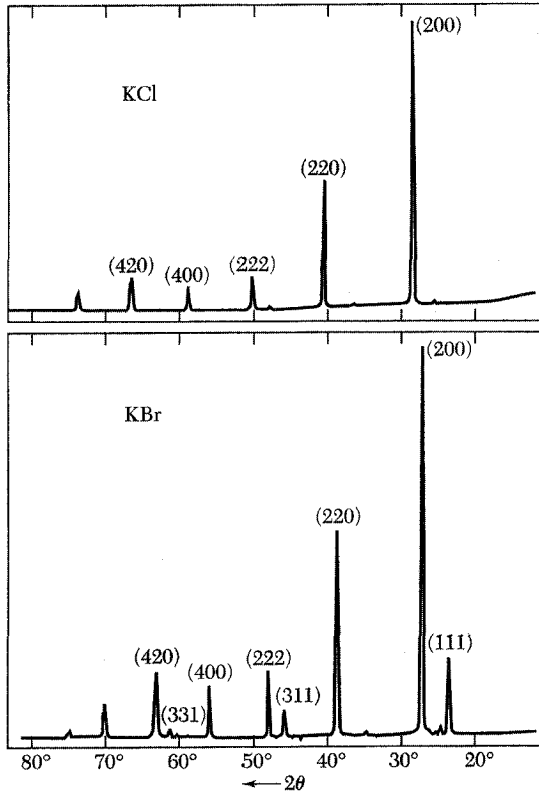
شکل ۱۶. توضیح در مورد فقدان بازتاب (100) از شبکه مرکز جرمی. اختلاف فاز بین صفحات متوالی برابر π است. بنابراین، دامنه بازتابیده از دو صفحه متوالی برابر است با $1 + e^{-i\pi} = 1 - 1 = 0$.

سدیم فلزی دارای ساختار bcc است. نقش پراش شامل خطوطی مانند (100)، (300)، (111)، یا (221) نخواهد بود، ولی خطوطی مانند (200)، (110)، و (222) حضور خواهند داشت؛ در اینجا شاخصهای ($v_1 v_2 v_3$) برای یاخته مکعبی نوشته شده‌اند. تعبیر فیزیکی فقدان بازتاب (100) چیست؟ بازتاب (100) معمولاً وقتی اتفاق می‌افتد که بازتابهای ناشی از صفحاتی که یاخته مکعبی را محصور می‌کنند با یکدیگر 2π اختلاف فاز داشته باشند. در شبکه bcc (شکل ۱۶) یک صفحه اتمی میانی، که در شکل صفحه دوم نامیده شده است، نیز وجود دارد که توان پراکندگی آن با توان پراکندگی صفحات دیگر مساوی است. از آنجا که این صفحه درست وسط صفحات دیگر قرار گرفته است، بازتاب حاصل از آن از نظر فاز به اندازه π از بازتاب صفحه اول عقبتر است، و در نتیجه سهم آن را حذف می‌کند. حذف شدن بازتاب (100) در شبکه bcc به این دلیل روی می‌دهد که صفحات اتمی از نظر ترکیب یکسان‌اند. حذف مشابهی را می‌توان به‌آسانی در ساختار hcp یافت.

عامل ساختار شبکه fcc

پایه ساختار fcc اتمهای یکسانی در 000 ، $1/2, 1/2, 0$ ، $1/2, 0, 1/2$ ، و $0, 1/2, 1/2$ نسبت به یاخته مکعبی دارد. بنابراین رابطه (۴۶) به صورت زیر درمی‌آید

$$S(v_1 v_2 v_3) = f \{ 1 + \exp[-i\pi(v_2 + v_3)] + \exp[-i\pi(v_1 + v_3)] + \exp[-i\pi(v_1 + v_2)] \} \quad (48)$$



شکل ۱۷. مقایسه بازتابهای پرتو x حاصل پودرهای KCl، KBr. در KCl تعداد الکترونها یونهای K^+ و Cl^- برابرند. دامنه‌های پراکندگی $f(K^+)$ و $f(Cl^-)$ با تقریب خوبی برابرند، در نتیجه این بلور در مقابل پرتوهای x مانند شبکه مکعبی ساده تک اتمی با ثابت شبکه $a/2$ رفتار می‌کند. شاخصهای بازتاب، برای شبکه‌ای مکعبی با ثابت شبکه a ، فقط شامل اعداد زوج اند. در KBr عامل شکل K^+ و Br^- کاملاً با یکدیگر متفاوت اند و تمامی بازتابهای شبکه fcc ظاهر می‌شوند.

اگر تمام شاخصها زوج یا فرد باشند، $S = 4f$ ؛ ولی اگر فقط یکی از شاخصها زوج باشد، دو تا از نماها مضربهای فردی از $-i\pi$ خواهند بود و $S = 0$. اگر فقط یکی از شاخصها فرد باشد، باز هم همین حالت پیش می‌آید و $S = 0$. بنابراین در شبکه fcc هیچ بازتابی که برای آن همه شاخصها فرد یا زوج باشد، رخ نمی‌دهد.

این نکته به خوبی در شکل ۱۷ نشان داده شده است: KCl و KBr هر دو دارای شبکه fcc اند ولی چون تعداد الکترونها یونهای K^+ و Cl^- مساوی اند، KCl شبیه به شبکه sc رفتار می‌کند.

عامل شکل اتمی

در عبارت (۴۶) برای عامل ساختار، کمیت f_j ظاهر می‌شود که مقیاسی است از توان پراکندگی اتم Z ام در یاختهٔ یکه. مقدار f به تعداد و توزیع الکترونهاى اتمها و همچنین به طول موج و زاویهٔ پراکندگی پرتو وابسته است. حال به محاسبهٔ کلاسیکی عامل پراکندگی می‌پردازیم.

تابش پراکنده‌شده توسط تک اتم به آثار تداخلی داخل اتم وابسته است. در (۴۲) عامل شکل را به این صورت تعریف کردیم.

$$f_j = \int dV n_j(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \quad (49)$$

انتگرال‌گیری روی غلظت الکترونی وابسته به تک اتم است. در صورتی که \mathbf{r} با \mathbf{G} زاویهٔ α بسازد، $\mathbf{G} \cdot \mathbf{r} = Gr \cos \alpha$. اگر توزیع الکترونی حول مبدأ دارای تقارن کروی باشد، آنگاه

$$\begin{aligned} f_j &\equiv \int dV n_j(r) \exp(-iGr \cos \alpha) \\ &= 2\pi \int dr r^2 d(\cos \alpha) n_j(r) \exp(-iGr \cos \alpha) \\ &= 2\pi \int dr r^2 n_j(r) \cdot \frac{e^{iGr} - e^{-iGr}}{iGr} \end{aligned}$$

که در آن روی $d(\cos \alpha)$ بین ۱ و -۱ - انتگرال‌گیری کرده‌ایم. به این ترتیب عامل شکل با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$f_j = 4\pi \int dr n_j(r) r^2 \frac{\sin Gr}{Gr} \quad (50)$$

اگر همین چگالی الکترونی کل در نقطهٔ $r = 0$ متمرکز شده بود، فقط $Gr = 0$ در انتگرالده شرکت می‌داشت. در این حد، داریم $(\sin Gr)/Gr = 1$ ، و

$$f_j = 4\pi \int dr n_j(r) r^2 = Z \quad (51)$$

که در آن Z تعداد الکترونهاى موجود در اتم است. بنابراین f عبارت است از نسبت دامنهٔ پرتو پراکنده‌شده به وسیلهٔ توزیع واقعی الکترونها در اتم، به دامنهٔ پراکنده‌شده توسط الکترونی که در یک نقطه جایگزیده است. در جهت رو به جلو $G = 0$ ، و f دوباره برابر Z می‌شود.

بنابر مشاهدات پراش پرتو x ، توزیع الکترونی کل در جامد با توزیع الکترونی در اتمهای آزاد مربوطه شباهت نزدیکی دارد. این بدان معنا نیست که توزیع خارجترین الکترونها، یعنی الکترونهاى ظرفیتی، به هنگام تشکیل جامد عوض نمی‌شود؛ بلکه فقط این مفهوم را می‌رساند که شدتهای بازتاب پرتو x را می‌توان، به کمک مقادیر عامل شکل برای اتم آزاد، به خوبی نمایش داد. این شدتها نسبت به توزیع مجدد اندک الکترونها حساس نیستند.

چکیده

• گزاره‌های گوناگون شرط براگ:

$$2d \sin \theta = n\lambda; \quad \Delta \mathbf{k} = \mathbf{G}; \quad 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = G^2$$

• شرایط لازم:

$$\mathbf{a}_1 \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi v_1; \quad \mathbf{a}_2 \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi v_2; \quad \mathbf{a}_3 \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi v_3$$

• بردارهای انتقال بسیط شبکه وارون عبارت‌اند از

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}; \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}; \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3};$$

در اینجا $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ و بردارهای انتقال بسیط شبکه بلورند.

• بردار شبکه وارون به صورت زیر است

$$\mathbf{G} = v_1 \mathbf{b}_1 + v_2 \mathbf{b}_2 + v_3 \mathbf{b}_3$$

که در آن v_1, v_2, v_3 و اعداد درست یا صفرند.

• دامنه پراکنده شده در جهت $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \Delta \mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$ با عامل ساختار هندسی زیر متناسب است:

$$S_{\mathbf{G}} \equiv \sum f_j \exp(-i\mathbf{r}_j \cdot \mathbf{G}) = \sum f_i \exp[-i2\pi(x_j v_1 + y_j v_2 + z_j v_3)]$$

که در آن z تمام s اتم پایه را اختیار می‌کند و f_j عامل شکل اتمی (۴۹) مربوط به اتم z ام پایه است. عبارت

سمت راست برای بازتاب $(v_1 v_2 v_3)$ نوشته شده است که برای آن $\mathbf{G} = v_1 \mathbf{b}_1 + v_2 \mathbf{b}_2 + v_3 \mathbf{b}_3$.

• هر تابعی که تحت تأثیر انتقال‌های \mathbf{T} آن شبکه ناوردا بماند، می‌توان برحسب رشته فوریه به صورت زیر

بسط داد

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} n_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$$

• منطقه اول بریلوئن یاخته بسیط ویگنر-سایتس در شبکه وارون است. هر موجی را که بردار موج \mathbf{k} ی

آن از مبدأ شروع و به سطح منطقه بریلوئن ختم شود، بلور پراشیده می‌کند.

• شبکه بلور منطقه اول بریلوئن

مکعبی ساده مکعب

مکعبی مرکزحجمی دوازده وجهی لوزی رخ (شکل ۱۳)

مکعبی مرکزسطحی هشت وجهی ناقص (شکل ۱۵)

مسائل

۱. فاصله بین صفحه‌ای. صفحه hkl را در شبکه بلور در نظر بگیرید. (الف) ثابت کنید بردار شبکه وارون $\mathbf{G} = hb_1 + kb_2 + lb_3$ بر این صفحه عمود است. (ب) ثابت کنید فاصله بین دو صفحه موازی و متوالی شبکه برابر است با $d(hkl) = 2\pi/|\mathbf{G}|$. (ج) نشان دهید که در شبکه مکعبی ساده $d^2 = a^2/(h^2 + k^2 + l^2)$.

۲. شبکه فضایی شش‌گوش. بردارهای انتقال بسیط شبکه فضایی شش‌گوشی را می‌توان چنین برگزید

$$\mathbf{a}_1 = (\sqrt{3}^{1/2} a/2)\hat{x} + (a/2)\hat{y}; \quad \mathbf{a}_2 = -(\sqrt{3}^{1/2} a/2)\hat{x} + (a/2)\hat{y}; \quad \mathbf{a}_3 = c\hat{z}$$

(الف) نشان دهید که حجم یاخته بسیط برابر است با $(\sqrt{3}^{1/2}/2)a^2c$.

(ب) نشان دهید که انتقالهای بسیط شبکه وارون عبارت‌اند از

$$\mathbf{b}_1 = (2\pi/\sqrt{3}^{1/2} a)\hat{x} + (2\pi/a)\hat{y}; \quad \mathbf{b}_2 = -(2\pi/\sqrt{3}^{1/2} a)\hat{x} + (2\pi/a)\hat{y}; \quad \mathbf{b}_3 = (2\pi/c)\hat{z}$$

در نتیجه این شبکه با دوران محورها، وارون خودش است.

(ج) منطقه اول بریلون شبکه فضایی شش‌گوش را توصیف و رسم کنید.

۳. حجم منطقه بریلون. نشان دهید که حجم منطقه اول بریلون برابر است با $(2\pi)^3/V_c$ ، که در آن V_c حجم یاخته بسیط بلور است. راهنمایی: حجم منطقه بریلون برابر است با حجم متوازی‌السطوح در فضای فوریه. از اتحاد برداری $(\mathbf{c} \times \mathbf{a}) \times (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = (\mathbf{c} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b})\mathbf{a}$ استفاده کنید.

۴. پهنای بیشینه پراش. در بلور خطی فرض می‌کنیم در هر نقطه $\rho_m = m\mathbf{a}$ از شبکه، که در آن m عدد درست است، مراکز پراکنده نقطه‌ای یکسانی قرار دارند. در تشابه با (2°) ، دامنه کل پرتو پراکنده شده با $F = \sum \exp[-ima \cdot \Delta \mathbf{k}]$ متناسب خواهد بود. با استفاده از رشته

$$\sum_{m=0}^{M-1} x^m = \frac{1-x^M}{1-x}$$

این مجموع روی M نقطه شبکه برابر است با

$$F = \frac{1 - \exp[-iM(\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k})]}{1 - \exp[-i(\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k})]}$$

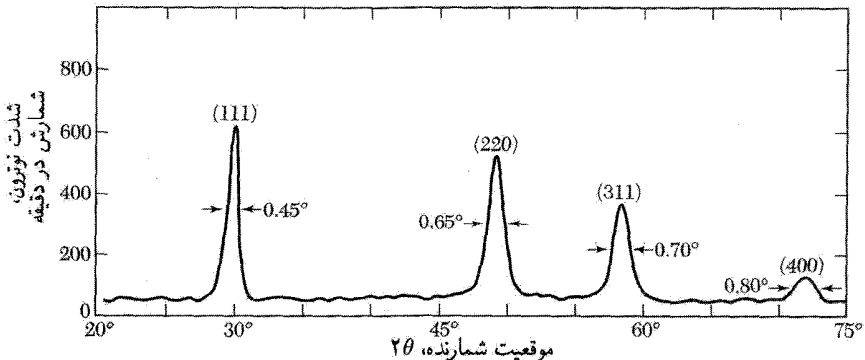
(الف) شدت پراکندگی با $|F|^2$ متناسب است. نشان دهید که

$$|F|^2 \equiv F^*F = \frac{\sin^2 \frac{1}{2}M(\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k})}{\sin^2 \frac{1}{2}(\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k})}$$

(ب) می‌دانیم هنگامی که $\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi h$ ، بیشینه پراش به وقوع می‌پیوندد. در این رابطه h عدد درست است. Δk را اندکی تغییر می‌دهیم و ϵ را در رابطه $\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi h + \epsilon$ به‌گونه‌ای تعریف می‌کنیم که مکان اولین صفر عبارت $\sin \frac{1}{M}(\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k})$ را به دست دهد. نشان دهید که $\epsilon = 2\pi/M$. بنابراین، پهنای بیشینه پراش با $1/M$ متناسب است و ممکن است برای مقادیر ماکروسکوپی M بینهایت باریک باشد. این نتیجه در مورد بلور سه‌بعدی نیز صادق است.

۵. عامل ساختار الماس. ساختار بلور الماس در فصل ۱ توضیح داده شد. اگر یاخته به گونه مکعبی قراردادی در نظر گرفته شود، پایه شامل هشت اتم خواهد بود. (الف) عامل ساختار این پایه، S ، را پیدا کنید. (ب) صف‌های S را بیابید و نشان دهید که در بازتابهای مجاز ساختار الماسی یا تمام شاخصها زوج‌اند و رابطه $v_1 + v_2 + v_3 = 4n$ که در آن n هر عدد درستی است، برآورده می‌شود یا تمام شاخصها فردند (شکل ۱۸). (توجه کنید که h, k, l را می‌توان به جای v_1, v_2, v_3 نوشت و این عمل اغلب انجام می‌شود).
۶. عامل شکل هیدروژن اتمی. چگالی تعداد الکترونها در اتم هیدروژن در حالت پایه به صورت $n(r) = (\pi a_0^3)^{-1} \exp(-2r/a_0)$ نشان داده می‌شود، که در آن a_0 شعاع بور است. نشان دهید که عامل شکل به صورت $f_G = 16/(4 + G^2 a_0^2)^2$ است.

۷. خط دواتمی. خطی از اتمها را به صورت $ABAB \cdot AB$ در نظر بگیرید. طول پیوند $A - B$ برابر $\frac{1}{2}a$ است. عامل شکل اتمهای A و B ، به ترتیب عبارت‌اند از f_A و f_B . باریکه پرتو x فرودی بر خط اتمها عمود است. (الف) نشان دهید که شرط تداخل به صورت $n\lambda = a \cos \theta$ است که در آن θ زاویه بین باریکه پراشیده و خط اتمهاست. (ب) نشان دهید که شدت باریکه پراشیده برای n های فرد با $|f_A - f_B|^2$ و برای n های زوج با $|f_A + f_B|^2$ متناسب است. (ب) توضیح دهید که اگر $f_A = f_B$ ، چه اتفاقی روی می‌دهد.

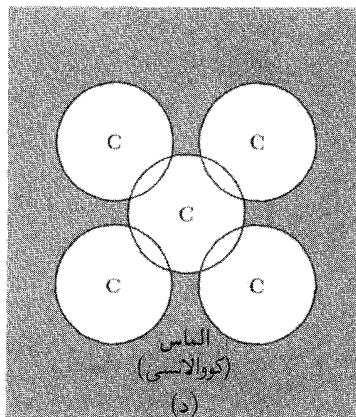
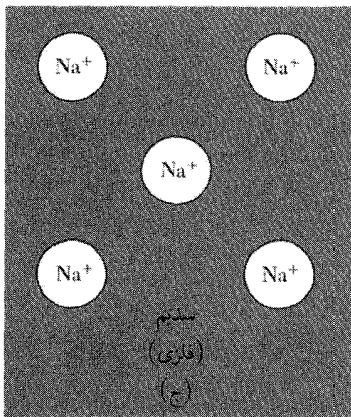
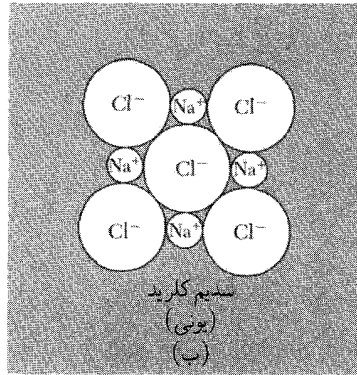
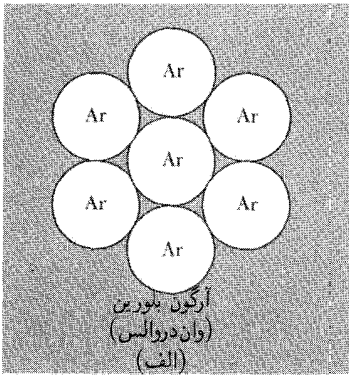


شکل ۱۸. نقش پراش نوترونی برای الماس پودر شده.

بستگی بلور و ثابتهای کشسانی

در این فصل به این سؤال می‌پردازیم که چه چیز بلور را کنار هم نگه می‌دارد؟ برهم‌کنش الکتروستاتیکی جاذب بین بارهای منفی الکترونها و بارهای مثبت هسته‌ها مسئولیت کامل چسبندگی جامدها را بر عهده دارد. نیروهای مغناطیسی تنها اثرضعیفی بر چسبندگی دارند و نیروهای گرانشی چشم‌پوشیدنی‌اند. عبارتهای اختصاصی زیر وضعیتهای متمایز را دسته‌بندی می‌کنند: انرژی تبادل، نیروهای وان‌دروالس و پیوندهای کووالانسی. در تحلیل نهایی نتیجه می‌شود که تفاوت‌های مشاهده‌شده بین شکل‌های ماده چگال، از اختلاف در توزیع خارجی‌ترین الکترونها و مغزهای یونی سرچشمه می‌گیرد (شکل ۱).

انرژی چسبندگی بلور بنا به تعریف برابر است با انرژی که باید به بلور افزود تا اجزاء آن را به صورت اتمهای آزاد خنثای در حال سکون با پیکربندی الکترونی یکسان و به فاصله نامتناهی از یکدیگر درآورد. عبارت انرژی شبکه در بحث بلورهای یونی به‌کار می‌رود. این انرژی بنا به تعریف برابر است با انرژی که باید به بلور افزوده شود تا یونهای سازنده آن به صورت یونهای آزاد در حال سکون به فاصله نامتناهی از یکدیگر درآیند.



شکل ۱. انواع اصلی بستگیهای بلورین. در (الف) نیروهای وان دروالس اتمهای خنثی با پوسته‌های الکترونی بسته را به طور ضعیفی به یکدیگر مقید می‌کنند. این نیروها از افت و خیز توزیعهای بار ناشی می‌شوند. در (ب) الکترونهای اتمهای قلیایی به اتمهای هالوژن انتقال می‌یابند، و نیروهای الکتروستاتیکی جاذب بین یونهای مثبت و منفی، یونهای حاصل را کنار یکدیگر نگه می‌دارند. در (ج) الکترونهای ظرفیتی از اتمهای قلیایی جدا می‌شوند و دریای الکترونی جمعی تشکیل می‌دهند که یونهای مثبت در آن پخش شده‌اند. در (د) اتمهای خنثی را بخشهای همپوشان توزیعهای الکترونی‌شان به یکدیگر مقید می‌کنند.

مقدار انرژی چسبندگی عناصر بلور در جدول ۱ داده شده است. به تفاوت زیاد در انرژی چسبندگی بین ستونهای مختلف جدول دوره‌ای توجه کنید. بلورهای گازهای بی‌اثر به طور ضعیفی مقیدند، و انرژی چسبندگی آنها کمتر از چند درصد انرژیهای چسبندگی عناصر ستون C، Si، Ge، و... است. مقدار انرژی چسبندگی بلورهای فلزهای قلیایی، متوسط است. فلزهای عناصر واسطه (در ستونهای میانی) قویاً مقیدند. دماهای ذوب (جدول ۲) و مدولهای حجمی (جدول ۳) تقریباً به گونه‌ای انرژیهای چسبندگی تغییر می‌کنند.

جدول ۱. انرژیهای چسبندگی

انرژی لازم برای تشکیل امهای مجرای خشتی، در حالت الکترونی پایه از جامدی در °K و در atm^۱.

Li	Be	Na	Mg	K	Ca	Sr	Rb	Cs	Ba	Ra	Fr	B	C	N	O	F	Ne											
158.	320.	107	145	90.1	178.	166.	82.2	77.6	183.	160.	166.	561	711.	474.	251.	81.0	1.92											
1.63	3.32	1.113	1.51	0.934	1.84	1.72	0.852	0.804	1.90	1.66	1.66	5.81	7.37	4.92	2.60	0.84	0.020											
37.7	76.5	25.67	34.7	21.54	42.5	39.7	19.64	18.54	43.7	38.2	38.2	134	170.	113.4	60.03	19.37	0.46											
Al	Si	P	S	Cl	Ar	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	Al	Si	P	S	Cl	Ar											
327	446	331	275	135	7.74	271	372.	285.3	237	118.	11.2	327	446	331	275	135	7.74											
3.39	4.63	3.43	2.85	1.40	0.080	2.81	3.85	2.96	2.46	1.22	0.116	3.39	4.63	3.43	2.85	1.40	0.080											
78.1	106.7	79.16	65.75	32.2	1.85	64.8	88.8	68.2	56.7	28.18	2.68	78.1	106.7	79.16	65.75	32.2	1.85											
Zn	Cu	Ni	Co	Fe	Mn	Cr	V	Ti	Sc	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Au	Hg	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
130	336	428	424	413	282	395	512	468	376	422.	603.	730.	658	661.	650.	554.	376.	284.	368.	65.	112.	243.	303.	265.	211	107.	15.9	
1.35	3.49	4.44	4.39	4.44	2.92	4.10	5.31	4.85	3.90	4.37	6.25	7.57	6.82	6.85	6.74	5.75	3.89	2.95	3.81	0.67	1.16	2.52	3.14	2.75	2.19	1.11	0.16	
31.04	80.4	102.4	101.3	98.7	67.4	94.5	122.4	111.8	89.9	100.8	144.2	174.5	157.2	158.	155.4	132.5	89.8	68.0	68.0	15.5	26.73	58.1	72.4	63.4	50.34	25.62	3.80	
Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Lu	Lu	Lu	Lu	Lu	Lu	
196	210	144	144	19.5	160.	410	410	417.	357.	328.	206.	179.	206.	400.	391.	294.	302.	317.	233.	154.	428.	428.	428.	428.	428.	428.	428.	
1.88	2.03	1.50	1.50	0.202	1.66	4.25	4.25	4.32	3.70	3.40	2.14	1.86	2.14	4.14	4.05	3.04	3.14	3.29	2.42	1.60	4.43	4.43	4.43	4.43	4.43	4.43	4.43	4.43
43.4	46.78	34.5	34.5	4.66	38.2	98.	98.	99.7	85.3	78.5	49.3	42.8	49.3	95.5	93.4	70.2	72.3	75.8	55.8	37.1	102.2	102.2	102.2	102.2	102.2	102.2	102.2	102.2

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
417.	357.	328.	206.	179.	206.	400.	391.	294.	302.	317.	233.	154.	428.
4.32	3.70	3.40	2.14	1.86	2.14	4.14	4.05	3.04	3.14	3.29	2.42	1.60	4.43
99.7	85.3	78.5	49.3	42.8	49.3	95.5	93.4	70.2	72.3	75.8	55.8	37.1	102.2

kJ/mol
eV/atom
kcal/mol

Li	453.7	Be	1562																		B	2365	C		N	63.15	O	54.36	F	53.48	Ne	24.56																	
Na	371.0	Mg	922																		Al	933.5	Si	1687	P	317 r 863	S	388.4	Cl	172.2	Ar	83.81																	
K	336.3	Ca	1113	Sc	1814	Ti	1946	V	2202	Cr	2133	Mn	1520	Fe	1811	Co	1770	Ni	1728	Cu	1358	Zn	692.7	Ga	302.9	Ge	1211	As	1089	Se	494	Br	265.9	Kr	115.8														
Rb	312.6	Sr	1042	Y	1801	Zr	2128	Nb	2750	Mo	2895	Tc	2477	Ru	2527	Rh	2236	Pd	1827	Ag	1235	Cd	594.3	In	429.8	Sn	505.1	Sb	903.9	Te	722.7	I	386.7	Xe	161.4														
Cs	301.6	Ba	1002	La	1194	Hf	2504	Ta	3293	W	3695	Re	3459	Os	3306	Ir	2720	Pt	2045	Au	1338	Hg	234.3	Tl	577	Pb	600.7	Bi	544.6	Po	527	At		Rn															
Fr		Ra	973	Ac	1324																																												
																		Ce	1072	Pr	1205	Nd	1290	Pm		Sm	1346	Eu	1091	Gd	1587	Tb	1632	Dy	1684	Ho	1745	Er	1797	Tm	1820	Yb	1098	Lu	1938				
																		Th	2031	Pa	1848	U	1406	Np	910	Pu	913	Am	1449	Cm	1613	Bk	1562	Cf		Es		Fm		Md		No		Lw					

جدول ۴. ویژگیهای بلورهای گاز بی اثر
(برونیاپی شده به صفر کلویین و فشار صفر)

پارامترهای پتانسیل لِنارد جونز، معادله ۱۰		پتانسیل یونش اتم آزاد، eV		انرژی چسبندگی تجربی		فاصله تا همسایه اول برحسب Å	
ϵ برحسب σ برحسب Å	10^{-16} erg	K	eV	kJ/mol	eV/atom	Å	Å
۲,۵۶	۱۴	۲۴,۵۸			(مایع در فشار صفر)		He
۲,۷۴	۵۰	۲۱,۵۶	۲۴,۵۶	۰,۰۲	۱,۸۸	۳,۱۳	Ne
۳,۴۰	۱۶۷	۱۵,۷۶	۸۳,۸۱	۰,۰۸۰	۷,۷۴	۳,۷۶	Ar
۳,۶۵	۲۲۵	۱۴,۰۰	۱۱۵,۸	۰,۱۱۶	۱۱,۲	۴,۰۱	Kr
۳,۹۸	۳۲۰	۱۲,۱۳	۱۶۱,۴	۰,۱۷	۱۶,۰	۴,۳۵	Xe

بلورهای گازهای بی اثر

گازهای بی اثر ساده‌ترین بلورها را تشکیل می‌دهند. توزیع الکترونی در آنها شباهت زیادی به توزیع الکترونها در اتمهای آزاد دارد. ویژگیهایشان در صفر مطلق در جدول ۴ خلاصه شده‌اند. این بلورها عایقهای شفاف‌اند، به‌طور ضعیفی مقیدند، و دمای ذوبشان پایین است. اتمها انرژی یونش بالایی دارند (جدول ۵ را ببینید). خارجی‌ترین پوسته الکترونی این اتمها کاملاً پر است، و توزیع بار الکترونی در اتم آزاد دارای تقارن کروی است. اتمهای گاز بی اثر، در بلور تا حد امکان نزدیک به یکدیگر انباشته می‌شوند^۱: ساختار این بلورها، جملگی، بجز He^3 و He^4 ، تنگ‌چین مکعبی (fcc) است (شکل ۲).

چه چیز اتمهای بلور گاز بی اثر را کنار هم نگه می‌دارد؟ توزیع الکترونی در بلور در مقایسه با توزیع الکترونی اطراف اتم آزاد، واپیچش قابل ملاحظه‌ای ندارد، زیرا انرژی چندانی برای واپیچاندن توزیع الکترونی اتم آزاد در دسترس نیست. انرژی چسبندگی اتم در این بلورها تنها یک درصد انرژی یونش الکترون اتمی یا کمتر از آن است. بخشی از واپیچش توزیع بار، برهم‌کنش وان‌دروالس را می‌دهد.

۱. حرکت نقطه صفر اتمها (انرژی جنبشی در صفر مطلق) یک اثر کوانتومی است که در He^2 و He^3 نقش برتر را بر عهده دارد. He^2 و He^3 در فشار صفر، حتی در دمای صفر مطلق نیز جامد نمی‌شوند. میانگین افت‌وخیز اتم He از مکان تعادلش، در K حدود ۳۰ تا ۴۰ درصد فاصله تا همسایه اول است. هرچه اتم سنگینتر باشد، اهمیت آثار نقطه صفر کمتر است. اگر از حرکت نقطه صفر صرف‌نظر شود، حجم مولی هلیوم جامد برابر ۹ سانتی‌متر مکعب بر مول محاسبه می‌شود، در حالی که مقادیر حجم مولی مشاهده‌شده برای He^2 مایع و He^3 مایع، به‌ترتیب، برابرند با $27.5 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ و $36.8 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$.

H	13.996
Li	5.39 9.32
Be	81.01 27.53
Na	5.14 7.64
Mg	52.43 22.67

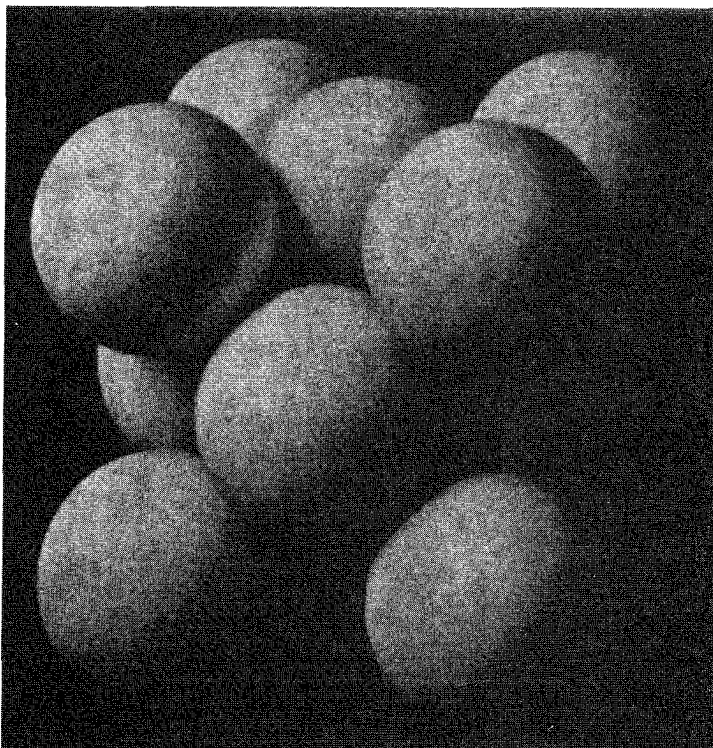
جدول ۵. انرژیهای یونش

انرژی کلی لازم برای جدا کردن دو الکترون اول با مجموع پتانسیلهای یونش اول و دوم برابر است.

He	24.59	78.98
Ne	21.56	52.63
F	17.42	33.45
O	13.61	33.45
N	14.54	33.45
C	11.26	33.45
B	8.30	33.45
Ar	15.76	38.56
Cl	13.01	38.56
S	10.36	38.56
P	10.88	38.56
Si	8.15	38.56
Al	5.98	38.56
Kr	14.00	38.56
Br	11.84	38.56
Se	9.75	38.56
As	9.81	38.56
Ge	7.85	38.56
Ga	6.00	38.56
Zn	9.39	38.56
Cu	7.72	38.56
Ni	7.63	38.56
Co	7.86	38.56
Fe	7.90	38.56
Mn	7.43	38.56
Cr	6.76	38.56
V	6.74	38.56
Ti	6.83	38.56
Sc	6.56	38.56
Ca	6.11	38.56
K	4.34	38.56
Sr	5.49	38.56
Rb	3.17	38.56
Xe	12.13	38.56
I	10.45	38.56
Te	9.01	38.56
Sb	8.64	38.56
Sn	7.34	38.56
In	5.78	38.56
Cd	8.99	38.56
Ag	7.57	38.56
Pd	8.33	38.56
Rh	7.46	38.56
Ru	7.36	38.56
Tc	7.28	38.56
Zr	6.98	38.56
Y	5.5	38.56
Ba	5.21	38.56
Cs	29.0	38.56
Rn	10.74	38.56
At	8.43	38.56
Po	7.29	38.56
Bi	7.41	38.56
Pb	6.11	38.56
Tl	26.53	38.56
Hg	10.43	38.56
Au	9.22	38.56
Pt	8.96	38.56
Ir	9	38.56
Os	8.7	38.56
Re	7.87	38.56
W	7.98	38.56
Ta	7.86	38.56
Hf	7	38.56
La	5.61	38.56
Fr	15.42	38.56
Ac	6.9	38.56

انرژی جدا کردن یک الکترون بر حسب eV
 انرژی جدا کردن دو الکترون بر حسب eV

Ce	6.91	5.76	6.31	5.6	5.67	6.15	5.74	5.82
Pr								
Nd								
Pm								
Sm								
Eu								
Gd								
Tb								
Dy								
Ho								
Er								
Tm								
Yb								
Lu								
Th								
Pa								
U								
Np								
Pu								
Am								
Cm								
Bk								
Cf								
Es								
Fm								
Md								
No								
Lr								

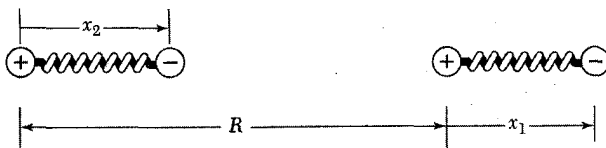


شکل ۲. ساختار بلوری تنگ‌چین مکعبی (fcc) گازهای بی‌اثر Ar, Ne, Kr, Xe. پارامترهای شبکه‌ی یاخته‌های مکعبی در ۴K به ترتیب، برابرند با ۴۰۴، ۳۱۵، ۶۴۵، و ۱۳۶ آنگستروم.

برهم‌کنش وان دروالس-لندن

دو اتم یکسان گاز بی‌اثر را به فاصله R از یکدیگر در نظر بگیرید. R را در مقایسه با شعاع این اتمها بزرگ بگیرید. چه برهم‌کنشهایی بین این دو اتم خنثی وجود دارد؟ اگر توزیع بار اتمها صلب بود، برهم‌کنش بین آنها صفر می‌شد، زیرا در خارج اتم خنثی، پتانسیل الکتروستاتیکی توزیع کروی بار الکترونی با پتانسیل الکتروستاتیکی بار هسته حذف می‌شود. در نتیجه اتمهای گاز بی‌اثر نمی‌توانستند هیچ چسبندگی از خود نشان دهند، و نمی‌توانستند چگالیده شوند. ولی اتمها در یکدیگر گشتاور دو قطبی القا می‌کنند، و گشتاورهای القاشده بین اتمها برهم‌کنش جاذب به وجود می‌آورند.

به عنوان مدل، دو نوسانگر هماهنگ خطی یکسان ۱ و ۲ را به فاصله R از یکدیگر در نظر می‌گیریم. همان‌گونه که در شکل ۳ نشان داده شده است، هر نوسانگر بارهای $\pm e$ را که، به ترتیب، به فاصله x_1 و x_2 از یکدیگر قرار دارند، در بر دارد. ذرات در امتداد محور x نوسان می‌کنند. p_1 و



شکل ۳. مختصات دو نوسانگر.

p_2 تکانه‌ها را مشخص می‌کنند. ثابت نیرو C است. هامیلتونی دستگاه بدون اختلال عبارت است از

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2m} p_1^2 + \frac{1}{2} C x_1^2 + \frac{1}{2m} p_2^2 + \frac{1}{2} C x_2^2 \quad (1)$$

فرض می‌شود هر یک از نوسانگرهای جفت‌نشده دارای بسامد ω مربوط به قویترین خط جذب اپتیکی اتم باشد. بنابراین $C = m\omega_0^2$.

فرض کنید \mathcal{H}_1 انرژی برهم‌کنش کولنی دو نوسانگر باشد. نمایش هندسی در شکل داده شده است. مختصه بین هسته‌ای R است. در این صورت داریم

$$\mathcal{H}_1 = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{R + x_1 - x_2} - \frac{e^2}{R + x_1} - \frac{e^2}{R - x_2} \quad (2)$$

رابطه (۲) را با تقریب $|x_1|, |x_2| \ll R$ بسط می‌دهیم و در پایینترین مرتبه به دست می‌آوریم:

$$\mathcal{H}_1 \cong -\frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3} \quad (3)$$

با استفاده از تقریب (۳) برای \mathcal{H}_1 ، هامیلتونی کل را می‌توان با تبدیل مد بهنجار زیر قطری کرد:

$$x_s \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2); \quad x_a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2) \quad (4)$$

یا، با محاسبه x_1, x_2

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_s + x_a); \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_s - x_a) \quad (5)$$

شاخصهای پایین s و a ، به ترتیب، مدهای متقارن و پادمقارن حرکت را مشخص می‌کنند. علاوه بر آن، تکانه‌های p_s و p_a وابسته به این دو مد را داریم:

$$p_1 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(p_s + p_a); \quad p_2 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(p_s - p_a) \quad (6)$$

هامیلتونی کل $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$ ، پس از تبدیلیهای (۵) و (۶) به صورت زیر درمی آید

$$\mathcal{H} = \left[\frac{1}{2m} p_s^2 + \frac{1}{2} \left(C - \frac{2e^2}{R^3} \right) x_s^2 \right] + \left[\frac{1}{2m} p_a^2 + \frac{1}{2} \left(C + \frac{2e^2}{R^3} \right) x_a^2 \right] \quad (7)$$

با واریسی رابطه (۷) درمی یابیم که دو بسامد نوسانگرهای جفت شده برابرند با

$$\omega = \left[\left(C \pm \frac{2e^2}{R^3} \right) / m \right]^{1/2} = \omega_0 \left[1 \pm \frac{1}{2} \left(\frac{2e^2}{CR^3} \right) - \frac{1}{8} \left(\frac{2e^2}{CR^3} \right)^2 + \dots \right] \quad (8)$$

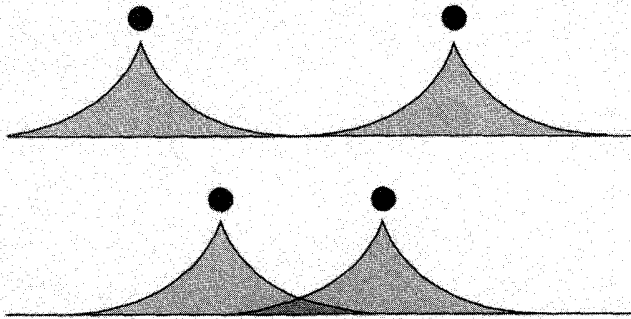
که در آن ω_0 برابر $(C/m)^{1/2}$ است. در معادله (۸) ریشه دوم را بسط داده ایم. انرژی نقطه صفر دستگاه برابر $1/2 \hbar (\omega_s + \omega_a)$ است؛ این مجموع، به دلیل برهم کنش، از مقدار جفت نشده $2 \times \frac{1}{2} \hbar \omega_0$ به اندازه

$$\Delta U = \frac{1}{2} \hbar (\Delta \omega_s + \Delta \omega_a) = -\hbar \omega_0 \times \frac{1}{8} \left(\frac{2e^2}{CR^3} \right)^2 = -\frac{A}{R^6} \quad (9)$$

کمتر شده است. این برهم کنش جاذب با عکس توان ششم فاصله دو نوسانگر تغییر می کند. این برهم کنش، برهم کنش وان دروالس نام دارد، که به برهم کنش لندن، یا برهم کنش دوقطبی-دوقطبی القایی نیز مشهور است. این برهم کنش، برهم کنش جاذب اصلی در بلورهای گازهای بی اثر و نیز در بلورهای بسیاری از مولکولهای آلی است. این برهم کنش یک اثر کوانتومی است، به این معنا که اگر $\hbar \rightarrow 0$ آنگاه $\Delta U \rightarrow 0$. به این ترتیب، انرژی نقطه صفر دستگاه در اثر جفت شدگی دوقطبی-دوقطبی معادله (۳) کاهش می یابد. موجودیت برهم کنش وان دروالس به همپوشانی چگالیهایی بار دو اتم وابسته نیست. مقدار تقریبی ثابت A در رابطه (۹) برای اتمهای همانند با $\hbar \omega_0 \alpha^2$ داده می شود، که در آن $\hbar \omega_0$ انرژی قویترین خط جذب اپتیکی و α قطبش پذیری الکترونی است (فصل ۱۵).

برهم کنش دفعی

هنگامی که دو اتم به یکدیگر نزدیک شوند، توزیعهای بارشان به تدریج همپوشی می کنند (شکل ۴)، در نتیجه انرژی الکتروستاتیکی دستگاه تغییر می کند. در فاصله های به اندازه کافی نزدیک، انرژی همپوشانی، عمدتاً به دلیل اصل طرد پائولی، دفعی است. گزاره بنیادی این اصل آن است که اعداد کوانتومی دو الکترون نمی توانند جملگی یکسان باشند. وقتی توزیعهای بار دو اتم همپوشی کنند، الکترونهاي اتم B به اشغال بخشی از حالت های اتم A تمایل دارند که پیش از آن الکترونهاي خود اتم A اشغال کرده اند و برعکس. اصل طرد پائولی از اشغال چندگانه جلوگیری می کند، و توزیعهای الکترونی اتمهای با پوسته های بسته تنها در صورتی می توانند همپوشانی کنند که با ارتقای بخشی از الکترونها به حالت های اشغال نشده با انرژی



شکل ۴. با نزدیک شدن آنها به یکدیگر، توزیعیهای بار الکترونی همپوشانی می‌کنند. دایره‌های توپر هسته‌ها را نمایش می‌دهند.

بالای آنها همراه باشند. بنابراین همپوشانی الکترونی، انرژی کل دستگاه را افزایش می‌دهد و یک سهم دفعی در برهم‌کنش ایجاد می‌کند. یک مثال فرین که در آن همپوشانی، کامل است در شکل ۵ نشان داده شده است.

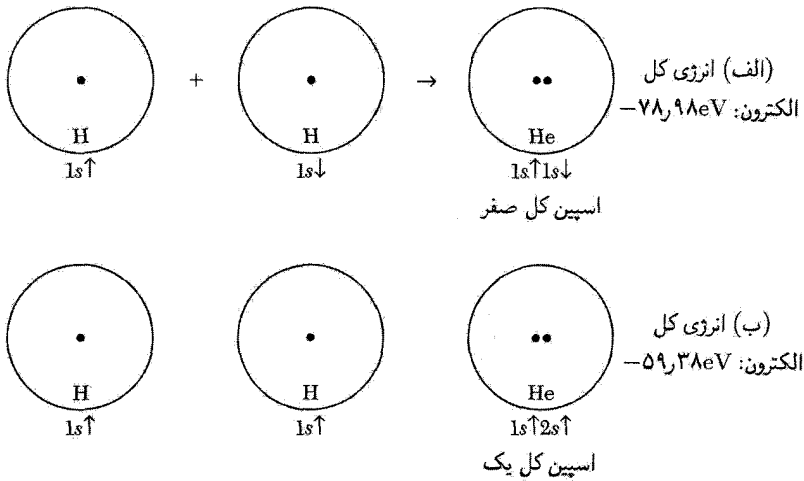
در اینجا کوشش نمی‌کنیم برهم‌کنش دفعی^۱ را با استفاده از اصول اولیه محاسبه کنیم. داده‌های تجربی مربوط به گازهای بی‌اثر را می‌توان با ترکیبی از یک پتانسیل دفعی تجربی به شکل B/R^{12} ، که در آن B ثابت مثبت است، و یک پتانسیل جاذب بلندبرد به شکل رابطه (۹) برازش داد. ثابتهای A و B پارامترهای تجربی‌اند که به کمک اندازه‌گیریهای مستقلی که در فاز گازی صورت می‌گیرد، تعیین می‌شوند؛ داده‌های به‌کار برده شده شامل ضرایب ویریل و چسبندگی‌اند. متداول است انرژی پتانسیل کل دو اتم به فاصله R را به صورت زیر بنویسند

$$U(R) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right] \quad (10)$$

که در آن ϵ و σ پارامترهای جدیدند، با $4\epsilon\sigma^6 = A$ و $4\epsilon\sigma^{12} = B$. پتانسیل رابطه (۱۰) به نام پتانسیل لئارد-جونز مشهور است (شکل ۶). نیروی بین دو اتم با $-dU/dR$ داده می‌شود. مقدارهای ϵ و σ را، که در جدول ۴ داده شده‌اند، می‌توان از داده‌های فاز گازی به دست آورد. در نتیجه محاسبه ویژگیهای جامد حاوی هیچ پارامتر قابل حذفی نیست.

دیگر شکلهای تجربی برهم‌کنش دفعی به‌طور گسترده‌ای به‌کار برده شده‌اند، به‌ویژه شکل نمایی

۱. انرژی همپوشانی طبیعتاً به توزیع شعاعی بار در اطراف هر اتم بستگی دارد. حتی اگر توزیع بار معلوم باشد نیز همواره محاسبات ریاضی پیچیده است.



شکل ۵. اثر پاؤلی بر انرژی دفعی: در یک مثال فرین، دو اتم هیدروژن آن قدر به یکدیگر فشرده می‌شوند که دو پروتون تقریباً در تماس با هم قرار می‌گیرند. انرژی دستگاه الکترونی تنها را می‌توان از مشاهدات مربوط به He اتمی که دو الکترون دارد، به دست آورد. در (الف) الکترون‌ها اسپین‌های پاد موازی دارند و اصل پاؤلی هیچ تأثیری بر آنها ندارد: الکترون‌ها با انرژی -78.98eV مقید شده‌اند. در (ب) اسپین‌ها موازی‌اند: اصل پاؤلی یکی از الکترون‌ها را به ارتقا از اوربیتال $1s \uparrow$ هیدروژن به اوربیتال $2s \uparrow$ هلیم وامی‌دارد. در این حالت الکترون‌ها با انرژی -59.38eV مقید می‌شوند که به اندازه 19.60eV کمتر از (الف) است. اصل پاؤلی انرژی دفعی را به این اندازه افزایش داده است. از انرژی دفعی کولنی دو پروتون که در هر دو حالت (الف) و (ب) یکسان است، چشم‌پوشی کرده‌ایم.

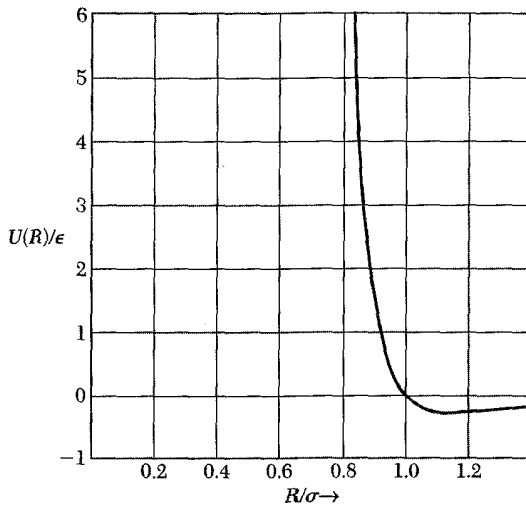
$\lambda \exp(-R/\rho)$ ، که در آن ρ مقیاسی از برد برهم‌کنش است. کاربرد تحلیلی این برهم‌کنش معمولاً به آسانی کاربرد قانون توان معکوس است.

ثابت‌های تعادلی شبکه

اگر از انرژی جنبشی اتم‌های گاز بی‌اثر چشم‌پوشی شود، انرژی چسبندگی بلورگازی اثر برابر مجموع پتانسیل ندارد. جونز رابطه (10) روی تمامی زوج اتم‌های بلور خواهد بود. در صورتی که N اتم در بلور موجود باشد، انرژی پتانسیل کل به صورت زیر درمی‌آید

$$U_{\text{کل}} = \frac{1}{4} N(\epsilon) \left[\sum_j' \left(\frac{\sigma}{p_{ij}R} \right)^{12} - \sum_j' \left(\frac{\sigma}{p_{ij}R} \right)^6 \right] \quad (11)$$

در این رابطه $p_{ij}R$ فاصله بین اتم مرجع i و هر اتم دیگر j است که برحسب فاصله تا همسایه اول R بیان شده است. ضریب $\frac{1}{4}$ در جلوی N ، برای اجتناب از دوباره‌شماری هر زوج اتم قرار داده شده است.



شکل ۶. شکل پتانسیل لِنارد-جونز، معادله (۱۰)، که برهم‌کنش دو اتم گاز بی‌اثر را بیان می‌کند. کمینه در $R/\sigma = 2^{1/6} \cong 1.12$ رخ می‌دهد. به تندی منحنی در داخل کمینه، و تختی آن در خارج توجه کنید. مقدار U در کمینه برابر $-\epsilon$ است و در $R = \sigma$ داریم $U = 0$.

مجموعیابیهای (۱۱) محاسبه شده‌اند، و برای ساختار fcc برابرند با

$$\sum_j p_{ij}^{-12} = 12,13188; \quad \sum_j p_{ij}^{-6} = 14,45392 \quad (12)$$

در ساختار fcc ۱۲ جایگاه همسایه اول وجود دارد؛ می‌بینیم که رشته‌ها به سرعت همگرا می‌شوند و مقدارهایشان چندان متفاوت از ۱۲ نیست. همسایه‌های اول بیشترین سهم را در انرژی برهم‌کنش بلورهای گاز بی‌اثر دارند. مجموعهای متناظر برای ساختار hcp برابرند با ۱۲,۱۳۲۲۹ و ۱۴,۴۵۴۸۹.

اگر U کل در (۱۱) را برابر انرژی کل بلور بگیریم، مقدار تعادلی R_0 با کمینه کردن کل U نسبت به تغییرات فاصله تا همسایه اول R به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\frac{dU_{\text{کل}}}{dR} = 0 = -2N\epsilon \left[(12)(12,13) \frac{\sigma^{12}}{R^{13}} - (6)(14,45) \frac{\sigma^6}{R^7} \right] \quad (13)$$

در نتیجه

$$\frac{R_0}{\sigma} = 1.09 \quad (14)$$

که برای تمام عناصری که ساختار fcc دارند، یکسان است. مقادیر مشاهده‌شده R_0/σ با استفاده از

مقادیری که به طور مستقل برای σ تعیین شده و در جدول ۴ داده شده‌اند، به شرح زیرند:

	Ne	Ar	Kr	Xe
R_0/σ	۱٫۱۴	۱٫۱۱	۱٫۱۰	۱٫۰۹

سازگاری این مقادیر با رابطه (۱۴) جالب توجه است. انحراف جزئی R_0/σ را برای اتمهای سبکتر، از مقدار جهانی $۱٫۰۹$ ، که برای گازهای بی‌اثر پیش‌بینی شده است، می‌توان توسط آثار کوانتومی نقطه صفر توجیه کرد. با استفاده از اندازه‌گیریهایی مربوطه به فاز گازی، ثابت شبکه بلور را پیش‌بینی کرده‌ایم.

انرژی چسبندگی

انرژی چسبندگی بلورهای گاز بی‌اثر در صفر مطلق و در فشار صفر با جایگزینی روابط (۱۲) و (۱۴) در معادله (۱۱) به دست می‌آید:

$$U_{\text{کل}}(R) = 2N\epsilon \left[(12,13) \left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - (14,45) \left(\frac{\sigma}{R}\right)^6 \right] \quad (15)$$

و در $R = R_0$,

$$U_{\text{کل}}(R_0) = -(2,15)(4N\epsilon) \quad (16)$$

که برای همه گازهای بی‌اثر یکسان است. این انرژی چسبندگی با فرض ساکن بودن اتمها محاسبه شده است. تصحیحات مکانیک کوانتومی انرژی بستگی را برای Ne، Ar، Kr، و Xe، به ترتیب، به اندازه ۲۸، ۱۰، ۶، و ۴ درصد نسبت به معادله (۱۶) کاهش می‌دهند.

هرچه اتم سنگینتر باشد، تصحیح کوانتومی کوچکتر است. با در نظر گرفتن مدلی ساده که در آن اتم درون مرزهای ثابتی محبوس شده است، می‌توان منشأ تصحیح کوانتومی را درک کرد. اگر ذره دارای طول موج کوانتومی λ ، که مرزها آن را تعیین می‌کنند، باشد، آنگاه با استفاده از رابطه دوبروی، $p = h/\lambda$ ، رابطه بین تکانه و طول موج ذره، انرژی جنبشی آن برابر $p^2/2M = (h/\lambda)^2/2M$ خواهد بود. در این مدل تصحیح کوانتومی نقطه صفر انرژی به طور معکوس با جرم متناسب است. انرژیهای چسبندگی محاسبه‌شده نهایی با مقادیر تجربی جدول ۴ از ۱ تا ۷ تفاوت دارند.

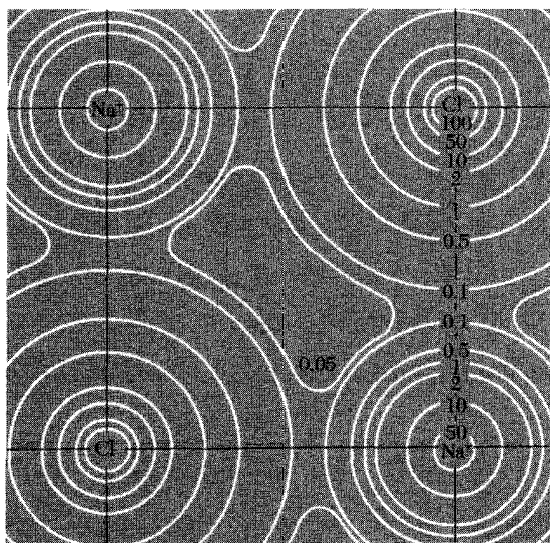
یک پیامد انرژی جنبشی کوانتومی آن است که مشاهده می‌شود ثابت شبکه بلور ایزوتوپ Ne^{20} از ثابت شبکه بلور Ne^{22} بزرگتر است. بالاتر بودن انرژی جنبشی کوانتومی ایزوتوپ سبکتر، شبکه‌اش را منبسط می‌کند، زیرا انرژی جنبشی در اثر انبساط کاهش می‌یابد. ثابتهای شبکه مشاهده‌شده (با برونمایی از ۲٫۵K به صفر مطلق) برای Ne^{20} و Ne^{22} ، به ترتیب، برابرند با $4,4644\text{\AA}$ و $4,4559\text{\AA}$.

بلورهای یونی

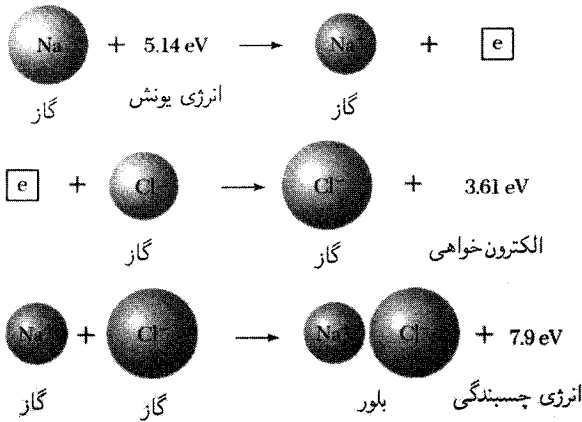
بلورهای یونی و یونهای مثبت و منفی ساخته شده‌اند. پیوند یونی از برهم‌کنش الکتروستاتیکی یونهای با بار مخالف نتیجه می‌شود. دو نوع ساختار بلوری متداولی که برای بلورهای یونی یافت می‌شوند عبارت‌اند از ساختارهای سدیم‌کلرید و سزیم‌کلرید که در فصل ۱ نشان داده شدند.

پیکربندیهای الکترونی تمامی یونهای بلور یونی ساده، مانند اتمهای گازهای بی‌اثر، به صورت پوسته‌های الکترونی بسته‌اند. بر طبق جدول دوره‌ای در آغاز این کتاب، پیکربندی اتمهای خنثی در لیتیم‌فلورید به صورت $\text{Li} : 1s^2 2s$ و $\text{F} : 1s^2 2s^2 2p^5$ است. یونهای یک بار یونیده Li^+ و F^- ، به ترتیب، مانند هلیوم و نئون، پیکربندیهای $1s^2$ و $1s^2 2s^2 2p^6$ را دارند. اتمهای گازهای بی‌اثر پوسته‌های بسته دارند و توزیعهای بارشان دارای تقارن کروی است. از این رو انتظار داریم در بلور یونی نیز توزیع بار روی هر یون تقریباً تقارن کروی داشته و واپیچش آن منحصر به نزدیکی ناحیه تماس با اتمهای همسایه باشد. مطالعات پرتو x توزیعهای الکترونی این تصویر را تأیید می‌کند (شکل ۷).

یک تخمین سریع حاکی از آن است که اگر انرژی بستگی بلور یونی را عمدتاً ناشی از برهم‌کنش الکتروستاتیکی در نظر بگیریم، گمراه نشده‌ایم. در سدیم‌کلرید بلورین فاصله بین یون مثبت و نزدیکترین یون منفی برابر است با $2.81 \times 10^{-8} \text{cm}$ ، و بخش جاذبه کولنی در انرژی پتانسیل این دو یون به تنهایی



شکل ۷. توزیع چگالی الکترونی در صفحه فاعده NaCl ، حاصل مطالعات پرتو x. اعداد روی پربندها، غلظت نسبی الکترونها را نشان می‌دهند.



شکل ۸. انرژی به ازای یک واحد مولکولی بلور سدیم کلرید به اندازه $(۷.۹ - ۵.۱ + ۳.۶) = ۶.۴ \text{ eV}$ از انرژی اتمهای مجزای خنثی پایینتر است. انرژی شبکه نسبت به یونهای مجزا برابر ۷.۹ eV به ازای یک واحد مولکولی است. در این شکل تمامی مقادیر، تجربی اند. مقادیر انرژی یونش در جدول ۵، و مقادیر الکترون خواهی در جدول ۶ داده شده‌اند.

برابر است با ۱ eV (۵). این مقدار را می‌توان با مقدار تجربی ۷.۹ eV به ازای یک واحد مولکولی، در انرژی شبکه‌ای NaCl بلورین نسبت به یونهای مجزای Na^+ و Cl^- ، مقایسه کرد (شکل ۸). حال این انرژی را با دقت بیشتری محاسبه می‌کنیم.

انرژی مادلونگ یا الکتروستاتیکی

برهم‌کنش بلندبرد بین یونهای با بار $\pm q$ به صورت برهم‌کنش الکتروستاتیکی $\pm q^2/r$ است، که بین یونهای با بار مخالف جاذب و یونهای با بار همانند دفعی است. یونها خود را در آن چنان ساختار بلورینی مرتب می‌کنند که در فواصل کوتاه قویترین برهم‌کنش جاذب سازگار را با برهم‌کنش دفعی بین مغزهای یونی داشته باشد. برهم‌کنش دفعی بین یونهایی که پیکربندی گازهایی بی‌اثر را دارند، شبیه به برهم‌کنش بین اتمهای گازهایی بی‌اثر است. بخش وان‌دروالس در برهم‌کنش جاذب بلورهای یونی سهم نسبتاً کوچکی، از مرتبه ۱ یا ۲ درصد، از انرژی چسبندگی بلورهای یونی دارد. سهم عمده انرژی بستگی بلورهای یونی الکتروستاتیکی است و انرژی مادلونگ نام دارد.

اگر U_{ij} انرژی برهم‌کنش بین یونهای i و j باشد، آنگاه U_i ، مجموع تمامی برهم‌کنشهای یون i ام، را به این صورت تعریف می‌کنیم:

$$U_i = \sum_j' U_{ij} \quad (۱۷)$$

جدول ۶. الکترون خواهی یونهای منفی

الکترون خواهی یون منفی پایدار، مثبت است.

اتم	انرژی الکترون خواهی، eV	اتم	انرژی الکترون خواهی، eV
H	۰٫۷۵۴۲	Si	۱٫۳۹
Li	۰٫۶۲	P	۰٫۷۴
C	۱٫۲۷	S	۲٫۰۸
O	۱٫۴۶	Cl	۳٫۶۱
F	۳٫۴۰	Br	۳٫۳۶
Na	۰٫۵۵	I	۳٫۰۶
Al	۰٫۴۶	K	۰٫۵۰

منبع: H. Hotop and W. C. Lineberger, J. Phys. Chem. Ref. Data 4,539 (1975)

این مجموع شامل تمام یونها بجز $j = i$ است. فرض می‌کنیم U_{ij} را بتوان به صورت مجموع یک پتانسیل دفعی میدان مرکزی به شکل $\lambda \exp(-r/\rho)$ ، که در آن λ و ρ پارامترهای تجربی‌اند، و یک پتانسیل کولنی به شکل q^2/r نوشت. بنابراین

$$U_{ij} = \lambda \exp\left(-\frac{r_{ij}}{\rho}\right) \pm \frac{q^2}{r_{ij}} \quad (18)$$

(CGS)

که در آن علامت + برای بارهای هم علامت، و علامت - برای بارهای مخالف به کار می‌رود. در SI برهم‌کنش کولنی به صورت $\pm q^2/4\pi\epsilon_0 r$ است. در این بخش واحدهای CGS را به کار می‌بریم که در آن برهم‌کنش کولنی به شکل q^2/r درمی‌آید.

جمله دفعی این واقعیت را توصیف می‌کند که هر یون در مقابل همپوشانی با توزیعهای الکترونی یونهای همسایه مقاومت می‌کند. قدرت λ و برد ρ را ثابتهایی در نظر می‌گیریم که با استفاده از مقادیر مشاهده شده ثابت شبکه و تراکم پذیری تعیین می‌شوند. در اینجا شکل نمایی پتانسیل دفعی تجربی را به جای شکل R^{-12} ، که برای گازهای بی‌اثر مورد استفاده قرار گرفت، به کار برده‌ایم. این تغییر بدان علت انجام می‌شود که ممکن است نمایش بهتری از برهم‌کنش دفعی ارائه دهد. از آنجا که برای یونها، داده‌های فازگازی در دسترس نیستند، نمی‌توان λ و ρ را به طور مستقل تعیین کرد. توجه داریم که ρ مقیاسی از برد برهم‌کنش دفعی است: هنگامی که $r = \rho$ ، برهم‌کنش دفعی به مقدار e^{-1} برابر مقدار خود در $r = 0$ کاهش می‌یابد. در ساختار NaCl، مقدار U_i به اینکه یون مرجع i مثبت باشد یا منفی بستگی ندارد. مجموع (۱۷) را می‌توان چنان مرتب کرد که به تندی همگرا شود، و در نتیجه تا جایی که جایگاه یون مرجع در مجاورت سطح

نباشد، مقدار این مجموع به جایگاه یون مرجع در بلور بستگی نخواهد داشت. با چشم‌پوشی از آثار سطح، انرژی کل کل $U_{\text{کل}}$ ، شبکه بلور حاوی N مولکول یا $2N$ یون را به صورت $U_{\text{کل}} = NU_i$ می‌نویسیم. در اینجا N به جای $2N$ ظاهر می‌شود، زیرا باید هر زوج برهم‌کنش، یا هر پیوند را، تنها یک بار به حساب آوریم. انرژی کل شبکه به صورت انرژی لازم برای تفکیک بلور به یونهای مجزا به فاصله نامتناهی از یکدیگر تعریف می‌شود. برای سهولت، باز کمیتهای p_{ij} را به صورت $r_{ij} \equiv p_{ij}R$ تعریف می‌کنیم، که در آن R فاصله تا همسایه اول در بلور است. در صورتی که برهم‌کنش دفعی را تنها بین همسایه‌های اول منظور کنیم، داریم

$$(CGS) \quad U_{ij} = \begin{cases} \lambda \exp(-R/\rho) - \frac{q^2}{R} & (\text{همسایه‌های اول}) \\ \pm \frac{1}{p_{ij}} \frac{q^2}{R} & (\text{همسایه‌های دیگر}) \end{cases} \quad (19)$$

بنابراین

$$(CGS) \quad U_{\text{کل}} = NU_i = N \left(z\lambda e^{-R/\rho} - \frac{\sigma q^2}{R} \right) \quad (20)$$

که در آن z برابر تعداد همسایگان اول هر یون است و

$$\alpha \equiv \sum_j \frac{(\pm)}{p_{ij}} \equiv \text{ثابت مادلونگ} \quad (21)$$

این مجموع باید شامل سهم همسایگان اول باشد که درست برابر z است. درباره علامت (\pm) ، قبل از (۲۵) بحث خواهیم کرد. مقدار ثابت مادلونگ در نظریه بلور یونی از اهمیت خاصی برخوردار است، و روشهای محاسبه‌اش در ادامه مطرح خواهد شد.

در فاصله تعادلی، $dU_{\text{کل}}/dR = 0$ ، در نتیجه

$$(CGS) \quad N \frac{dU_i}{dR} = -\frac{Nz\lambda}{\rho} \exp(-R/\rho) + \frac{N \alpha q^2}{R^2} = 0 \quad (22)$$

یا

$$(CGS) \quad R_0^2 \exp(-R_0/\rho) = \rho \alpha q^2 / z\lambda \quad (23)$$

اگر پارامترهای ρ و λ برهم‌کنش دفعی معلوم باشند، این رابطه فاصله تعادلی R_0 را تعیین می‌کند. در SI به جای q^2 جمله $q^2/4\pi\epsilon_0$ را قرار می‌دهیم.

برای بلوری حاوی $2N$ یون در فاصله تعادلی R_0 ، انرژی کل شبکه را می‌توان با استفاده از (20) و (23) به صورت زیر نوشت

$$(CGS) \quad U_{کل} = -\frac{N\alpha q^2}{R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0} \right) \quad (24)$$

جمله $-N\alpha q^2/R_0$ انرژی مادلونگ است. ρ را از مرتبه R_0 خواهیم یافت، در نتیجه برهم‌کنش دفعی، برد بسیار کوتاهی دارد.

برآورد ثابت مادلونگ

نخستین محاسبه ثابت انرژی کولنی، α ، را مادلونگ انجام داد. او االد روش عام توانمندی برای محاسبه مجموعهای شبکه‌ای به دست آورد که در پیوست ب ارائه شده است. امروزه رایانه این محاسبات را انجام می‌دهد. ثابت مادلونگ، α ، را رابطه (21) چنین تعریف می‌کند:

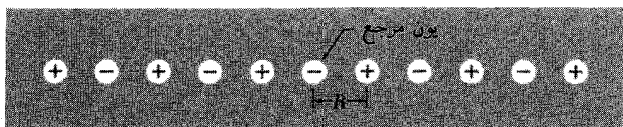
$$\alpha = \sum_j \frac{(\pm)}{p_{ij}}$$

برای آنکه رابطه (20) به بلور پایداری مربوط شود، لازم است α مثبت باشد. اگر یون مرجع را با بار منفی در نظر بگیریم، علامت به اضافه برای یونهای مثبت، و علامت منهای آنها برای یونهای منفی به کار می‌رود. یک تعریف معادل عبارت است از

$$\frac{\alpha}{R} = \sum_j \frac{(\pm)}{r_j} \quad (25)$$

که در آن r_j فاصله یون j ام از یون مرجع و R فاصله تا همسایه اول است. مقداری که برای α به دست می‌آید بستگی به آن دارد که این کمیت برحسب فاصله تا همسایه اول، R ، یا برحسب پارامتر a شبکه، و یا برحسب طول مناسب دیگری تعریف شده باشد.

برای مثال، ثابت مادلونگ را برای خط بی‌پایانی از یونهای یک‌درمیان مثبت و منفی شکل ۹ حساب



شکل ۹. خطی از یونهای یک در میان مثبت و منفی به فاصله R از یکدیگر.

می‌کنیم. یک یون منفی رایون مرجع برمی‌گزینیم، و فاصله بین یونهای مجاور را R می‌گیریم. در این صورت داریم

$$\frac{\alpha}{R} = 2 \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{2R} + \frac{1}{3R} - \frac{1}{4R} + \dots \right]$$

یا

$$\alpha = 2 \left[1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots \right]$$

ضریب ۲ به این دلیل ظاهر می‌شود که دو یون به فاصله یکسان r_j از یون مرجع، یکی در طرف راست و دیگری در طرف چپ، قرار دارند. جمع این رشته با استفاده از بسط زیر به دست می‌آید

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots$$

بنابراین برای زنجیر یک بعدی ثابت مادلونگ $\alpha = 2 \ln 2$ است.

در سه بعد، این رشته دشوارتر می‌شود. جمله‌های متوالی را نمی‌توان با یک وارسی نه‌چندان دقیق نوشت. مهمتر آنکه، این رشته همگرا نخواهد بود، مگر آنکه جمله‌های متوالی آن به گونه‌ای مرتب شوند که سهم جمله‌های مثبت و منفی تقریباً یکدیگر را حذف کنند.

مقادیر نوعی ثابت مادلونگ براساس بارهای واحد و نسبت به فاصله تا همسایه اول عبارت‌اند از

α	ساختار
۱٫۷۴۷۵۶۵	سدیم کلرید، NaCl
۱٫۷۶۲۶۷۵	سزیم کلرید، CsCl
۱٫۶۳۸۱	بلندروی، ZnS مکعبی

سهمهای مادلونگ و دفعی در بستگی بلور KCl در شکل ۱۰ نشان داده شده است. ویژگیهای بلورهای هالید قلیایی با ساختار سدیم کلرید در جدول ۷ ارائه شده‌اند. مقادیر محاسبه‌شده انرژی شبکه سازگاری فوق‌العاده خوبی با مقادیر مشاهده‌شده دارند.

بلورهای کووالانسی

پیوند کووالانسی، زوج الکترون مرسوم یا پیوند هم‌قطب در شیمی، به‌ویژه در شیمی آلی است. این پیوند قوی است: پیوند بین دو اتم کربن در الماس نسبت به اتمهای مجزای خنثی با استحکام پیوند در بلورهای یونی مقایسه‌پذیر است.

جدول ۷. ویژگیهای بلورهای هالید قلیایی با ساختار NaCl

نامی مقادیر (بجز آنهایی که در کروشه‌اند) در دمای اتاق و فشار جو داده شده‌اند. هیچ تصمیعی برای تغییرات R و U از مقدارشان در صفر مطلق در نظر گرفته نشده است. مقادیر درون کروشه به دمای صفر مطلق و فشار صفر مربوط اند

فاصله تا همسایه اول؛ مدول حجمی B ، برحسب پارامتر انرژزی دفعی ρ ، پارامتر برد دفعی ρ ، انرژزی شبکه در مقایسه با

R برحسب \AA یا $10^{-11} \text{ dyn/cm}^2$ برحسب \AA یا 10^{-8} erg/cm^3 برحسب \AA یونهای آزاد، برحسب kcal/mol

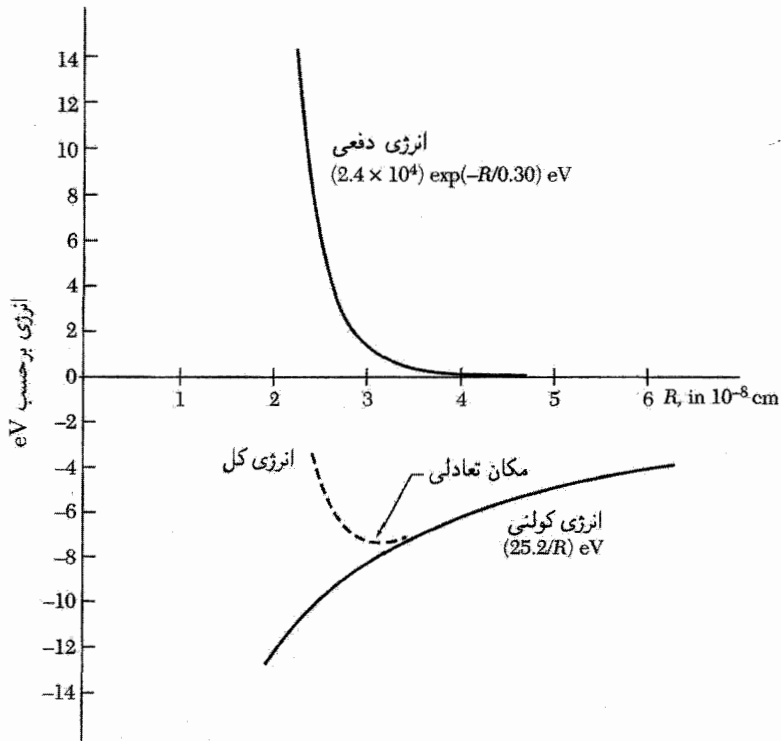
10^{10} N/m^2

محاسبه شده

تجربی

۲۴۲٫۲	۲۴۲٫۳ [۲۴۶٫۸]	۰٫۲۹۱	۰٫۲۹۶	۶٫۷۱	۲٫۰۱۴	LiF
۱۹۲٫۹	۱۹۸٫۹ [۲۰۱٫۸]	۰٫۳۳۰	۰٫۴۹۰	۲٫۹۸	۲٫۵۷۰	LiCl
۱۸۱٫۰	۱۸۹٫۸	۰٫۳۴۰	۰٫۵۹۱	۲٫۳۸	۲٫۷۵۱	LiBr
۱۶۶٫۱	۱۷۷٫۷	۰٫۳۶۶	۰٫۵۹۹	(۱٫۷۱)	۳٫۰۰۰	LiI
۲۱۵٫۲	۲۱۴٫۴ [۲۱۷٫۹]	۰٫۲۹۰	۰٫۶۴۱	۴٫۶۵	۲٫۳۱۷	NaF
۱۷۸٫۶	۱۸۲٫۶ [۱۸۵٫۳]	۰٫۳۲۱	۱٫۰۰۵	۲٫۴۰	۲٫۸۲۰	NaCl
۱۶۹٫۲	۱۷۳٫۶ [۱۷۴٫۳]	۰٫۳۲۸	۱٫۳۳	۱٫۹۹	۲٫۹۸۹	NaBr
۱۵۶٫۶	۱۶۳٫۲ [۱۶۳٫۳]	۰٫۳۴۵	۱٫۵۸	۱٫۵۱	۲٫۳۳۷	NaI
۱۸۹٫۱	۱۸۹٫۸ [۱۹۴٫۵]	۰٫۲۹۸	۱٫۳۱	۳٫۰۵	۲٫۶۷۴	KF
۱۶۱٫۶	۱۶۵٫۸ [۱۶۹٫۵]	۰٫۳۲۶	۲٫۰۵	۱٫۷۴	۲٫۱۴۷	KCl
۱۵۴٫۵	۱۵۸٫۵ [۱۵۹٫۳]	۰٫۳۳۶	۲٫۳۰	۱٫۴۸	۲٫۲۹۸	KBr
۱۴۴٫۵	۱۴۹٫۹ [۱۵۱٫۱]	۰٫۳۴۸	۲٫۸۵	۱٫۱۷	۲٫۵۳۳	KI
۱۸۰٫۴	۱۸۱٫۴	۰٫۳۰۱	۱٫۷۸	۲٫۶۲	۲٫۸۱۵	RbF
۱۵۵٫۴	۱۵۹٫۳	۰٫۳۲۳	۳٫۱۹	۱٫۵۶	۲٫۲۹۱	RbCl
۱۴۸٫۳	۱۵۲٫۶	۰٫۳۳۸	۳٫۰۳	۱٫۳۰	۲٫۴۴۵	RbBr
۱۳۹٫۶	۱۴۴٫۹	۰٫۳۴۸	۳٫۹۹	۱٫۰۶	۳٫۶۷۱	RbI

M. P. Tosi, Solid State Physics 16, 1 (1964) داده‌ها از جدولهای مختلف مقاله زیر گرفته شده‌اند.

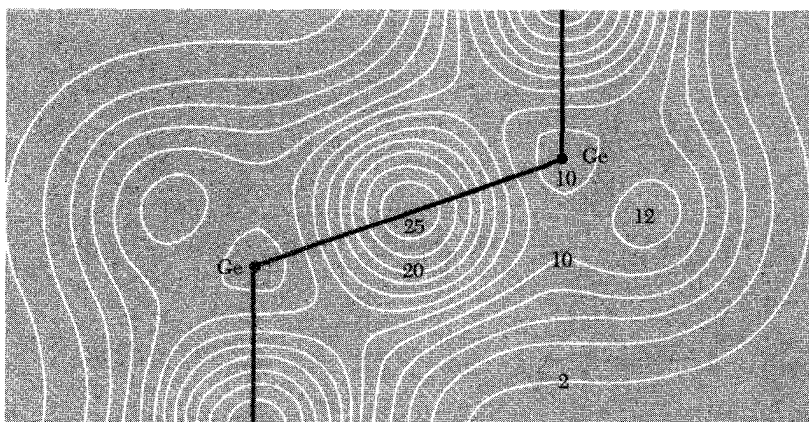


شکل ۱۰. انرژی به ازای یک مولکول برای بلور KCl. سهمهای مادلونگ (کولنی) و دفعی نشان داده شده‌اند.

پیوند کووالانسی معمولاً از دو الکترون تشکیل شده است، که هریک به یکی از اتمهای شرکت‌کننده در پیوند مربوط می‌شوند. الکترونی‌هایی که این پیوند را تشکیل می‌دهند، مایل‌اند تا حدی در ناحیه بین دو اتمی که از طریق پیوند به هم متصل شده‌اند، جایگزیده شوند. اسپینهای دو الکترون این پیوند پادموازی‌اند.

پیوند کووالانسی ویژگیهای راستایی قوی دارد (شکل ۱۱). کربن، سیلیسیم، و ژرمانیم دارای ساختار الماسی‌اند، در آنها هر اتم تحت زوایای چهاروجهی به چهار همسایه اول خود اتصال دارد، چنین آرایش کسری کوچکی از فضای موجود را پر می‌کند، ۳۴° در مقایسه با ۷۴° ساختار تنگ‌چین. پیوند چهاروجهی تنها چهار همسایه اول را می‌پذیرد، در حالی که ساختار تنگ‌چین ۱۲ همسایه اول دارد. بر تشابه پیوند کربن و سیلیسیم نباید بیش از حد تأکید کرد. کربن زیست‌شناسی را می‌دهد، ولی سیلیسیم زمین‌شناسی و فناوری نیم‌رسانا را.

بستگی هیدروژن مولکولی نمونه ساده‌ای از پیوند کووالانسی است. قویترین بستگی (شکل ۱۲) هنگامی روی می‌دهد که اسپین دو الکترون پادموازی باشند. بستگی به سمتگیری نسبی اسپینها وابسته است، نه به

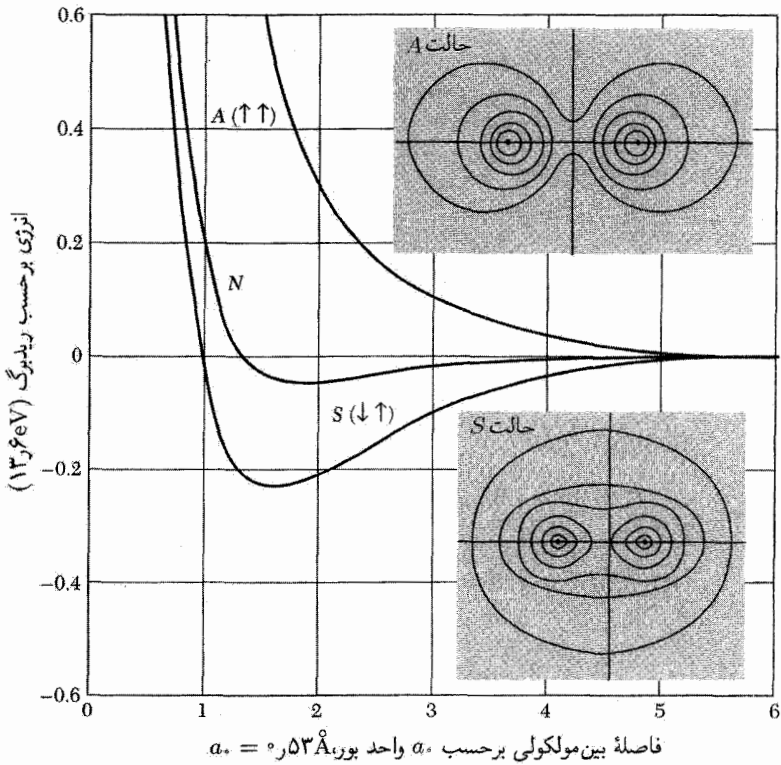


شکل ۱۱. غلظت الکترون ظرفیتی محاسبه شده در ژرمانیم. رقمهای روی پربندها غلظت الکترونی یک یاخته بسیط با چهار الکترون ظرفیتی به ازای هر اتم (۸ الکترون در یاخته بسیط) را می دهد. به غلظت زیاد در نیمه راه راستای پیوند Ge-Ge توجه کنید، این همان چیزی است که از پیوند کووالانسی انتظار می رود.

دلیل وجود نیروهای دوقطبی مغناطیسی قوی بین اسپینها، بلکه به این دلیل که اصل پاولی توزیع بار را بر طبق سمتگیری اسپینها تعدیل می کند. این انرژی کوئنی وابسته به اسپین، برهم کنش تبادلی خوانده می شود. اصل پاولی، برهم کنش دفعی قوی را بین اتمهای با پوسته های پرایجاب می کند. اگر پوسته ها پر نباشند، همپوشانی الکترونی بدون برانگیختن الکترونها به حالت های با انرژی بالاتر به وقوع می پیوندد و پیوند کوتاهتر می شود. طول پیوند Cl_2 (2Å) را با فاصله بین اتمی (3.76Å) در Ar_2 جامد مقایسه کنید؛ همچنین انرژی چسبندگی را در جدول ۱ با یکدیگر مقایسه کنید. اختلاف بین Cl_2 و Ar_2 در این است که اتم Cl دارای ۵ الکترون در پوسته $3p$ است و اتم Ar با شش الکترون پوسته $3p$ را پر می کند، لذا برهم کنش دفعی در Ar قویتر از Cl است.

عناصر C ، Si ، و Ge نسبت به پوسته های پر چهار الکترون کم دارند، و بنابراین، این عناصر (برای مثال) می توانند در اثر همپوشانی بارها برهم کنش جاذب داشته باشند. پیکربندی الکترونی کربن $1s^2 2s^2 2p^2$ است. برای تشکیل دستگاه چهاروجهی از پیوندهای کووالانسی، اتم کربن باید نخست به پیکربندی الکترونی $1s^2 2s^2 2p^3$ ارتقا یابد. این ارتقا از حالت پایه به $4eV$ انرژی نیاز دارد که بیش از مقداری است که هنگام تشکیل پیوندها باز یافت می شود.

گستره پیوسته ای از بلورها بین دو حد یونی و کووالانسی قرار دارند. غالباً این برآورد مهم است که یک پیوند معین تا چه حد یونی یا کووالانسی است. ج. س. فیلیپس با موفقیت چشمگیری نظریه نیمه تجربی تعیین نهاد کسری یونی یا کووالانسی پیوند در بلور دی الکتریک را تعمیم داده است (جدول ۸).



شکل ۱۲. انرژی هیدروژن مولکولی (H_2) نسبت به اتمهای مجزای خنثی. انرژی منفی بستگی را نشان می‌دهد. منحنی N به یک محاسبه کلاسیکی با استفاده از چگالی بار اتم آزاد مربوط می‌شود؛ A نتیجه مربوط به اسپینهای الکترونی موازی، با در نظر گرفتن اصل طرد پاولی، است و S (حالت پایدار) برای اسپینهای پادموازی است. خطوط پربندی چگالی بار حالت‌های A و S را نشان می‌دهند.

فلزها

فلزها با رسانایی الکتریکی زیاد مشخص می‌شوند، و در فلز تعداد زیادی، معمولاً یک یا دو، الکترون به‌ازای هر اتم آزادانه به اطراف حرکت می‌کنند. الکترونیایی که برای حرکت در دسترس‌اند، الکترونهای رسانشی نامیده می‌شوند. الکترونهای ظرفیتی اتم، الکترونهای رسانشی فلز می‌شوند.

در برخی از فلزها، برهم‌کنش مغزهای یونی با الکترونهای رسانشی، همواره سهم عمده‌ای از انرژی بستگی را تشکیل می‌دهد، ولی سیمای مشخصه بستگی فلزی پایتتر بودن انرژی الکترونهای ظرفیتی فلز در مقایسه با اتم آزاد است.

انرژی بستگی بلور فلز قلیایی از انرژی بستگی بلور هالید قلیایی بسیار کمتر است؛ پیوندی که الکترون

جدول ۸. نهاد کسری یونی پیوندها در بلورهای دوعنصری

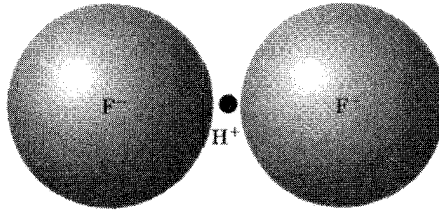
بلور	نهاد کسری یونی	بلور	نهاد کسری یونی
Si	۰٫۰۰		
SiC	۰٫۱۸	GaAs	۰٫۳۱
Ge	۰٫۰۰	GaSb	۰٫۲۶
ZnO	۰٫۶۲	AgCl	۰٫۸۶
ZnS	۰٫۶۲	AgBr	۰٫۸۵
ZnSe	۰٫۶۳	AgI	۰٫۷۷
ZnTe	۰٫۶۱	MgO	۰٫۸۴
CdO	۰٫۷۹	MgS	۰٫۷۹
CdS	۰٫۶۹	MgSe	۰٫۷۹
CdSe	۰٫۷۰		
CdTe	۰٫۶۷	LiF	۰٫۹۲
InP	۰٫۴۲	NaCl	۰٫۹۴
InAs	۰٫۳۶	RbF	۰٫۹۶
InSb	۰٫۳۲		

با اقتباس از: J. C. Phillips, *Bonds and bands in semiconductors*.

رسانشی تشکیل می‌دهد، خیلی قوی نیست. در فلزهای قلیایی، فاصله‌های بین اتمی نسبتاً بزرگ‌اند، زیرا انرژی جنبشی الکترونها رسانشی برای فاصله‌های بین اتمی بزرگ، کمتر می‌شود. این امر به ایجاد بستگی ضعیف منجر می‌شود. فلزها گرایش به آن دارند که در ساختارهای نسبتاً تنگ‌چین fcc, hcp, bcc، و برخی ساختارهای نزدیک به اینها متبلور شوند، و نه در ساختارهای وازچینی چون الماس. در فلزهای واسط بستگی اضافی‌ای وجود دارد که از پوسته‌های الکترونی درونی ناشی می‌شود. فلزهای واسط و فلزهایی که در جدول دوره‌ای بلافاصله بعد از آنها قرار گرفته‌اند، دارای پوسته‌های الکترونی d بزرگ‌اند و با انرژی زیاد مشخص می‌شوند.

پیوندهای هیدروژنی

چون هیدروژن خنثی تنها دارای یک الکترون است، باید فقط با یک اتم دیگر پیوند کووالانسی تشکیل دهد. ولی معلوم شده است که تحت شرایط معلومی یک اتم هیدروژن توسط نیروهای نسبتاً قوی به دو اتم دیگر جذب می‌شود، و در نتیجه بین آن دو پیوندی با انرژی 1eV تشکیل می‌دهد که به پیوند هیدروژنی



شکل ۱۳. یون هیدروژن دی‌فلوئورید HF_2^- با یک پیوند هیدروژنی پایدار می‌شود. این طرح مربوط به یک مدل فرین از این پیوند است، فرین به این معنا که پروتون از الکترون نشان داده شده عاری است.

موسوم است. پیوند هیدروژنی بین الکترونگاتیوترین اتمها، به‌ویژه F ، O ، و N تشکیل می‌شود، از این رو عقیده بر آن است که نهادش عمدتاً یونی است. در پیوند هیدروژنی کاملاً یونی، اتم هیدروژن الکترون خود را به اتم دیگری در مولکول واگذار می‌کند؛ پروتون برهنه پیوند هیدروژنی تشکیل می‌دهد. اتمهای مجاور پروتون آن قدر به هم نزدیک‌اند که اگر تعدادشان از دو بیشتر شود، سر راه هم واقع می‌شوند؛ به این ترتیب پیوند هیدروژنی تنها دو اتم را به یکدیگر متصل می‌کند (شکل ۱۳).

پیوند هیدروژنی بخش مهمی از برهم‌کنش بین مولکولهای H_2O را تشکیل می‌دهد، و همراه با جاذبه الکتروستاتیکی گشتاورهای دوقطبی الکتریکی باعث ویژگیهای فیزیکی جالب توجه آب و یخ است. این پیوند در برخی بلورهای فروالکتریک و در DNA اهمیت دارد.

شعاعهای اتمی

با استفاده از پراش پرتو x فاصله‌های بین‌اتمی در بلورها را می‌توان با دقت زیاد، اغلب تا 10^{-5} ، اندازه‌گیری کرد. آیا می‌توان گفت بخشی از فاصله مشاهده‌شده بین اتمها به اتم A و بخشی از آن به اتم B اختصاص دارد؟ آیا می‌توان بدون در نظر گرفتن طبیعت و ترکیب بلور، مفهوم معینی به شعاع اتم یا یون نسبت داد؟ پاسخ اکیداً منفی است. توزیع بار در اطراف اتم، به مرزکروی صلب محدود نمی‌شود. با وجود این، استفاده از مفهوم شعاع اتمی برای پیش‌بینی فاصله بین اتمی مفید است. امکان وجود فازهایی که تاکنون سنتز نشده‌اند و ثابتهای شبکه احتمالی‌شان را می‌توان با استفاده از ویژگیهای جمع‌پذیری شعاعهای اتمی پیش‌بینی کرد. علاوه بر این، پیکربندی الکترونی اتمهای تشکیل‌دهنده بلور را اغلب می‌توان با مقایسه مقادیر ثابت شبکه محاسبه‌شده و تجربی استنتاج کرد.

برای پیش‌بینی ثابتهای شبکه، مناسب است مجموعه‌هایی از شعاعهای خودسازگار برای انواع مختلف پیوندها نسبت دهیم (جدول ۹): مجموعه‌ای برای بلورهای یونی که یونهای تشکیل‌دهنده‌شان، همارایی ۶

جدول ۹. ششهای یونی واتمی

اینها فقط مقادیر تقریبی اند. واحد آنگستروم، 10^{-10} m است. برای منابع اصلی

به این کتاب مراجعه کنید.

W.B. Pearson, *Crystal chemistry and physics of metals and alloys*, Wiley, 1972.

H	2.08																	He																				
Li	0.68	Be	0.35													B	0.23	C	0.15	N	1.71	O	1.40	F	1.36	Ne	1.58											
	1.56		1.06														0.98		0.77		0.70		0.66		0.64													
		Mg	0.65													Al	0.50	Si	0.41	P	2.12	S	1.84	Cl	1.81	Ar	1.88											
			1.40														1.25		1.17		1.10		1.04		0.99													
			1.60														1.43		1.32																			
K	1.33	Ca	0.99	Sc	0.81	Ti	0.68	V		Cr		Mn		Fe		Co		Ni		Cu		Zn		Ga		Ge		As		Se		Br		Kr		Xe		2.00
	2.38		1.98		1.64		1.46		1.35		1.28		1.26		1.27		1.25		1.25		1.28		1.39		1.41		1.37		1.39		1.36		1.32		2.17			
Rb	1.48	Sr	1.13	Y	0.93	Zr	0.80	Nb	0.67	Mo		Tc		Ru		Rh		Pd		Ag		Cd		In		Sn		Sb		Te		I		2.16				
	2.55		2.15		1.80		1.60		1.47		1.40		1.36		1.34		1.35		1.38		1.45		1.57		1.66		1.55		1.59		1.40		1.32		2.17			
Cs	1.67	Ba	1.35	La	1.15	Hf	1.15	Ta		W		Re		Os		Ir		Pt		Au		Hg		Tl		Pb		Bi		Po		At		Rn				
	2.73		2.24		1.88		1.58		1.47		1.41		1.38		1.35		1.36		1.39		1.44		1.57		1.72		1.75		1.70		1.76							
Fr	1.75	Ra	1.37	Ac	1.11	Ce	1.01	Pr		Nd		Pm		Sm		Eu		Gd		Tb		Dy		Ho		Er		Tm		Yb		Lu						
					1.71		1.82		1.83		1.82		1.81		1.80		1.80		1.80		1.80		1.78		1.77		1.77		1.76		1.75		1.74					
					1.82		1.83		1.82		1.81		1.80		1.80		1.80		1.80		1.80		1.78		1.77		1.77		1.76		1.75		1.74					
					0.99		0.90		0.83		0.83		0.83		0.83		0.83		0.83		0.83		0.83		0.83		0.84		0.84		0.84		0.84					
					1.80		1.63		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56					
					1.80		1.63		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56		1.56					

ششهای استاندارد برای یونهای با یکبردی گاریتر (پوسته بر) →
 ششهای یونهای واسیلینهای کوالانسیهای لایحه‌ای فاصله‌ها →
 ششهای یونهای در فازهای با هم‌بندی ۱۲ →

و پیکربندی پوستهٔ پرگاز بی‌اثر دارند، مجموعهٔ دیگری برای یونها در ساختارهای با همارایی چهاروجهی، و یک مجموعهٔ دیگر برای فلزهای تنگ‌چین با همارایی ۱۲.

شعاعهای خودسازگار پیش‌بینی‌شده برای کاتیون Na^+ و آنیون F^- ، طبق جدول ۹، برای فاصلهٔ بین‌اتمی در بلور NaF ، در مقایسه با مقدار مشاهده‌شده 2.32 \AA ، 2.33 \AA ، $1.36 \text{ \AA} + 0.97 \text{ \AA}$ منجر می‌شوند. این سازگاری بسیار بهتر از موردی است که در آن برای Na و F پیکربندیهای اتمی (خشتی) در نظر گرفته باشیم، که در آن صورت فاصلهٔ بین‌اتمی در بلور را برابر 2.58 \AA به دست می‌آوریم. این مقدار اخیر برابر است با نصف مجموع فاصله تا همسایهٔ اول در سدیم فلزی به اضافهٔ فاصلهٔ بین‌اتمی در F_2 گازی. فاصلهٔ بین‌اتمی اتمهای C در الماس 1.54 \AA و نصف این فاصله 0.77 \AA است. در سیلیسیم که همان ساختار بلوری را دارد، نصف فاصلهٔ بین‌اتمی 1.17 \AA است. در SiC هر اتم با چهار اتم از نوع مخالف احاطه می‌شود. اگر شعاعهایی که در بالا برای C و Si داده شد، با هم جمع کنیم، طول پیوند $\text{C} - \text{Si}$ را برابر 1.94 \AA پیش‌بینی می‌کنیم، که با طول پیوند مشاهده‌شده 1.89 \AA سازگاری خوبی دارد. با به‌کار بردن جدولهای شعاعهای اتمی همین میزان سازگاری (چند درصد) را به دست خواهیم آورد.

شعاعهای بلورهای یونی

شعاعهای بلورهای یونی با پیکربندی گاز بی‌اثر و همارایی ۶ تابه در جدول ۹ داده شده‌اند. این شعاعهای یونی را می‌توان در ارتباط با جدول ۱۰ به‌کار برد. BaTiO_3 را که ثابت شبکه‌اش در دمای اتاق 4.0×10^4 است، در نظر می‌گیریم. هر یون 12Ba^{++} همسایهٔ اول یون O^{--} دارد، در نتیجه عدد همارایی ۱۲ است و تصحیح Δ_{12} در جدول ۱۰ را باید به‌کار برد. اگر فرض کنیم این ساختار را اتصالهای $\text{Ba} - \text{O}$ تعیین می‌کنند، خواهیم داشت $2.94 \text{ \AA} = 1.19 + 1.40 + 1.35 = D_{12}$ یا $a = 4.16 \text{ \AA}$ ؛ اگر اتصال $\text{Ti} - \text{O}$ ساختار را تعیین کند، داریم $2.08 = 1.40 + 0.68 = D_6$ یا $a = 4.16 \text{ \AA}$. ثابت شبکهٔ واقعی کمی کوچکتر از این تخمین‌هاست که احتمالاً مبین آن است که پیوند، یونی محض نبوده و بخشی از آن کووالانسی است.

جدول ۱۰. کاربرد شعاعهای استاندارد یونها که در جدول ۹ داده شده‌اند

$\Delta_N (\text{Å})$	N	$\Delta_N (\text{Å})$	N	$\Delta_N (\text{Å})$	N
+۰٫۱۱	۹	۰٫۰۵	۵	-۰٫۵۰	۱
+۰٫۱۴	۱۰	۰	۶	-۰٫۳۱	۲
+۰٫۱۷	۱۱	+۰٫۰۴	۷	-۰٫۱۹	۳
+۰٫۱۹	۱۲	+۰٫۰۸	۸	-۰٫۱۱	۴

تحلیل کرنشهای کشسان

برای بررسی ویژگیهای کشسانی بلور، آن را نه به صورت آرایه‌ای دوره‌ای از اتمها، بلکه به صورت محیط پیوسته همگن در نظر می‌گیریم. این تقریب پیوستاری معمولاً برای امواج کشسان با طول موجهای λ بزرگتر از 10^{-6} cm، یعنی برای بسامدهای کمتر از 10^{11} یا 10^{12} هرتز، معتبر است. برخی مطالبی که در ادامه خواهند آمد، به دلیل چندگانگی اجتناب‌ناپذیر علامتها، پیچیده به نظر می‌آیند. مفاهیم اساسی فیزیکی ساده‌اند: از قانون هوک و قانون دوم نیوتون استفاده می‌کنیم. بنابر قانون هوک، در جامد کشسان، کرنش مستقیماً با تنش متناسب است. این قانون، تنها در مورد کرنشهای کوچک به کار می‌رود. اگر کرنشها آن قدر بزرگ باشند که قانون هوک دیگر صادق نباشد، می‌گوییم در ناحیه غیرخطی هستیم.

کرنش را برحسب مؤلفه‌های $e_{xx}, e_{yy}, e_{zz}, e_{xy}, e_{yz}, e_{zx}$ ، که در ادامه تعریف می‌شوند، مشخص می‌کنیم. تنها کرنشهای بینهایت کوچک را بررسی می‌کنیم. در نمادگذاری، تمایزی بین تغییر شکل‌های هم‌دما (در دمای ثابت) و بی‌دررو (با آنتروپی ثابت) قائل نخواهیم شد. تفاوت اندک بین ثابتهای کشسانی هم‌دما و بی‌دررو، در دمای اتاق و کمتر از آن اغلب از اهمیت چندانی برخوردار نیستند.

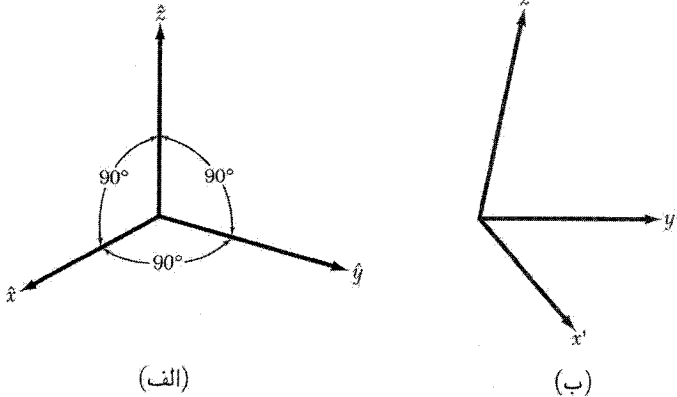
فرض می‌کنیم سه بردار متعامد $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ و به طول واحد، مطابق شکل ۱۴، درون بلور کرنش‌نیافته نصب شده باشند. این محورها، پس از یک تغییر شکل یکنواخت کوچک در جامد، هم از نظر سمتگیری و هم از نظر طول وایپش پیدا می‌کنند. در تغییر شکل یکنواخت، همهٔ یاخته‌های بسیط بلور به یک صورت تغییر شکل می‌دهند. محورهای جدید x', y', z' را می‌توان برحسب محورهای قدیم به این صورت نوشت:

$$\begin{aligned} x' &= (1 + \epsilon_{xx})\hat{x} + \epsilon_{xy}\hat{y} + \epsilon_{xz}\hat{z} \\ y' &= \epsilon_{yx}\hat{x} + (1 + \epsilon_{yy})\hat{y} + \epsilon_{yz}\hat{z} \\ z' &= \epsilon_{zx}\hat{x} + \epsilon_{zy}\hat{y} + (1 + \epsilon_{zz})\hat{z} \end{aligned} \quad (26)$$

ضرایب $\epsilon_{\alpha\beta}$ تغییر شکل را تعریف می‌کنند؛ این ضریبها بدون بُعدند، و اگر کرنش کوچک باشد خیلی کوچکتر از یک‌اند $\epsilon_{\alpha\beta} \ll 1$. طول اولیهٔ محورها یک بود، ولی محورهای جدید لزوماً به طول یک نیستند. برای مثال،

$$x' \cdot x' = 1 + 2\epsilon_{xx} + \epsilon_{xx}^2 + \epsilon_{xy}^2 + \epsilon_{xz}^2$$

که در نتیجه داریم $x' \cong 1 + \epsilon_{xx} + \dots$. یعنی تغییرات نسبی طول محورهای $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ تا مرتبهٔ اول به ترتیب برابرند با $\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}, \epsilon_{zz}$.



شکل ۱۴. محورهای مختصات برای توصیف حالت کرنش؛ محورهای یکه متعامد در حالت کرنش نیایافته (الف) به حالت کرنش یافته (ب) تغییر شکل پیدا می‌کنند.

تغییر شکل رابطه (۲۶)، بر اتمی که در اصل در $\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}}$ بوده است چه تأثیری دارد؟ مبدأ بر اتم دیگری قرار گرفته است. در نتیجه، اگر تغییر شکل یکنواخت باشد، این نقطه پس از تغییر شکل در مکان $\mathbf{r}' = xx' + yy' + zz'$ خواهد بود. روشن است که می‌توانیم محور $\hat{\mathbf{x}}$ را به گونه‌ای برگزینیم که $\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{x}}$ در این صورت از تعریف x' داریم $\mathbf{r}' = xx'$. جابه‌جایی R در تغییر شکل، به این صورت تعریف می‌شود

$$\mathbf{R} \equiv \mathbf{r}' - \mathbf{r} = x(\mathbf{x}' - \hat{\mathbf{x}}) + y(\mathbf{y}' - \hat{\mathbf{y}}) + z(\mathbf{z}' - \hat{\mathbf{z}}) \quad (27)$$

یا، از رابطه (۲۶)،

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\mathbf{r}) \equiv & (x\epsilon_{xx} + y\epsilon_{yx} + z\epsilon_{zx})\hat{\mathbf{x}} + (x\epsilon_{xy} + y\epsilon_{yy} + z\epsilon_{zy})\hat{\mathbf{y}} \\ & + (x\epsilon_{xz} + y\epsilon_{yz} + z\epsilon_{zz})\hat{\mathbf{z}} \end{aligned} \quad (28)$$

این رابطه را می‌توان با معرفی u ، v و w به صورت عامتر زیر نوشت

$$\boxed{\mathbf{R}(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r})\hat{\mathbf{x}} + v(\mathbf{r})\hat{\mathbf{y}} + w(\mathbf{r})\hat{\mathbf{z}}} \quad (29)$$

اگر تغییر شکل غیر یکنواخت باشد، باید u ، v و w را به کرنشهای موضعی ارتباط دهیم. مبدأ \mathbf{r} را نزدیک به ناحیه مورد نظر می‌گیریم؛ آنگاه با مقایسه (۲۶) و (۲۸)، با بسط تیلور \mathbf{R} و با استفاده از $\mathbf{R}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$

داریم،

$$y\epsilon_{yx} = y \frac{\partial u}{\partial y}; \quad x\epsilon_{xx} \cong x \frac{\partial u}{\partial x} \quad (30)$$

متداول است که به جای ضرایب $\epsilon_{\alpha\beta}$ ، ضرایب $e_{\alpha\beta}$ را به کار برند. مؤلفه‌های کرنش e_{xx} ، e_{yy} ، و e_{zz} را با استفاده از رابطه (۳۰) با این روابط تعریف می‌کنیم

$$e_{xx} \equiv \epsilon_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x}; \quad e_{yy} \equiv \epsilon_{yy} = \frac{\partial u}{\partial y}; \quad e_{zz} \equiv \epsilon_{zz} = \frac{\partial u}{\partial z} \quad (31)$$

دیگر مؤلفه‌های کرنش برحسب تغییر در زاویه بین محورها تعریف می‌شوند؛ با استفاده از رابطه (۲۶) می‌توانیم تعریف کنیم

$$\begin{aligned} e_{xy} &\equiv \mathbf{x}' \cdot \mathbf{y}' \cong \epsilon_{yx} + \epsilon_{xy} = \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \\ e_{yz} &\equiv \mathbf{y}' \cdot \mathbf{z}' \cong \epsilon_{zy} + \epsilon_{yz} = \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \\ e_{zx} &\equiv \mathbf{z}' \cdot \mathbf{x}' \cong \epsilon_{zx} + \epsilon_{xz} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \end{aligned} \quad (32)$$

اگر از جمله‌های از مرتبه ϵ^2 صرف‌نظر کنیم می‌توانیم علامتهای \cong را با علامتهای $=$ عوض کنیم. شش پارامتر بدون بعد $e_{\alpha\beta} (= e_{\beta\alpha})$ ، کرنش را به‌طور کامل تعریف می‌کنند.

اتساع

افزایش نسبی حجم همراه با تغییرشکل را اتساع می‌نامند. اتساع برای فشار هیدروستاتیکی منفی است. حجم مکعب واحد با یالهای \hat{x} ، \hat{y} ، و \hat{z} پس از تغییر شکل با استفاده از رابطه مشهور حجم متوازی‌السطوح با یالهای \mathbf{x}' ، \mathbf{y}' و \mathbf{z}' برابر خواهد بود با

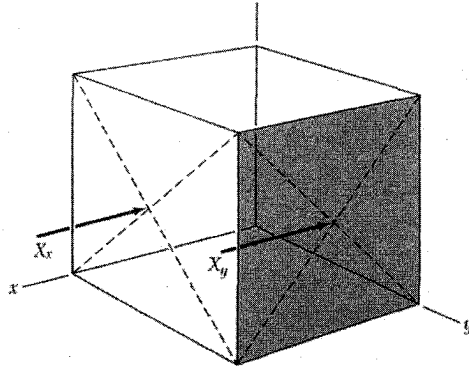
$$V' = \mathbf{x}' \cdot \mathbf{y} \times \mathbf{z}' \quad (33)$$

از رابطه (۲۶) داریم،

$$\mathbf{x}' \cdot \mathbf{y}' \times \mathbf{z}' = \begin{vmatrix} 1 + \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & 1 + \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & 1 + \epsilon_{zz} \end{vmatrix} \cong 1 + e_{xx} + e_{yy} + e_{zz} \quad (34)$$

که در آن از حاصلضرب دوکرنش صرف‌نظر شده است. در نتیجه اتساع δ برابر است با

$$\delta \equiv \frac{V' - V}{V} \cong e_{xx} + e_{yy} + e_{zz} \quad (35)$$



شکل ۱۵. مؤلفه X_x تنش عبارت است از نیرویی که در جهت x بر واحد سطح صفحه‌ای که خط عمود بر آن در جهت x قرار دارد وارد می‌شود؛ X_y در جهت x بر واحد سطح صفحه‌ای وارد می‌شود که عمود بر آن در جهت y است.

مؤلفه‌های تنش

نیروی وارد بر واحد سطح در جامد را تنش گویند. نه مؤلفه تنش داریم: $X_x, X_y, X_z, Y_x, Y_y, Y_z, Z_x, Z_y, Z_z$. حروف بزرگ جهت نیرو و زیرنویسها جهت عمود بر صفحه‌ای را مشخص می‌کنند که نیرو بر آن وارد شده است. در شکل ۱۵، مؤلفه X_x تنش نیرویی را نشان می‌دهد که در جهت x بر واحد سطح صفحه‌ای که عمود بر آن در جهت x است، وارد می‌شود؛ و مؤلفه X_y تنش نیرویی را نشان می‌دهد که در جهت x بر واحد سطح صفحه‌ای که عمود بر آن در جهت y است، وارد می‌شود. با اعمال شرط صفرشدن شتاب زاویه‌ای بر یک مکعب بنیادی (مثل شکل ۱۶) و در نتیجه لزوم صفر بودن گشتاور کل وارد بر آن، نتیجه می‌شود که تعداد مؤلفه‌های مستقل تنش از نه به شش کاهش می‌یابد. یعنی

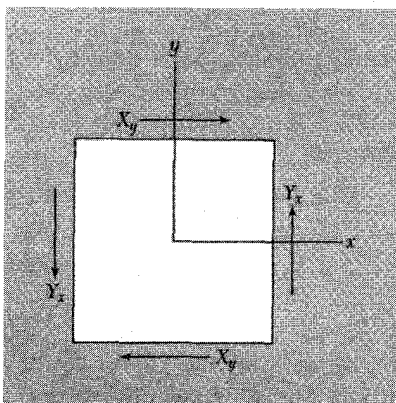
$$Y_z = Z_y; \quad Z_x = X_z; \quad X_y = Y_x \quad (36)$$

شش مؤلفه مستقل تنش را می‌توان $X_x, X_y, X_z, Y_x, Y_z, Z_x$ گرفت.

ابعاد مؤلفه‌های تنش عبارت‌اند از نیرو بر واحد سطح یا انرژی بر واحد حجم. مؤلفه‌های کرنش، نسبت طولها و بدون بعدند.

ثابت‌های سفتی و تن‌دهی کشسانی

بنابر قانون هوک، برای تغییرشکل‌های به اندازه کافی کوچک، کرنش مستقیماً با تنش متناسب است،



شکل ۱۶. نمایش جسمی در حال تعادل ایستایی $Y_x = X_y$. مجموع نیروهایی که در جهت x وارد می‌شوند برابر صفر است. مجموع نیروهایی که در جهت y وارد می‌شوند نیز صفر است. نیروی کل صفر می‌شود. گشتاور کل حول مبدأ نیز به شرطی صفر است که داشته باشیم $Y_x = X_y$.

به گونه‌ای که مؤلفه‌های کرنش توابعی خطی از مؤلفه‌های تنش‌اند:

$$\begin{aligned}
 e_{xx} &= S_{11}X_x + S_{12}Y_y + S_{13}Z_z + S_{14}Y_z + S_{15}Z_x + S_{16}X_y; \\
 e_{yy} &= S_{21}X_x + S_{22}Y_y + S_{23}Z_z + S_{24}Y_z + S_{25}Z_x + S_{26}X_y; \\
 e_{zz} &= S_{31}X_x + S_{32}Y_y + S_{33}Z_z + S_{34}Y_z + S_{35}Z_x + S_{36}X_y; \\
 e_{yz} &= S_{41}X_x + S_{42}Y_y + S_{43}Z_z + S_{44}Y_z + S_{45}Z_x + S_{46}X_y; \\
 e_{zx} &= S_{51}X_x + S_{52}Y_y + S_{53}Z_z + S_{54}Y_z + S_{55}Z_x + S_{56}X_y; \\
 e_{xy} &= S_{61}X_x + S_{62}Y_y + S_{63}Z_z + S_{64}Y_z + S_{65}Z_x + S_{66}X_y;
 \end{aligned} \tag{۳۷}$$

$$\begin{aligned}
 X_x &= C_{11}e_{xx} + C_{12}e_{yy} + C_{13}e_{zz} + C_{14}e_{yz} + C_{15}e_{zx} + C_{16}e_{xy}; \\
 Y_y &= C_{21}e_{xx} + C_{22}e_{yy} + C_{23}e_{zz} + C_{24}e_{yz} + C_{25}e_{zx} + C_{26}e_{xy}; \\
 Z_z &= C_{31}e_{xx} + C_{32}e_{yy} + C_{33}e_{zz} + C_{34}e_{yz} + C_{35}e_{zx} + C_{36}e_{xy}; \\
 Y_z &= C_{41}e_{xx} + C_{42}e_{yy} + C_{43}e_{zz} + C_{44}e_{yz} + C_{45}e_{zx} + C_{46}e_{xy}; \\
 Z_x &= C_{51}e_{xx} + C_{52}e_{yy} + C_{53}e_{zz} + C_{54}e_{yz} + C_{55}e_{zx} + C_{56}e_{xy}; \\
 X_y &= C_{61}e_{xx} + C_{62}e_{yy} + C_{63}e_{zz} + C_{64}e_{yz} + C_{65}e_{zx} + C_{66}e_{xy};
 \end{aligned} \tag{۳۸}$$

کمیت‌های S_{11}, S_{12}, \dots ثابت‌های تن‌دهی کشسانی یا ثابت‌های کشسانی نامیده می‌شوند؛ کمیت‌های C_{11}, C_{12}, \dots ثابت‌های سفتی کشسانی یا مدول‌های کشسانی نام دارند. S ها ابعاد مساحت بر نیرو یا حجم بر انرژی دارند. C ها ابعاد نیرو بر مساحت یا انرژی بر حجم است.

چگالی انرژی کشسانی

با ملاحظاتی چند، می‌توان از تعداد ۳۶ ثابت در رابطه (۳۷) یا (۳۸) کم کرد. چگالی انرژی کشسانی U در تقریب قانون هوک، تابع درجهٔ دومی از کرنشهاست (عبارت مربوط به انرژی فنر کشیده را به‌خاطر

بیاورید). بنابراین می‌توانیم بنویسیم:

$$U = \frac{1}{4} \sum_{\lambda=1}^6 \sum_{\mu=1}^6 \tilde{C}_{\lambda\mu} e_{\lambda} e_{\mu} \quad (39)$$

که در آن شاخصهای ۱ تا ۶ به این صورت تعریف می‌شوند:

$$1 \equiv xx; \quad 2 \equiv yy; \quad 3 \equiv zz; \quad 4 \equiv yz; \quad 5 \equiv zx; \quad 6 \equiv xy \quad (40)$$

رابطه بین \tilde{C} ها و C های معادله (۳۸) به گونه معادله (۴۲) در ادامه مطلب است.

مؤلفه‌های تنش با مشتق‌گیری از U نسبت به مؤلفه‌های متناظر کرنش به دست می‌آیند. این نتیجه از تعریف انرژی پتانسیل حاصل می‌شود. فرض کنید تنش X_x بر یک وجه مکعب واحد وارد شود، در حالی که وجه مقابل در حالت سکون نگه داشته شده است:

$$X_x = \frac{\partial U}{\partial e_{xx}} \equiv \frac{\partial U}{\partial e_1} = \tilde{C}_{11} e_1 + \frac{1}{4} \sum_{\beta=2}^6 (\tilde{C}_{1\beta} + \tilde{C}_{\beta 1}) e_{\beta} \quad (41)$$

توجه کنید که تنها ترکیب $\frac{1}{4}(\tilde{C}_{\alpha\beta} + \tilde{C}_{\beta\alpha})$ در رابطه‌های تنش-کرنش وارد می‌شود. نتیجه می‌شود که ثابتهای سفتی کشسانی متقارن‌اند:

$$C_{\alpha\beta} = \frac{1}{4}(\tilde{C}_{\alpha\beta} + \tilde{C}_{\beta\alpha}) = C_{\beta\alpha} \quad (42)$$

به این ترتیب سی‌وشش ثابت سفتی کشسانی به بیست و یک ثابت تقلیل می‌یابند.

ثابت‌های سفتی کشسانی بلورهای مکعبی

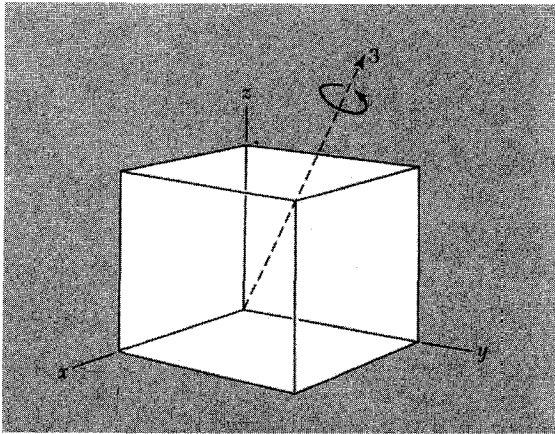
اگر بلور دارای عناصر تقارنی باشد، از تعداد ثابت‌های مستقل سفتی کشسانی باز هم کاسته خواهد شد. اینک نشان می‌دهیم که در بلورهای مکعبی تنها سه ثابت سفتی مستقل وجود دارد. ادعا می‌کنیم که چگالی انرژی کشسانی بلور مکعبی برابر است با

$$U = \frac{1}{4} C_{11} (e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2) + \frac{1}{4} C_{22} (e_{yz}^2 + e_{zx}^2 + e_{xy}^2) + C_{12} (e_{yy} e_{zz} + e_{zz} e_{xx} + e_{xx} e_{yy}) \quad (43)$$

و هیچ جمله درجه دوم دیگری در آن نیست؛ یعنی،

$$(e_{xx} e_{xy} + \dots); \quad (e_{yz} e_{zx} + \dots); \quad (e_{xx} e_{yz} + \dots) \quad (44)$$

وجود ندارند.



شکل ۱۷. دوران $2\pi/3$ حول محوری که با ۳ نشانه‌گذاری شده است x را به y ، y را به z ، و z را به x تغییر می‌دهد.

کمترین شرط تقارنی ساختار مکعبی، حضور چهار محور دوران سه‌تایه است. این محورها عبارت‌اند از [۱۱۱] و جهت‌های هم‌ارز با آن (شکل ۱۷). اثر دوران $2\pi/3$ حول این چهار محور آن است که محورهای x ، y ، z ، به تناسب محور مورد نظر، طبق طرح زیر به یکدیگر تبدیل می‌شوند:

$$\begin{aligned} x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x & \quad -x \rightarrow z \rightarrow y \rightarrow -x \\ x \rightarrow z \rightarrow -y \rightarrow x & \quad -x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow -x \end{aligned} \quad (45)$$

برای مثال، در نخستین طرح داریم

$$e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2 \rightarrow e_{yy}^2 + e_{zz}^2 + e_{xx}^2$$

و همین‌طور برای جمله‌های دیگر درون پرانتزهای (۴۳). بنابراین رابطه (۴۳) تحت تبدیلیهایی که در نظر گرفته شد، ناورداست. ولی هریک از جمله‌هایی که در رابطه (۴۴) نمایش داده شده در یک یا چند شاخص فرد است. در مجموعه (۴۵) یک دوران می‌توان یافت که علامت جمله را عوض کند، زیرا، برای مثال، $e_{xy} = -e_{x(-y)}$. به این ترتیب جمله‌های رابطه (۴۴) تحت عملهای موردنظر ناوردا نیستند.

این باقی می‌ماند که درستی ضریبهای عددی را در رابطه (۴۳) اثبات کنیم. از رابطه (۴۱) داریم،

$$\partial U / \partial e_{xx} = X_x = C_{11}e_{xx} + C_{12}(e_{yy} + e_{zz}) \quad (46)$$

ظاهر $C_{11}e_{xx}$ با رابطه (۳۸) سازگار است. با مقایسه فراتر، مشاهده می‌کنیم که

$$C_{12} = C_{13}; \quad C_{14} = C_{15} = C_{16} = 0 \quad (47)$$

۹۲ بستگی بلور و ثابتهای کشسانی

علاوه بر این، از رابطه (۴۳) داریم،

$$\partial U / \partial e_{xy} = X_y = C_{44} e_{xy} \quad (48)$$

در مقایسه با رابطه (۳۸) داریم

$$C_{61} = C_{62} = C_{63} = C_{64} = C_{65} = 0; \quad C_{66} = C_{44} \quad (49)$$

بنابراین آرایه مقدارهای ثابتهای سفتی کشسانی برای بلور مکعبی، با استفاده از رابطه (۴۳) به این ماتریس کاهش می‌یابد:

	e_{xx}	e_{yy}	e_{zz}	e_{yz}	e_{zx}	e_{xy}
X_x	C_{11}	C_{12}	C_{12}	0	0	0
Y_y	C_{12}	C_{11}	C_{12}	0	0	0
Z_z	C_{12}	C_{12}	C_{11}	0	0	0
Y_z	0	0	0	C_{44}	0	0
Z_x	0	0	0	0	C_{44}	0
X_y	0	0	0	0	0	C_{44}

(50)

ثابتهای سفتی و تن‌دهی، برای بلور مکعبی، به صورت زیر به هم مربوط می‌شوند

$$C_{14} = 1/S_{44}; \quad C_{11} - C_{12} = (S_{11} - S_{12})^{-1}$$

$$C_{11} + 2C_{12} = (S_{11} + 2S_{12})^{-1} \quad (51)$$

این روابط با برآورد ماتریس وارون رابطه (50) به دست می‌آیند.

مدول حجمی و تراکم‌پذیری

اتساع یکنواخت δ را در نظر بگیرید. چگالی انرژی (۴۳) برای بلور مکعبی برابر است با

$$U = \frac{1}{6} (C_{11} + 2C_{12}) \delta^2 \quad (52)$$

مدول حجمی B را می‌توانیم با رابطه زیر تعریف کنیم

$$U = \frac{1}{3} B \delta^2 \quad (53)$$

این رابطه با تعریف $-V dp/dV$ معادل است. برای بلور مکعبی داریم

$$B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad (54)$$

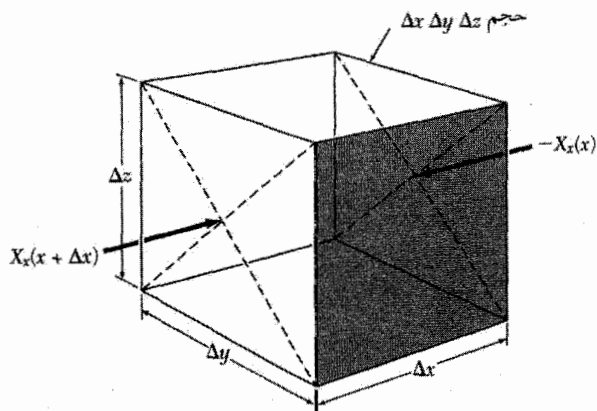
تراکم‌پذیری K به صورت $K = 1/B$ تعریف می‌شود. مقدارهای B و K در جدول ۳ داده شده‌اند.

امواج کشسان در بلورهای مکعبی

با در نظر گرفتن نیروهایی که مطابق شکل‌های ۱۸ و ۱۹ بر یک عنصر حجم در بلور وارد می‌شود، معادله حرکت را در جهت x به دست می‌آوریم

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial X_x}{\partial x} + \frac{\partial X_y}{\partial y} + \frac{\partial X_z}{\partial z} \quad (55)$$

در این رابطه ρ چگالی و u جابه‌جایی در جهت x است. معادله‌های مشابهی برای جهتهای y و z وجود



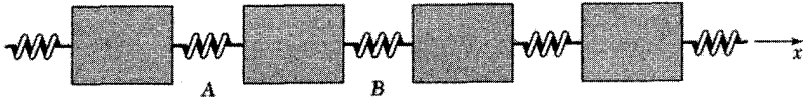
شکل ۱۸. مکعبی به حجم $\Delta x \Delta y \Delta z$ که تنش $-X_x(x)$ بر وجه واقع در x ، و تنش

$$X_x(x + \Delta x) \simeq X_x(x) + \frac{\partial X_x}{\partial x} \Delta x$$

بر وجه موازی آن در $x + \Delta x$ وارد می‌شود. نیروی خالص برابر است با $(\partial X_x / \partial x \Delta x) \Delta y \Delta z$. نیروهای دیگر که در جهت x از بردش تنشهای X_y و X_z در طول مکعب ناشی می‌شوند، در شکل نشان داده نشده‌اند. مؤلفه x نیروی خالص وارد بر مکعب برابر است با

$$F_x = \left(\frac{\partial X_x}{\partial x} + \frac{\partial X_y}{\partial y} + \frac{\partial X_z}{\partial z} \right) \Delta x \Delta y \Delta z$$

این نیرو برابر است با جرم مکعب ضربدر مؤلفه شتاب در جهت x . جرم برابر است با $\rho \Delta x \Delta y \Delta z$ و شتاب برابر است با $\partial^2 u / \partial t^2$.



شکل ۱۹. اگر فنرهای A و B به یک اندازه کشیده شوند، بر قطعه بین آن دو نیروی خالصی وارد نمی‌شود. این امر نشان‌دهنده این واقعیت است که یک تنش یکنواخت X_x در یک جامد، به نیروی خالصی بر یک عنصر حجم منجر نمی‌شود. اگر فنر B بیش از فنر A کشیده شود، قطعه بین آن دو توسط نیروی $X_x(B) - X_x(A)$ شتاب می‌گیرد.

دارد. از روابط (۳۸) و (۵۰) نتیجه می‌شود که برای بلور مکعبی

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial e_{xx}}{\partial x} + C_{12} \left(\frac{\partial e_{yy}}{\partial x} + \frac{\partial e_{zz}}{\partial x} \right) + C_{44} \left(\frac{\partial e_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial e_{zx}}{\partial z} \right) \quad (56)$$

x, y, z در اینجا با بالهای مکعب موازی‌اند. با استفاده از تعریف مؤلفه‌های کرنش در روابط (۳۱) و (۳۲) داریم،

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + C_{44} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + (C_{12} + C_{44}) \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial z} \right) \quad (57 \text{ الف})$$

که در آن u, v, w و مؤلفه‌های جابه‌جایی \mathbf{R} اند که در رابطه (۲۹) تعریف شد. معادله‌های حرکت متناظر با $\partial^2 v / \partial t^2$ و $\partial^2 w / \partial t^2$ مستقیماً از (۵۷ الف) و با استفاده از تقارن به‌دست می‌آیند:

$$\rho \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + C_{44} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + (C_{12} + C_{44}) \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 w}{\partial y \partial z} \right) \quad (57 \text{ ب})$$

$$\rho \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} + C_{44} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) + (C_{12} + C_{44}) \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 v}{\partial y \partial z} \right) \quad (57 \text{ ج})$$

اینک پاسخهای ویژه ساده این معادله‌ها را جستجو می‌کنیم.

امواج در جهت [۱۰۰]

یکی از پاسخهای (۵۷ الف) موج طولی زیر است

$$u = u_0 \exp[i(Kx - \omega t)] \quad (58)$$

که در آن u مؤلفه x جابه‌جایی ذره است. بردار موج و حرکت ذره، هر دو، در راستای یال مکعب در جهت x هستند. در اینجا $K = 2\pi/\lambda$ بردار موج و $\omega = 2\pi\nu$ بسامد زاویه‌ای است. با نشان دادن رابطه (۵۸) در (۵۷) الف) به دست می‌آوریم

$$\omega^2 \rho = C_{11} K^2 \quad (59)$$

بنابراین سرعت ω/K موج طولی در جهت $[100]$ برابر است با

$$v_s = v\lambda = \omega/K = (C_{11}/\rho)^{1/2} \quad (60)$$

یک موج عرضی یا برشی با بردار موجی در راستای یال مکعب x و با جابه‌جایی v ذره در جهت y را در نظر بگیرید:

$$v = v_0 \exp[i(Kx - \omega t)] \quad (61)$$

با نشان دادن در (۵۷) ب) رابطه پاشیدگی به دست می‌آید

$$\omega^2 \rho = C_{44} K^2 \quad (62)$$

بنابراین سرعت ω/K موج عرضی در جهت $[100]$ برابر است با

$$v_s = (C_{44}/\rho)^{1/2} \quad (63)$$

اگر جابه‌جایی ذره در جهت z باشد نیز سرعت یکسانی به دست خواهد آمد. به این ترتیب برای \mathbf{K} موازی با $[100]$ ، دو موج برشی مستقل سرعت‌های یکسانی دارند. این موضوع برای \mathbf{K} در یک جهت عام در بلور واقعیت ندارد.

امواج در جهت $[110]$

امواجی که در جهت قطر یک وجه منتشر می‌شوند، به‌طور ویژه مورد توجه‌اند، زیرا سه ثابت کشسانی را می‌توان به‌سادگی از سه سرعت انتشار در این جهت به دست آورد.

موج برشی‌ای که در صفحه xy منتشر می‌شود و در آن جابه‌جایی ذره w در جهت z است، در نظر بگیرید،

$$w = w_0 \exp[i(K_x x + K_y y - \omega t)] \quad (64)$$

در این صورت از رابطه (۵۷) ج) داریم،

$$\omega^2 \rho = C_{44} (K_x^2 + K_y^2) = C_{44} K^2 \quad (65)$$

که مستقل از جهت انتشار در صفحه است.

امواج دیگری را در نظر بگیرید که در صفحه xy منتشر می‌شوند و در آنها حرکت ذره در صفحه xy است، یعنی

$$u = u_0 \exp[i(K_x x + K_y y - \omega t)]; \quad v = v_0 \exp[i(K_x x + K_y y - \omega t)] \quad (66)$$

از روابط (۵۷ الف) و (۵۷ ب) داریم،

$$\omega^2 \rho u = (C_{11} K_x^2 + C_{44} K_y^2) u + (C_{12} + C_{44}) K_x K_y v \quad (67)$$

$$\omega^2 \rho v = (C_{11} K_y^2 + C_{44} K_x^2) v + (C_{12} + C_{44}) K_x K_y u$$

پاسخ این جفت معادله برای موج در جهت $[110]$ به‌طور ویژه‌ای ساده است، زیرا برای این موج، $K_x = K_y = K/\sqrt{2}$. شرط وجود پاسخ آن است که دترمینان ضرایب u و v در (۶۷) باید برابر با صفر باشد:

$$\begin{vmatrix} -\omega^2 \rho + \frac{1}{2}(C_{11} + C_{44})K^2 & \frac{1}{2}(C_{11} + C_{44})K^2 \\ \frac{1}{2}(C_{12} + C_{44})K^2 & -\omega^2 \rho + \frac{1}{2}(C_{11} + C_{44})K^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (68)$$

این معادله دارای ریشه‌های زیر است

$$\omega^2 \rho = \frac{1}{2}(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})K^2; \quad \omega^2 \rho = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})K^2 \quad (69)$$

ریشه نخست معادله موج طولی و ریشه دوم، موج برشی را توصیف می‌کند. جهت جابه‌جایی ذره را چگونه تعیین می‌کنیم؟ با نشان دادن ریشه نخست در معادله بالایی (۶۷) به‌دست می‌آوریم

$$\frac{1}{2}(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})K^2 u = \frac{1}{2}(C_{11} + C_{44})K^2 u + \frac{1}{2}(C_{12} + C_{44})K^2 v \quad (70)$$

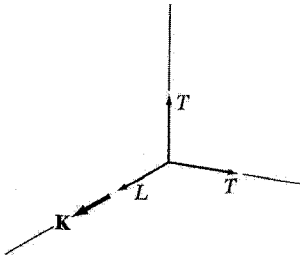
که در نتیجه رابطه مؤلفه‌های جابه‌جایی به‌صورت $u = v$ است. بنابراین جابه‌جایی ذره در راستای $[110]$ و موازی با بردار \mathbf{K} است (شکل ۲۰). با نشان دادن ریشه دوم (۴۴) در معادله بالایی (۶۷) به‌دست می‌آوریم

$$\frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})K^2 u = \frac{1}{2}(C_{11} + C_{44})K^2 u + \frac{1}{2}(C_{12} + C_{44})K^2 v \quad (71)$$

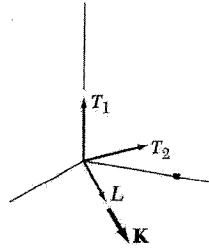
که نتیجه می‌دهد $u = -v$. جابه‌جایی ذره در راستای $[1\bar{1}0]$ و عمود بر بردار \mathbf{K} است. گزیده‌ای از مقدار ثابتهای سفتی کشسانی بی‌دررو برای بلورهای مکعبی در دماهای پایین و در دمای اتاق در جدول ۱۱ داده شده است. به روند نزولی عام ثابتهای کشسانی با افزایش دما توجه کنید. مقدارهای دیگری نیز تنها در دمای اتاق در جدول ۱۲ داده شده‌اند.

جدول ۱۱. ثابتهای سفتی کشسانی بی‌دررو برای بلورهای مکعبی در دمای پایین و در دمای اتاق
مقدارهایی که برای دمای صفر داده شده‌اند، از برون‌یابی اندازه‌گیری‌هایی که تا دمای ۴K انجام شده به دست آمده‌اند.

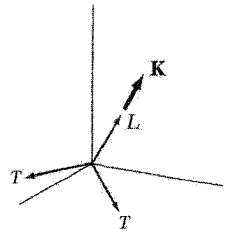
چگالی برحسب g/cm^3	ثابت‌های سفتی برحسب $10^{12} dyne/cm^2$ ($10^{11} N/m^2$)				بلور
	دما، K	C_{44}	C_{12}	C_{11}	
۱۹٫۳۱۷	۰	۱٫۶۳۱	۲٫۰۴۹	۵٫۳۲۶	W
—	۳۰۰	۱٫۶۰۷	۲٫۰۴۵	۵٫۲۳۳	
۱۶٫۶۹۶	۰	۰٫۸۷۴	۱٫۵۸۲	۲٫۶۶۳	Ta
—	۳۰۰	۰٫۸۱۸	۱٫۵۷۴	۲٫۶۰۹	
۹٫۰۱۸	۰	۰٫۸۱۸	۱٫۲۴۹	۱٫۷۶۲	Cu
—	۳۰۰	۰٫۷۵۴	۱٫۲۱۴	۱٫۶۸۴	
۱۰٫۶۳۵	۰	۰٫۵۱۱	۰٫۹۷۳	۱٫۳۱۵	Ag
—	۳۰۰	۰٫۴۶۱	۰٫۹۳۷	۱٫۲۴۰	
۱۹٫۴۸۸	۰	۰٫۴۵۴	۱٫۶۹۷	۲٫۰۱۶	Au
—	۳۰۰	۰٫۴۲۰	۱٫۶۳۱	۱٫۹۲۳	
۲٫۷۳۳	۰	۰٫۳۱۶	۰٫۶۱۹	۱٫۱۴۳	Al
—	۳۰۰	۰٫۲۸۲	۰٫۶۰۷	۱٫۰۶۸	
	۴	۰٫۲۸۶	۰٫۳۴۱	۰٫۴۱۶	K
	۲۹۵	۰٫۱۸۸	۰٫۳۱۴	۰٫۳۷۰	
۱۱٫۵۹۹	۰	۰٫۱۹۴	۰٫۴۵۴	۰٫۵۵۵	Pb
—	۳۰۰	۰٫۱۴۹	۰٫۴۲۳	۰٫۴۹۵	
۸٫۹۶۸	۰	۱٫۳۱۷	۱٫۵۰۸	۲٫۶۱۲	Ni
—	۳۰۰	۱٫۲۳۵	۱٫۵۰۰	۲٫۵۰۸	
۱۲٫۱۳۲	۰	۰٫۷۱۲	۱٫۷۶۱	۲٫۳۴۱	Pd
—	۳۰۰	۰٫۷۱۷	۱٫۷۶۱	۲٫۲۷۱	



موج در جهت $[100]$
 $L: C_{11}$
 $T: C_{44}$



موج در جهت $[110]$
 $L: \frac{1}{2}(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})$
 $T_1: C_{44}$
 $T_2: \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$



موج در جهت $[111]$
 $L: \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})$
 $T: \frac{1}{3}(C_{11} - C_{12} + C_{44})$

شکل ۲۰. ثابتهای کشسانی مؤثر سه مد موج کشسانی در جهت‌های انتشار اصلی در بلورهای مکعبی. برای انتشار در دو جهت $[100]$ و $[111]$ ، دو مد عرضی واگن‌اند.

جدول ۱۲. ثابتهای سفتی کشسانی بی‌درروی چند بلور مکعبی در دمای اتاق یا $300^\circ K$

ثابت‌های سفتی برحسب 10^{11}dyne/cm^2 یا 10^{11}N/m^2			
C_{44}	C_{12}	C_{11}	
۵٫۷۶	۱٫۲۵	۱۰٫۷۶	الماس
۰٫۴۲	۰٫۶۲	۰٫۷۳	Na
۰٫۸۸	۰٫۱۱۴	۰٫۱۳۵	Li
۰٫۶۸۰	۰٫۴۸۳	۱٫۲۸۵	Ge
۰٫۷۹۶	۰٫۶۳۹	۱٫۶۶	Si
۰٫۴۳۳	۰٫۴۰۴	۰٫۸۸۵	GaSb
۰٫۳۰۲	۰٫۳۶۷	۰٫۶۷۲	InSb
۱٫۴۸	۰٫۸۷	۲٫۸۶	MgO
۰٫۱۲۶	۰٫۱۲۴	۰٫۴۸۷	NaCl

برای بردار موج K در جهت معین و با بزرگی معلوم در هر بلور سه مد بهنجار وجود دارد. قطبش (جهت جابه‌جایی ذره) برای این مدها عموماً به‌طور دقیق موازی یا عمود بر K نیست. در جهت‌های انتشار ویژه $[100]$ ، $[111]$ ، و $[110]$ در بلور مکعبی دو مد از این سه مد برای یک K معلوم به‌گونه‌ای‌اند که

در آنها حرکت ذره به طور دقیق نسبت به K عرضی و حرکت در مد سوم دقیقاً طولی (موازی با K) است. بررسی در این جهتهای ویژه، بسیار ساده تر از جهتهای عام است.

چکیده

- برهم کنش وان دروالس (برهم کنش القاشده دوقطبی-دوقطبی) بلورهای اتمهای گاز بی اثر را مقید می کند. این برهم کنش به صورت $1/R^6$ با فاصله تغییر می کند.
- برهم کنش دفعی بین اتمها عموماً از دافعه الکتروستاتیکی توزیعیهای بار همپوشان و اصل پاؤلی ناشی می شود. این اصل الکترونیهای با اسپین موازی همپوشان را وادار می کند تا به اوربیتالهای با انرژی بالاتر بروند.
- بلورهای یونی در اثر جاذبه الکتروستاتیکی یونهای با بار مخالف مقیدند. انرژی الکتروستاتیکی ساختاری متشکل از $2N$ یون با بار q برابر است با

$$U = -N\alpha \frac{q^2}{R} = -N \sum \frac{(\pm)q^2}{r_{ij}} \quad (\text{CGS})$$

که در آن α ثابت مادلونگ و R فاصله تا همسایه اول است.

- فلزها به واسطه کاهش انرژی جنبشی الکترونیهای ظرفیتی در فلز، در مقایسه با انرژی آنها در اتم آزاد، مقیدند.
- پیوند کووالانسی با همپوشانی توزیعیهای بار الکترونیهای با اسپینهای پادموازی مشخص می شود. برای اسپینهای پادموازی، سهم پاؤلی در دافعه کم می شود، و این امر امکان همپوشانی از درجه بزرگتری را میسر می سازد. الکترونیهای همپوشان، مغزهای یونی وابسته به خود را با جاذبه الکتروستاتیکی به یکدیگر مقید می کنند.

مسائل

۱. جامد کوانتومی. انرژی دفعی غالب در جامد کوانتومی، انرژی نقطه صفر اتمهاست. یک مدل یک بعدی تقریبی از He^4 بلورین را در نظر بگیرید که در آن هر اتم He در پاره خطی به طول L محدود باشد. تابع موج درون هر پاره خط در حالت پایه به صورت نصف طول موج ذره آزاد در نظر گرفته می شود. انرژی جنبشی نقطه صفر را به ازای یک ذره پیدا کنید.

۲. انرژی چسبندگی نئون bcc و fcc . با استفاده از پتانسیل لنارد-جونز، نسبت انرژیهای چسبندگی نئون را در ساختارهای bcc و fcc محاسبه کنید. (پاسخ ۹۵۸ ر۰) مجموعهای شبکه ای برای ساختارهای

bcc عبارت‌اند از

$$\sum_j p_{ij}^{-12} = 9,11418; \quad \sum_j p_{ij}^{-6} = 12,2533$$

۳. هیدروژن مولکولی جامد. پارامترهای لئارد-جونز توسط اندازه‌گیری‌هایی که روی گاز H_2 انجام شده برابرند با $\epsilon = 50 \times 10^{-16} \text{ erg}$ و $\sigma = 2,96 \text{ \AA}$. انرژی چسبندگی H_2 را برحسب kJ بر مول پیدا کنید، محاسبات را برای ساختار fcc انجام دهید. هر مولکول H_2 را یک کره در نظر بگیرید. مقدار مشاهده‌شده انرژی چسبندگی برابر $75,1 \text{ kJ/mol}$ است، که از آنچه محاسبه کردیم به مراتب کمتر است؛ به این ترتیب تصحیح‌های کوانتومی باید اهمیت زیادی داشته باشند.

۴. امکان تشکیل بلورهای یونی R^+R^- . بلوری را در نظر بگیرید که در آن برای بستگی، از جاذبه کولنی بین یونهای مثبت و منفی بین آنها یا مولکولهای یکسان R بهره‌برداری شده باشد. باور بر آن است که این نوع بستگی در برخی مولکولهای آلی روی می‌دهد، ولی وقتی R تک‌اتم است، چنین چیزی یافت نمی‌شود. با استفاده از داده‌های جدولهای ۵ و ۶، پایداری چنین بلوری از سدیم با ساختار NaCl را نسبت به سدیم فلزی معمولی ارزیابی کنید. انرژی را به‌ازای فاصله بین‌اتمی مشاهده‌شده در سدیم فلزی محاسبه کنید، و الکترون‌خواهی سدیم را برابر 78 eV بگیرید.

۵. بلور یونی خطی. خطی شامل $2N$ یون را در نظر بگیرید که بار آنها به‌طور یک‌درمیان $\pm q$ و انرژی پتانسیل دفعی بین همسایه‌های اول به‌صورت A/R^n باشد. (الف) نشان دهید که در فاصله تعادلی داریم

$$(CGS) \quad U(R_0) = -\frac{2Nq^2 \ln 2}{R_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

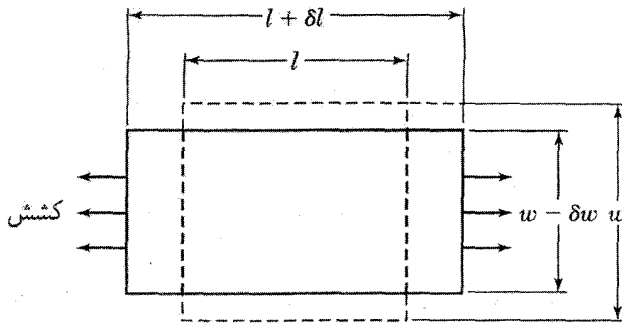
(ب) فرض کنید بلور به‌گونه‌ای متراکم شود که $R_0 \rightarrow R_0(1 - \delta)$. نشان دهید کاری که برای متراکم کردن واحد طول این بلور انجام می‌شود دارای جمله اصلی $\frac{1}{3}C\delta^2$ است، که در آن

$$(CGS) \quad C = \frac{(n-1)q^2 \ln 2}{R_0}$$

برای به‌دست آوردن نتایج در SI، q^2 را با $q^2/4\pi\epsilon_0$ تعویض کنید.

توجه: نباید انتظار داشت که این نتیجه از عبارت $U(R_0)$ به‌دست آید، باید عبارت کامل $U(R)$ را

به‌کار برد.



شکل ۲۱. مدول یانگ برای تنش کششی که در یک جهت وارد می‌شود، و وجوه نمونه آزادند، به صورت تنش بخش بر کرنش تعریف می‌شود. در این وضعیت، نسبت پواسون به صورت $(\delta w/w)/(\delta l/l)$ تعریف می‌شود.

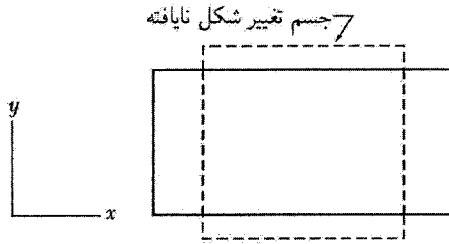
۶. ساختار ZnS مکعبی. با به‌کار بردن λ و ρ از جدول ۷ و ثابتهای مادلونگ داده‌شده در متن، انرژی چسبندگی KCl را با ساختار ZnS مکعبی، که در فصل ۱ توصیف شد، حساب کنید. این مقدار را با مقدار محاسبه‌شده برای KCl در ساختار NaCl مقایسه کنید.

۷. بلورهای یونی دوظرفیتی. اکسید باریم دارای ساختار NaCl است. انرژی چسبندگی به‌ازای یک مولکول را برای بلورهای فرضی Ba^+O^- و $Ba^{++}O^{--}$ ، نسبت به اتمهای مجزای خنثی، برآورد کنید. فاصله بین هسته‌ای مشاهده‌شده بین همسایه‌های اول برابر است با $R_0 = ۲۷۶\text{\AA}$ ؛ پتانسیلهای یونش اول و دوم Ba، به ترتیب، برابرند با ۵۱۹eV و ۹۹۶eV ؛ و الکترون‌خواهی الکترونهای اول و دوم که به اتم اکسیژن خنثی اضافه می‌شوند، به ترتیب، برابرند با ۱۵eV و ۹۰eV -. الکترون‌خواهی اول اتم اکسیژن خنثی برابر است با انرژی آزادشده در واکنش $O + e \rightarrow O^-$. الکترون‌خواهی دوم برابر است با انرژی آزادشده در واکنش $O^- + e \rightarrow O^{--}$. وقوع کدام حالت ظرفیت را پیش‌بینی می‌کنید؟ R_0 را برای هر دو شکل یکسان فرض کنید، و از انرژی دفعی چشم‌پوشی کنید.

۸. مدول یانگ و نسبت پواسون. یک بلور مکعبی تحت تنشی در جهت $[۱۰۰]$ قرار دارد. عبارتهایی برای مدول یانگ و نسبت پواسون برحسب سختی کشسانی، طبق آنچه در شکل ۲۱ تعریف شده، پیدا کنید.

۹. سرعت موج طولی. نشان دهید که سرعت یک موج طولی در جهت $[۱۱۱]$ در بلور مکعبی از $v_x = [\frac{1}{\rho}(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})]^{1/2}$ به‌دست می‌آید. راهنمایی: برای چنین موجی داریم $u = v = w$. در نظر بگیرید $u = v = w = u_0 e^{iK(x+y+z)/\sqrt{3}} e^{-i\omega t}$ ، و معادله (۵۷ الف) را به‌کار برید.

۱۰. سرعت موج عرضی. نشان دهید که سرعت موج عرضی در جهت $[۱۱۱]$ در بلور مکعبی با $v_s = [\frac{1}{\rho}(C_{11} - C_{12} + C_{44})]^{1/2}$ داده می‌شود. راهنمایی: مسئله ۹ را ببینید.



شکل ۲۲. این تغییر شکل از دو برش $e_{xx} = -e_{yy}$ تشکیل شده است.

۱۱. ثابت برشی مؤثر. نشان دهید که ثابت برشی $\frac{1}{4}(C_{11} - C_{12})$ در بلور مکعبی با قرار دادن $e_{xx} = -e_{yy} = \frac{1}{4}e$ و صفر بودن بقیه کرنشها به گونه شکل ۲۲ تعریف می شود. راهنمایی: چگالی انرژی (۴۳) را در نظر بگیرید؛ در جستجوی C' چنان برآید که $U = \frac{1}{4}C'e^2$.

۱۲. رهیافت دترمینانی. می دانیم یک ماتریس مربعی R بعدی که همه عناصر آن یک باشند، یک ریشه برابر R و $R - 1$ ریشه برابر صفر دارد. اگر همه عناصر برابر p باشند، آنگاه ریشهها R_p و صفر خواهند بود. (الف) نشان دهید که اگر عناصر قطری برابر q و بقیه عناصر جملگی p باشند، آنگاه یک ریشه برابر $q + p(R - 1)$ و $R - 1$ ریشه برابر $p - q$ خواهد داشت. (ب) با به کار بردن معادله کشسانی (۵۷) برای موجی در جهت [۱۱۱] در بلور مکعبی، نشان دهید که معادله دترمینانی که ω^2 را به صورت تابعی از K می دهد عبارت است از

$$\begin{vmatrix} q - \omega^2 \rho & p & p \\ p & q - \omega^2 \rho & p \\ p & p & q - \omega^2 \rho \end{vmatrix} = 0$$

که در آن $q = \frac{1}{4}K^2(C_{11} + 2C_{44})$ و $p = \frac{1}{4}K^2(C_{12} + C_{44})$. این عبارت شرطی را بیان می کند که به موجب آن سه معادله جبری همگن خطی برای سه مؤلفه جابه جایی u, v, w دارای پاسخ اند. با استفاده از نتیجه بند (الف) سه ریشه ω^2 را بیابید و آنها را با نتایج داده شده در مسئله های ۹ و ۱۰ مقایسه کنید.

۱۳. جهت عام انتشار. (الف) با جایگزینی در رابطه (۵۷)، معادله ای دترمینانی بیابید که شرطی را بیان کند که جابه جایی

$$\mathbf{R}(\mathbf{r}) = [u_0 \hat{x} + v_0 \hat{y} + w_0 \hat{z}] \exp[i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$$

پاسخ معادله موج کشسان در بلور مکعبی باشد. (ب) مجموع ریشه های دترمینان برابر است یا مجموع

عناصر قطری a_{ii} . از بند (الف) نشان دهید که مجموع مربعات سه سرعت موج کشسان در هر جهت، در بلور مکعبی برابر است با $(C_{11} + 2C_{44})/\rho$. به خاطر داشته باشید که $v_s^2 = w^2/K^2$.

۱۴. محکهای پایداری. محکی که بلور مکعبی با یک اتم در یاختهٔ بسیط در مقابل تغییر شکلهای همگن پایدار باشد آن است که چگالی انرژی (۴۳) برای همهٔ ترکیبهای مؤلفه‌های کرنش مثبت باشد. این امر چه محدودیتهایی روی ثابتهای سفتی کشسانی وضع می‌کند؟ (به زبان ریاضی، مسئله عبارت است از یافتن شرایطی که یک عبارت حقیقی متقارن مربعی قطعاً مثبت باشد. پاسخ در کتابهای جبر داده شده است.^۱

۱. کتاب زیر را نیز ببینید:

Korn and Korn, *Mathematical Handbook*, McGraw-Hill, 1961, Sec. 13.5-6

پاسخ $C_{44} > 0$, $C_{11} > 0$, $C_{11}^2 - C_{12}^2 > 0$ ، و $C_{11} + 2C_{12} > 0$. برای مثالی از ناپایداری، که وقتی $C_{11} \cong C_{12}$ ، مقالهٔ زیر را ببینید:

L. R. Testardi et al., *Phys. Rev. Letters* **15**, 250 (1965).

فونونها (۱). ارتعاشهای بلوری

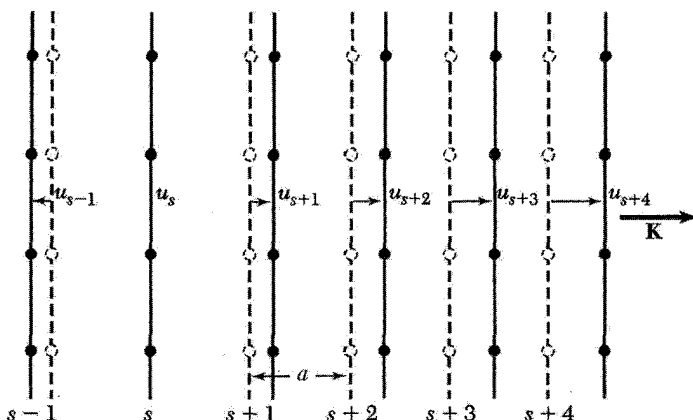
ارتعاشهای بلورهای با پایه تک‌اتمی

ارتعاشهای کشسان بلوری را که در یاخته بسیط آن یک اتم وجود دارد، در نظر می‌گیریم. می‌خواهیم بسامد موج کشسان را برحسب بردار موجی که موج را توصیف می‌کند و ثابتهای کشسان پیدا کنیم.

در بلورهای مکعبی آسانترین حل ریاضی این مسئله در جهت‌های انتشار $[100]$ ، $[110]$ ، و $[111]$ است. این جهت‌های جهت‌های لبه مکعب، قطر وجوه، و قطر مکعب‌اند. وقتی موجی در یکی از این جهت‌ها منتشر می‌شود، همه صفحات اتمی به‌طور هم‌فاز موازی با جهت بردار موج یا عمود بر آن جابه‌جا می‌شوند. جابه‌جایی صفحه S از مکان تعادلش را می‌توان با تک‌مختصه u_s توصیف کرد. در این صورت با یک مسئله یک‌بعدی روبه‌رویم. برای هر بردار موج سه مد، یکی با قطبش طولی (شکل ۲) و دو تا با قطبش عرضی (شکل ۳)، وجود دارد.

میدان	نام	
—	الکترون	→
موج الکترومغناطیسی	فوتون	~~~~~
موج کشسان	فونون	⌞⌞⌞
موج الکترونی جمعی	پلاسمون	— — —
موج مغناطشی	مگنون	⌚⌚⌚
الکترون + تغییر شکل کشسان	پولارون	-
موج قطبشی	اکسیتون	-

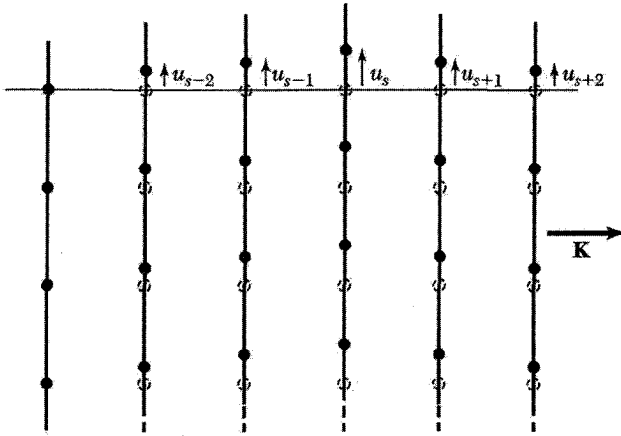
شکل ۱. برانگیختگیهای بنیادی مهم در جامدات.



شکل ۲. صفحات اتمی در تعادل (خطوط خط‌چین). جابه‌جایی صفحات اتمی برای موج طولی (خطوط پر). مختصه u اندازه جابه‌جایی صفحات را نشان می‌دهد.

فرض می‌کنیم پاسخ کشسانی بلور تابعی خطی از نیروها باشد. این مطلب معادل این فرض است که انرژی کشسانی تابع درجه دومی از جابه‌جایی نسبی هر دو نقطه در بلور باشد. جمله‌هایی در انرژی که برحسب جابه‌جاییهای خطی‌اند، در حالت تعادل از بین می‌روند. کمینه را در شکل ۶ از فصل ۳ نگاه کنید. از جملات مرتبه سه و بالاتر در تغییر شکلهای کشسان نسبتاً کوچک می‌توان صرف‌نظر کرد.

فرض می‌کنیم نیروی وارد بر صفحه S ، ناشی از جابه‌جایی صفحه $s + p$ ، با تفاضل جابه‌جاییهای



شکل ۳. صفحات اتمی حین عبور موج عرضی جابه‌جا شده‌اند.

این دو صفحه، یعنی $u_{s+p} - u_s$ متناسب باشد. برای اختصار تنها برهم‌کنشهای نزدیکترین همسایه را، با $p = \pm 1$ بررسی می‌کنیم. نیروی کل وارد بر s ناشی از صفحات $s \pm 1$ برابر است با:

$$F_s = C(u_{s+1} - u_s) + C(u_{s-1} - u_s) \quad (1)$$

این عبارت برحسب جابه‌جاییها خطی و به شکل قانون هوک است.

کمیت C ، ثابت نیرو بین صفحات نزدیکترین همسایه است و برای امواج عرضی و طولی متفاوت است. از اینجا به بعد مناسبتر است فرض کنیم C برای یک اتم از صفحه تعریف شده است، بنابراین F_s نیروی وارد بر یک اتم در صفحه s است.

معادله حرکت اتم در صفحه S عبارت است از

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s) \quad (2)$$

که در آن M جرم اتم است. در پی پاسخهایی هستیم که در آنها همه جابه‌جاییها دارای وابستگی زمانی $\exp(-i\omega t)$ باشند. در این صورت، $d^2 u_s / dt^2 = -\omega^2 u_s$ و (۲) به صورت زیر درمی‌آید:

$$-M\omega^2 u_s = C(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s) \quad (3)$$

این رابطه یک معادله تفاضلی برحسب جابه‌جاییهای u است، که پاسخهایی به صورت چنین موج متحرکی دارد:

$$u_{s\pm 1} = u \exp(isKa) \exp(\pm iKa) \quad (4)$$

در این رابطه a فاصلهٔ بین صفحات و K بردار موج است. اندازه‌ای که برای a به‌کار می‌رود، به جهت K بستگی دارد.

با رابطهٔ (۴) و استفاده از معادلهٔ (۳):

$$-\omega^2 M u \exp(isKa) = Cu \{ \exp[i(s+1)Ka] + \exp[i(s-1)Ka] - 2 \exp(isKa) \} \quad (5)$$

با حذف $u \exp(isKa)$ از دو طرف داریم

$$\omega^2 M = -C [\exp(iKa) + \exp(-iKa) - 2] \quad (6)$$

با استفاده از اتحاد $2 \cos Ka = \exp(iKa) + \exp(-iKa)$ ، رابطهٔ پاشیدگی $\omega(K)$ به‌دست می‌آید.

$$\omega^2 = (2C/M)(1 - \cos Ka) \quad (7)$$

مرز اولین منطقهٔ بریلوئن در $K = \pm\pi/a$ قرار دارد. از رابطهٔ (۷) نشان می‌دهیم که شیب ω برحسب K در مرز منطقه، $K = \pm\pi/a$ ، صفر است:

$$d\omega^2/dK = (2Ca/M) \sin Ka = 0 \quad (8)$$

زیرا $\sin Ka = \sin(\pm\pi) = 0$. اهمیت خاص بردارهای موج فونونی که روی مرز منطقهٔ بریلوئن قرار دارند بعداً در رابطهٔ (۱۲) بیان می‌شود.

با یک اتحاد مثلثاتی، رابطهٔ (۷) به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\omega^2 = (4C/M) \sin^2 \frac{1}{2} Ka ; \omega = (4C/M)^{1/2} |\sin \frac{1}{2} Ka| \quad (9)$$

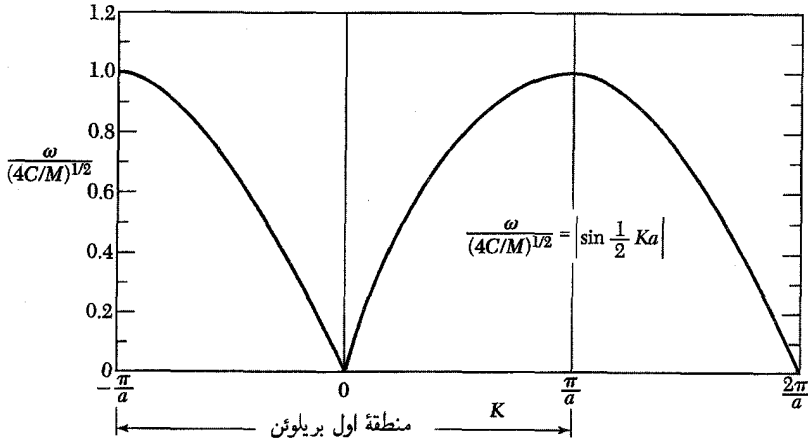
در شکل ۴ نمودار ω برحسب K ارائه شده است.

منطقهٔ اول بریلوئن

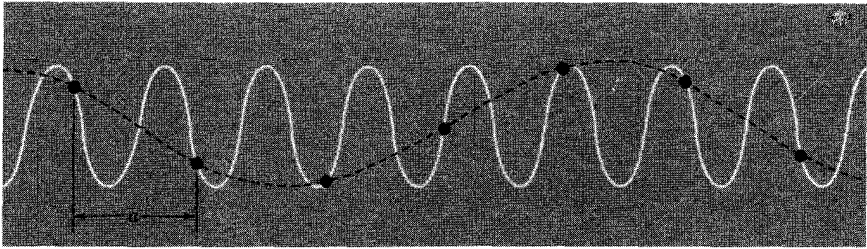
برای امواج کشسان چه گستره‌ای از K دارای معنای فیزیکی است؟ فقط آنهایی که در منطقهٔ اول بریلوئن واقع‌اند. نسبت جابه‌جاییهای دو صفحهٔ متوالی، با استفاده از رابطهٔ (۴)، با رابطهٔ زیر داده می‌شود:

$$\frac{u_{s+1}}{u_s} = \frac{u \exp[i(s+1)Ka]}{u \exp(isKa)} = \exp(iKa) \quad (10)$$

برای فاز Ka گسترهٔ $-\pi$ تا $+\pi$ همهٔ مقادیر مستقل تابع نمایی را به‌دست می‌دهد.



شکل ۴. نمودار ω بر حسب K . ناحیه $\frac{1}{a} K \gg \lambda \ll a$ یا $\lambda \ll a$ به تقریب پیوستاری مربوط است؛ در اینجا ω مستقیماً با K متناسب است.



شکل ۵. موجی که با منحنی توپر مشخص شده است، هیچ‌گونه اطلاعاتی اضافه بر منحنی خط‌چین دربر ندارد. فقط طول موجهای بزرگتر از $2a$ برای نمایش حرکت مورد نیاز است.

گستره مقادیر مستقل K ، به‌گونه زیر مشخص می‌شود:

$$-\frac{\pi}{a} \leq K \leq \frac{\pi}{a} \quad \text{یا} \quad -\pi \leq Ka \leq \pi$$

همان‌گونه که در فصل ۲ تعریف شد این گستره، منطقه اول بریلوئن شبکه خطی است. مقادیر فرین عبارت‌اند از $\pm\pi/a$. $K_{\max} = \pm\pi/a$. مقادیر K خارج از منطقه اول بریلوئن (شکل ۵) صرفاً همان حرکت‌هایی را در شبکه ایجاد می‌کنند که مقادیر داخل حدود $\pm\pi/a$ به‌وجود می‌آورند.

از یک مقدار K خارج از این حدود می‌توان مضرب درستی از $2\pi/a$ کم کرد و بردار موجی داخل این حدود را به‌دست آورد. فرض کنید K خارج از منطقه اول قرار گرفته باشد، ولی بردار موج K' که با

رابطه $K' = K - 2\pi n/a$ (عدد درستی است) تعریف می‌شود، در درون منطقه اول قرار گیرد. در این صورت، نسبت جابه‌جاییها، رابطه (1°) ، با توجه به $\exp(i2\pi n) = 1$ به صورت زیر درمی‌آید:

$$u_{s+1}/u_s = \exp(iKa) \equiv \exp(i2\pi n) \exp[i(Ka - 2\pi n)] \equiv \exp(iK'a) \quad (11)$$

بنابراین همیشه می‌توان جابه‌جایی را با بردار موجی داخل منطقه اول توصیف کرد. خاطر نشان می‌کنیم که $2\pi n/a$ بردار شبکه وارون است، زیرا $2\pi/a$ بردار شبکه وارون است. بنابراین با کم کردن یک بردار شبکه وارون مناسب از K ، همواره یک بردار موج معادل در منطقه اول به دست می‌آید.

در روی مرزهای منطقه بریلوئن، $K_{\max} = \pm\pi/a$ ، پاسخ $u_s = u \exp(isKa)$ نمایشگر موج متحرک نیست، بلکه موج ایستاده را نمایش می‌دهد. در مرزهای منطقه خواهیم داشت: $sK_{\max}a = \pm s\pi$ در نتیجه

$$u_s = u \exp(\pm is\pi) = u(-1)^s \quad (12)$$

که موج ایستاده است: آنها به‌طور یک در میان در فازهای مخالف نوسان می‌کنند، زیرا برحسب اینکه s زوج یا فرد باشد، $u_s = \pm 1$ خواهد بود. این موج به سمت راست یا چپ حرکتی نخواهد داشت.

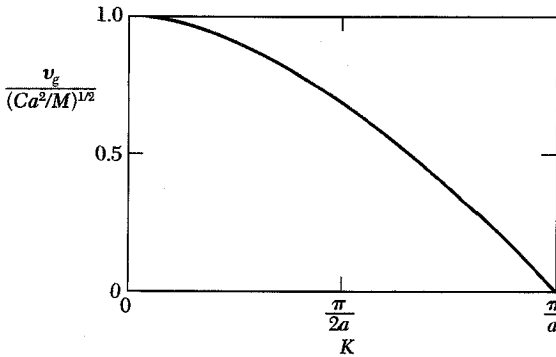
این وضعیت با بازتاب براگ پرتوهای x معادل است: هنگامی که شرط براگ برآورده شود، موج متحرک نمی‌تواند در شبکه منتشر شود، بلکه در اثر بازتابهای پی‌درپی به عقب و جلو، موج ایستاده به وجود می‌آید.

مقدار بحرانی $K_{\max} = \pm\pi/a$ که در اینجا پیدا کردیم در شرط براگ، $2d \sin \theta = n\lambda$ ، صدق می‌کند: داریم $\theta = \pi/2$ ، $d = a$ ، $K = 2\pi/\lambda$ ، $n = 1$ ، در نتیجه $\lambda = 2a$. در مورد پرتوهای x می‌توان n را علاوه بر یک، برابر اعداد درست دیگر نیز در نظر گرفت، زیرا دامنه امواج الکترومغناطیسی در فضای بین آنها نیز معنا دارد، ولی دامنه جابه‌جایی موج کشسان معمولاً فقط روی خود آنها دارای معناست.

سرعت گروه

سرعت انتشار بسته موج را سرعت گروه می‌نامیم که از این رابطه به دست می‌آید

$$v_g = d\omega/dK$$



شکل ۶. سرعت گروه v_g برحسب K ، برای مدل
شکل ۴. در مرز منطقه، $K = \pi/a$ ، سرعت
گروه صفر است.

یا

$$v_g = \text{grad}_{\mathbf{K}} \omega(\mathbf{K}) \quad (۱۳)$$

که گرادیان بسامد نسبت به \mathbf{K} است. سرعت گروه عبارت است از سرعت انتشار انرژی در محیط.
با استفاده از رابطه پاشیدگی خاص رابطه (۹) سرعت گروه (شکل ۶) برابر است با

$$v_g = \left(\frac{Ca^2}{M} \right)^{1/2} \cos \frac{1}{4} Ka \quad (۱۴)$$

که در لبه منطقه، $K = \pi/a$ ، برابر با صفر است. در اینجا موج، مانند (۱۲)، یک موج ایستاده است و
انتظار داریم سرعت انتشار در موج ایستاده صفر باشد.

حد طول موج بلند

برای $Ka \ll 1$ داریم، $\cos Ka \equiv 1 - 1/2(Ka)^2$ در نتیجه رابطه پاشیدگی (۷) به این صورت
درمی آید،

$$\omega^2 = (C/M) K^2 a^2 \quad (۱۵)$$

این نتیجه که بسامد در حد طول موج بلند با بردار موج متناسب است، بیانگر آن است که سرعت صوت
در این حد مستقل از بسامد است. بدین ترتیب رابطه $v = \omega/K$ ، در حد پیوستاری $Ka \ll 1$ ، دقیقاً
همانند نظریه پیوستاری امواج کشسانی است.

تعیین ثابتهای نیرو به وسیله آزمایش

نیروهای مؤثر در فلزات ممکن است کاملاً بلندبرد باشند و از طریق دریای الکترون رسانش از یک یون به
یون دیگر حمل شوند. برهمکنشهایی یافت شده اند که صفحات اتمی ای که تا 20° صفحه از یکدیگر فاصله
دارند، به هم مربوط می کنند. با استفاده از رابطه پاشیدگی تجربی برای ω ، می توانیم عبارتی در مورد

برد نیروها به دست آوریم. عمومیت دادن رابطهٔ پاشیدگی (۷) به p عدد از نزدیکترین صفحات، به آسانی به دست می‌آید:

$$\omega^2 (\nu/M) \sum_{p>0} C_p (1 - \cos pKa) \quad (الف ۱۶)$$

با ضرب کردن دو طرف رابطهٔ (۷) در $\cos rKa$ ، که در آن r عدد درستی است، و انتگرال‌گیری روی گسترهٔ مقادیر مستقل K ، ثابتهای نیروی بین صفحه‌های C_p به دست می‌آیند:

$$\begin{aligned} M \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dK \omega_K^2 \cos rKa &= \nu \sum_{p>0} C_p \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dK (1 - \cos pKa) \cos rKa \\ &= -\nu \pi C_r / a \end{aligned} \quad (ب ۱۶)$$

این انتگرال فقط به ازای $p = r$ صفر نمی‌شود. در نتیجه

$$C_p = -\frac{Ma}{\nu \pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dK \omega_K^2 \cos pKa \quad (۱۷)$$

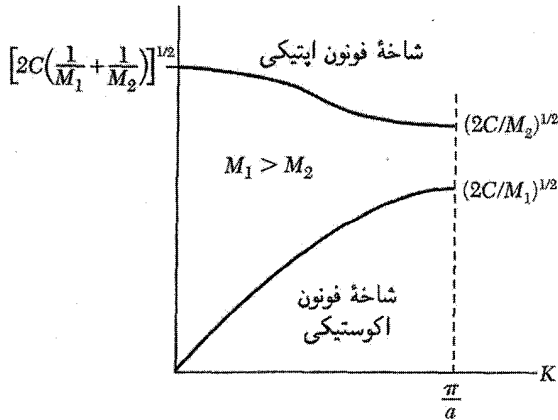
ثابت نیرو را در گسترهٔ pa برای ساختاری با یک پایهٔ تک‌اتمی ارائه می‌دهد.

دو اتم در پایهٔ بسیط

در بلورهایی که بیش از یک اتم در یاختهٔ بسیط دارند، رابطهٔ پاشیدگی فونونی ویژگیهای جدیدی را نشان می‌دهد. مورد دوم اتم در یاختهٔ بسیط، مانند NaCl یا ساختار الماس، را در نظر می‌گیریم. در یک جهت انتشار معین، رابطهٔ پاشیدگی ω برحسب K برای هر یک از مدهای قطبشی دو شاخه با نامهای اکوستیکی و اپتیکی دارد (شکل ۷). مدهای اکوستیکی طولی LA و اکوستیکی عرضی TA، و مدهای اپتیکی طولی LO و اپتیکی عرضی TO را خواهیم داشت.

اگر p اتم در یاختهٔ بسیط وجود داشته باشد، رابطهٔ پاشیدگی دارای $3p$ شاخه خواهد بود که ۳ تای آنها اکوستیکی و $3 - 3p$ تای دیگر اپتیکی‌اند. بنابراین ژرمانیم (شکل ۸ الف) و KBr (شکل ۸ ب)، که هر یک دو اتم در یاختهٔ بسیط دارند، دارای شش شاخه‌اند، یک LA، یا LO، دو TA، و دو TO.

تعیین تعداد شاخه‌ها از تعداد درجات آزادی اتمها ناشی می‌شود. اگر N یاختهٔ بسیط داشته باشیم و در هر یک p اتم موجود باشد، pN اتم خواهیم داشت. هر اتم دارای سه درجهٔ آزادی است، که هر درجهٔ آن به ازای یکی از جهتهای x ، y ، و z است. در نتیجه درجهٔ آزادی کل بلور برابر $3pN$



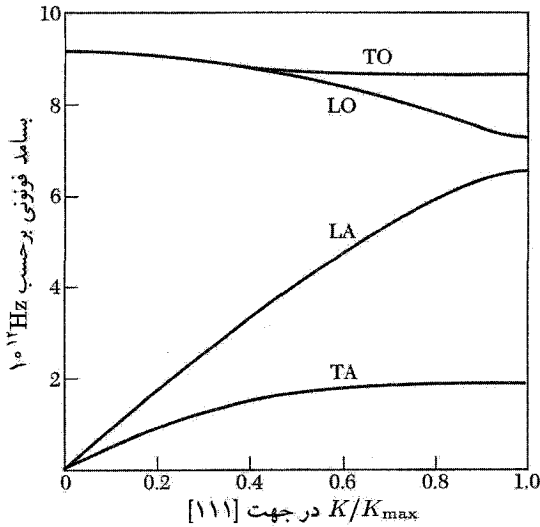
شکل ۷. شاخه‌های اپتیکی و اکوستیکی رابطه پاشیدگی در شبکه خطی دوانمی. بسامدهای حدی در $K = 0$ و $K = K_{\max} = \pi/a$ نشان داده شده‌اند. ثابت شبکه برابر a است.

می‌شود. در منطقه بریلوئن تعداد مقادیر مجاز K در یک تک‌شاخه درست برابر N است^۱. بنابراین شاخه LA و دو شاخه TA روی هم دارای $3N$ مد خواهند بود که $3N$ درجه از تعداد کل درجات آزادی را می‌توان از این راه توضیح داد. $(3p - 3)N$ درجه آزادی باقیمانده در شاخه‌های اپتیکی قرار می‌گیرند.

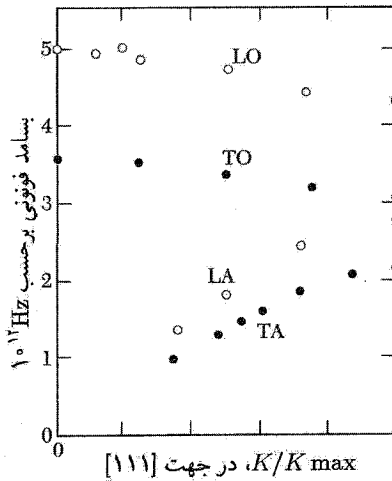
یک بلور مکعبی را در نظر بگیرید که در آن اتمها با جرم M_1 روی یک مجموعه از صفحات و اتمهای با جرم M_2 روی صفحاتی بین صفحات مجموعه اول قرار می‌گیرند (شکل ۹). لزومی ندارد جرمها متفاوت باشند، ولی اگر دو اتم پایه در جایگاههای غیر معادل باشند، ثابتهای نیرو یا جرمها متفاوت خواهند بود. فرض می‌کنیم a فاصله تکرار شبکه در جهت عمود بر صفحات مورد نظر شبکه باشد. امواجی را مورد بررسی قرار می‌دهیم که در جهتی تقارنی منتشر شوند که برای آن هر تک‌صفحه فقط شامل یک نوع یون باشد؛ چنین جهتهایی عبارت‌اند از $[111]$ در ساختار NaCl و $[100]$ در ساختار C_sCl .

معادلات حرکت را با این فرض می‌نویسیم که هر صفحه فقط با صفحات همسایه اول خود برهم‌کنش دارد و اینکه ثابتهای نیرو بین تمام زوج صفحات همسایه اول یکسان‌اند. با مراجعه به شکل ۹ به دست

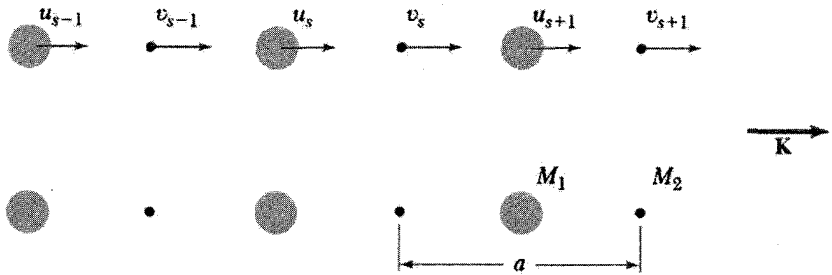
۱. در فصل ۵ با به‌کار بردن شرایط دوره‌ای در مورد مدهای یک بلور به حجم V ، نشان می‌دهیم که در حجم $(2\pi)^3/V$ در فضای فوریه یک مقدار K وجود دارد. حجم منطقه بریلوئن برابر $(2\pi)^3/V_c$ است که در آن V_c حجم یاخته بسط بلور است. بنابراین تعداد مقادیر مجاز K در منطقه بریلوئن برابر است با V/V_c همان N ، یعنی تعداد یاخته‌های بسط در بلور است.



شکل ۸ الف. روابط پاشیدگی فونونی در جهت $[111]$ در ژرمانیم در دمای $80^\circ K$. دو شاخه فونون TA در مرز منطقه، $K_{max} = (2\pi/a)(\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{\sqrt{3}})$ افقی‌اند. شاخه‌های LO و TO در $K = 0$ بر هم منطبق می‌شوند، که نیز نتیجه‌ای است از تقارن بلوری Ge. این نتایج از پراکندگی ناکشسان نوترونها حاصل شده‌اند.



شکل ۸ ب. منحنیهای پاشیدگی در جهت $[111]$ در بلور KBr در دمای $90^\circ K$. برون‌یابی شاخه‌های LO و TO به $K = 0$ را ω_L و ω_T می‌نامند.



شکل ۹. ساختار بلور دواتمی با جرمهای M_1 و M_2 که با ثابت نیروی C بین صفحات مجاور به هم مربوط می‌شوند. جابه‌جایی اتمهای M_1 را با $u_{s-1}, u_s, u_{s+1}, \dots$ و جابه‌جایی اتمهای M_2 را با $v_{s-1}, v_s, v_{s+1}, \dots$ نشان می‌دهیم. فاصله تکرار شبکه در جهت بردار موج K برابر a است. اتمها در مکانهای جابه‌جانشده خود نشان داده شده‌اند.

می‌آوریم،

$$M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(v_s + v_{s-1} - 2u_s); \quad (18)$$

$$M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = C(u_{s+1} + u_s - 2v_s)$$

به دنبال پاسخی به شکل موج متحرک می‌گردیم که اکنون دامنه‌اش روی صفحات متوالی، به ترتیب، برابر مقادیر متفاوت u و v باشد:

$$u_s = u \exp(isKa) \exp(-i\omega t); \quad v_s = v \exp(isKa) \exp(-i\omega t). \quad (19)$$

در شکل ۹، a را فاصله نزدیکترین صفحات مشابه، نه نزدیکترین صفحات، تعریف می‌کنیم. با جایگذاری معادلات (۱۹) در رابطه (۱۸) داریم

$$-\omega^2 M_1 u = Cv[1 + \exp(-iKa)] - 2Cu; \quad (20)$$

$$-\omega^2 M_2 v = Cu[\exp(iKa) + 1] - 2Cv$$

این معادلات خطی همگن فقط وقتی دارای پاسخ غیرصفر خواهند بود که دترمینان ضرایب u و v صفر باشد:

$$\begin{vmatrix} 2C - M_1 \omega^2 & -C[1 + \exp(iKa)] \\ -C[1 + \exp(iKa)] & 2C - M_2 \omega^2 \end{vmatrix} = 0. \quad (21)$$

یا

$$M_1 M_1 \omega^4 - 2C(M_1 + M_2)\omega^2 + 2C^2(1 - \cos Ka) = 0 \quad (22)$$

این معادله را می‌توان دقیقاً برای ω^2 حل کرد، ولی ساده‌تر آن است که حالات حدی $1 \ll Ka$ و $\cos Ka \cong 1 - \frac{1}{2}K^2 a^2 + \dots$ داریم برای مقادیر کوچک Ka بررسی کنیم. دو ریشه به صورت زیر خواهند بود.

$$\omega^2 \cong 2C \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \quad (\text{شاخهٔ اپتیکی}) \quad (23)$$

$$\omega^2 \cong \frac{\frac{1}{2}C}{M_1 + M_2} K^2 a^2 \quad (\text{شاخهٔ اکوستیکی}) \quad (24)$$

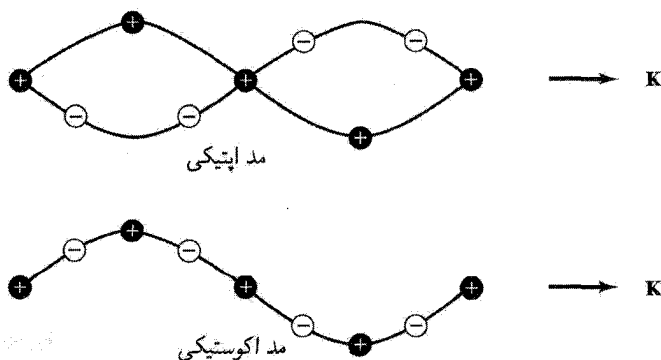
گسترهٔ منطقهٔ اول بریلوئن چنین است $-\pi/a \leq K \leq \pi/a$ ، که در آن a فاصلهٔ تکرار شبکه است. در $K_{\max} = \pm\pi/a$ ریشه‌ها عبارت‌اند از

$$\omega^2 = \frac{2C}{M_1}; \quad \omega^2 = \frac{2C}{M_2} \quad (25)$$

بستگی ω به K برای $M_1 > M_2$ در شکل ۷ نشان داده شده است.

جابه‌جایی‌های ذره در شاخه‌های اکوستیکی عرضی (TA) و اپتیکی عرضی (TO) در شکل ۱۰ نشان داده شده‌اند. در $K = 0$ ، با جایگذاری رابطهٔ (۲۳) در (۲۰)، برای شاخهٔ اپتیکی خواهیم داشت:

$$\frac{u}{v} = -\frac{M_2}{M_1} \quad (26)$$



شکل ۱۰. امواج اپتیکی و اکوستیکی عرضی در شبکهٔ خطی دواتمی. که با جابه‌جایی ذرات در این دو مد برای طول موجهای یکسان نمایش داده شده‌اند.

اتمها مخالف یکدیگر ارتعاش می‌کنند، ولی مرکز جرمشان ثابت است. اگر دو اتم حامل بارهای مخالف باشند، مانند شکل ۱۰، چنین حرکتی را می‌توان به کمک میدان الکتریکی موج نوری برانگیخت و به این دلیل این شاخه را شاخهٔ اپتیکی می‌نامند. همان‌گونه که از هر یک از معادلات (۲۰) نتیجه می‌شود، نسبت u/v برای یک مقدار عمومی K مختلط خواهد بود. یک پاسخ دیگر برای نسبت دامنه‌ها در K ی کوچک به صورت $u = v$ است که به‌ازای حد $K = 0$ در رابطه (۲۴) به‌دست می‌آید. اتمها (و مرکز جرمشان)، مانند ارتعاشات اکوستیکی با طول موج بلند، با یکدیگر حرکت می‌کنند و این دلیل اطلاق نام شاخهٔ اکوستیکی است.

برای بعضی از بسامدها، در اینجا برای بسامدهای بین $(2C/M_1)^{1/2}$ و $(2C/M_2)^{1/2}$ ، پاسخهای موج‌گونه وجود ندارد. این امر خصلت مشخصهٔ امواج کشسان در شبکه‌های چنداتی است. در مرز منطقهٔ اول بریلوئن، $K_{\max} = \pm\pi/a$ ، یک گاف بسامد وجود دارد.

کوانتس امواج کشسان

انرژی ارتعاش شبکه کوانتومی است. کوانتوم انرژی، در تشابه با فوتون در موج الکترومغناطیسی، فوتون نامیده می‌شود. انرژی مد کشسان یا بسامد زاویه‌ای ω ، هنگامی که این مد تا عدد کوانتومی n برانگیخته شود، یعنی وقتی با n فوتون اشغال شود، برابر است با

$$\epsilon = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad (27)$$

جملهٔ $\frac{1}{2}\hbar\omega$ انرژی نقطهٔ صفر این مد است. این انرژی هم در مورد فوتونها و هم در مورد فوتونها رخ می‌دهد، و این امر نتیجه‌ای است از معادل بودن آنها با یک نوسانگر هماهنگ کوانتومی با بسامد ω ؛ برای این نوسانگر نیز ویژه‌مقدارهای انرژی برابرند با $(n + 1/2)\hbar\omega$. نظریهٔ کوانتومی فوتونها در پیوست (ج) توضیح داده شده است.

می‌توان میانگین مربع دامنهٔ فوتونها را کوانتیده کرد. مد موج ایستاده با دامنهٔ

$$u = u_0 \cos Kx \cos \omega t$$

را در نظر می‌گیریم، که در آن u جابه‌جایی یک عنصر حجم از مکان ترازمندی آن در بلور است. انرژی این مد، مانند هر نوسانگر هماهنگ، نیمی جنبشی و نیمی پتانسیل است. چگالی انرژی جنبشی برابر است با $(1/2)\rho(\partial u/\partial t)^2$ ، که در آن ρ چگالی جرمی است. در بلوری با حجم V ، انتگرال حجمی انرژی جنبشی برابر $(1/4)\rho V \omega^2 u_0^2 \sin^2 \omega t$ خواهد بود. میانگین زمانی انرژی جنبشی برابر است

با

$$\frac{1}{\lambda} \rho V \omega^2 u_0^2 + \frac{1}{\lambda} \left(n + \frac{1}{4} \right) \hbar \omega \quad (28)$$

زیرا $\langle \sin^2 \omega t \rangle = \frac{1}{2}$. مربع دامنه این مد عبارت است از

$$u_0^2 = 4 \left(n + \frac{1}{4} \right) \hbar / \rho V \omega \quad (29)$$

این رابطه، جابه‌جایی در یک مد مشخص را به اشغال فونونی آن مد، یعنی n ، مربوط می‌سازد.

علامت ω چیست؟ معادلات حرکتی مانند رابطه (۲)، معادلاتی برای ω^2 هستند، و اگر ω^2 مثبت باشد، ω می‌تواند دارای علامت $+$ یا $-$ باشد. ولی انرژی فونون باید مثبت باشد. لذا مناسب است بنابه قرارداد ω را مثبت بگیریم. اگر شبکه ناپایدار باشد، ω^2 منفی خواهد بود و ω موهومی خواهد شد.

تکانه فونون

یک فونون با بردار موج K با ذراتی مانند فوتونها، نوترونها، و الکترونها به‌گونه‌ای برهم‌کنش می‌کند که گویی دارای تکانه $\hbar K$ است. اما، فونون حامل تکانه فیزیکی نیست.

دلیل اینکه فونونهای شبکه تکانه حمل نمی‌کنند این است که مختصات فونون (بجز برای $K = 0$) به مختصات نسبی اتمها بستگی دارد. بنابراین در مولکول H_2 مختصات ارتعاشی بین هسته‌های $1 - 2$ یک مختصات نسبی است و حامل تکانه خطی نیست؛ مختصات مرکز جرم $\frac{1}{2}(1 + 2)$ به مد یکنواخت $K = 0$ مربوط است و می‌تواند حامل تکانه خطی باشد.

در بلورها، برای گذارهای مجاز بین حالت‌های کوانتومی، قواعد گزینش بردار موج وجود دارد. در فصل ۲ دیدیم که در پراکندگی کشسان فوتون پرتو x به‌وسیله بلور، قاعده گزینش زیر بر بردارهای موج حاکم است

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G} \quad (30)$$

که در آن \mathbf{G} یک بردار در شبکه وارون، \mathbf{k} بردار موج فوتون فرودی و \mathbf{k}' بردار موج فوتون پراکنده شده است. در فرایند بازتاب، بلور کاملاً با تکانه $-\hbar \mathbf{G}$ پس‌زده می‌شود، ولی به این تکانه مد یکنواخت به‌ندرت صریحاً توجه می‌شود.

معادله (۳۰) مثالی از این قاعده است که در شبکه دوره‌ای بردار موج کل موجهایی که برهم‌کنش می‌کنند، با امکان افزودن بردار شبکه وارون \mathbf{G} ، پایسته است. تکانه واقعی کل دستگاه همیشه دقیقاً پایسته

است. اگر پراکندگی فوتون ناکشسان باشد و فونونی با بردار موج \mathbf{K} ایجاد شود، قاعده گزینش بردار موج به صورت زیر درمی آید

$$\mathbf{k}' + \mathbf{K} = \mathbf{k} + \mathbf{G} \quad (31)$$

اگر در این فرایند فونون \mathbf{K} جذب شود، رابطه زیر را خواهیم داشت

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{K} + \mathbf{G} \quad (32)$$

روابط (۳۱) و (۳۲) تعمیم طبیعی رابطه (۳۰) اند.

پراکندگی ناکشسان توسط فونونها

پراکندگی ناکشسان نوترونها با گسیل یا جذب فونون، متداولترین روش برای تعیین تجربی رابطه پاشیدگی $\omega(\mathbf{K})$ ی فونونهاست. نوترون عمدتاً از طریق برهمکنش با هسته‌های اتمی با شبکه بلور مواجه می‌شود. سینماتیک پراکندگی باریکه نوترونی توسط شبکه بلور با اصل پایستگی انرژی و قاعده همگانی گزینش بردار موج زیر توصیف می‌شود:

$$\mathbf{k} + \mathbf{G} = \mathbf{k}' \pm \mathbf{K} \quad (33)$$

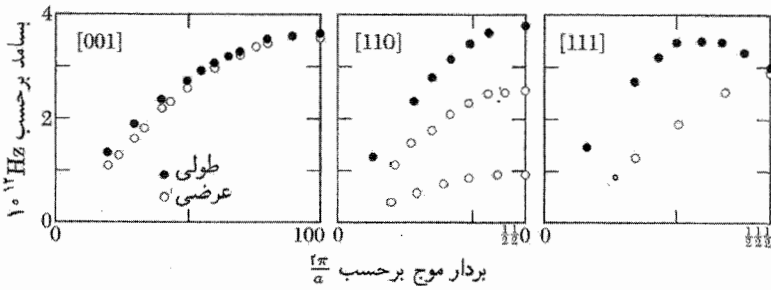
در اینجا \mathbf{K} بردار موج فونون ایجادشده (+) یا جذبشده (-) در این فرایند و \mathbf{G} بردار شبکه وارون است. برای فونون، \mathbf{G} را چنان برمی‌گزینیم که \mathbf{K} در منطقه اول بریلوئن قرار گیرد.

انرژی جنبشی نوترون فرودی برابر است با $p^2/2M_n$ ، که در آن M_n جرم نوترون است. تکانه \mathbf{p} برابر است با $\hbar^2 \mathbf{k}$ ، که در آن \mathbf{k} بردار موج نوترون است. بنابراین انرژی جنبشی نوترون فرودی برابر $\hbar^2 \mathbf{k}^2/2M_n$ خواهد بود. اگر \mathbf{k}' بردار موج نوترون پراکنده شده باشد، انرژی آن برابر $\hbar^2 \mathbf{k}'^2/2M_n$ خواهد بود. بیان اصل پایستگی انرژی به این صورت است

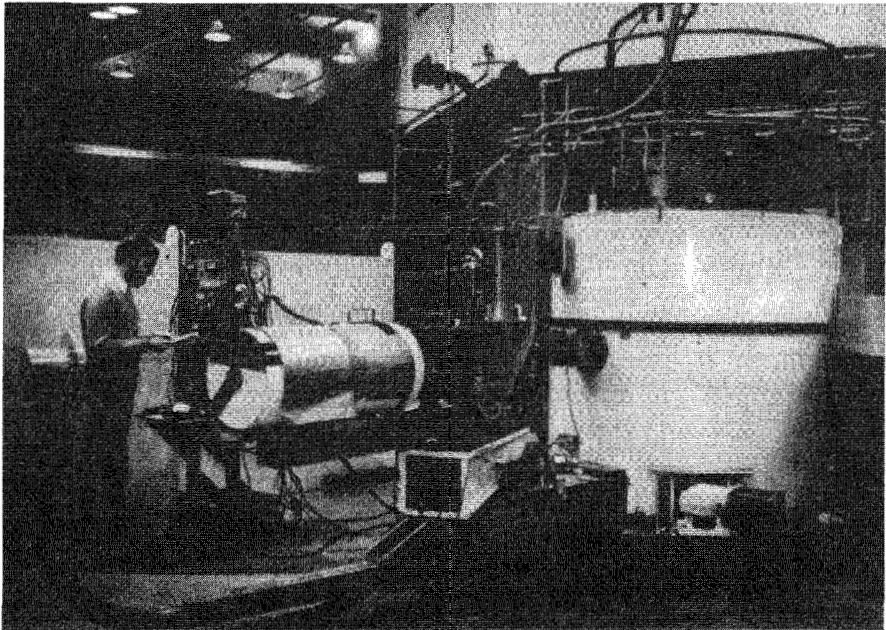
$$\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M_n} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'^2}{2M_n} \pm \hbar\omega \quad (34)$$

که در آن $\hbar\omega$ انرژی فونون ایجادشده (+) یا جذبشده (-) در این فرایند است.

برای آنکه با استفاده از روابط (۳۳) و (۳۴) رابطه پاشیدگی را پیدا کنیم، باید در آزمایش بهره یا افت انرژی نوترونهای پراکنده شده را به صورت تابعی از جهت پراکندگی $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ به دست آوریم. نتایج چنین آزمایشهایی در مورد ژرمانیم و KBr در شکل ۸ و در مورد سدیم در شکل ۱۱ نشان داده شده‌اند. طیف‌سنجی که در مطالعات فونونی به‌کار رفته در شکل ۱۲ نشان داده شده است.



شکل ۱۱. منحنیهای پاشیدگی سدیم برای فونونهایی که در 90°K در جهتهای $[111]$ ، $[110]$ ، $[001]$ منتشر می‌شوند. این منحنیها از طریق پراکندگی ناکشسان نوترونها تعیین شده‌اند.



شکل ۱۲. طیف‌سنج نوترونی سه‌محوره در بروک‌هیون^۱.

چکیده

- واحد کوانتومی ارتعاشی شبکه، فونون است. اگر بسامد زاویه‌ای برابر ω باشد، انرژی فونون برابر $\hbar\omega$ خواهد بود.
- وقتی در اثر پراکندگی ناکشسان فوتون یا نوترون از بردار موج k به k' ، فونونی با بردار موج K ایجاد

1. Brookhaven

شود، قاعدهٔ گزینش بردار موج که حاکم بر این فرایند به صورت زیر است

$$\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{K} + \mathbf{G}$$

که در آن \mathbf{G} بردار شبکهٔ وارون است.

- همهٔ امواج کشسان را می‌توان با بردارهای موجی که داخل منطقهٔ اول بریلوئن در فضای وارون قرار دارند، توصیف کرد.
- اگر p اتم در یاختهٔ بسیط وجود داشته باشد، رابطهٔ پاشیدگی فونونها دارای ۳ شاخهٔ فونون اکوستیکی و $3p - 3$ شاخهٔ فونون اپتیکی خواهد بود.

مسائل

۱. شبکهٔ خطی تک‌اتمی. موج طولی زیر را در نظر بگیرید

$$u_s = u \cos(\omega t - sKa)$$

این موج در یک شبکهٔ خطی تک‌اتمی منتشر می‌شود که از اتمهایی با جرم M و به فاصلهٔ a از یکدیگر تشکیل شده است. برهم‌کنش همسایه‌های اول C است. الف) نشان دهید که انرژی کل موج برابر است با

$$E = \frac{1}{4} M \sum_s \left(\frac{du_s}{dt} \right)^2 + \frac{1}{4} C \sum_s (u_s - u_{s+1})^2$$

که در آن s همهٔ اتمها را در بر می‌گیرد.

ب) با جایگذاری مقدار u_s در این عبارت، نشان دهید که میانگین زمانی انرژی کل به‌ازای هر اتم برابر است با

$$\frac{1}{4} M \omega^2 u^2 \frac{1}{4} C (1 - \cos Ka) u^2 = \frac{1}{4} M \omega^2 u^2$$

که برای این مسئله در مرحلهٔ آخر از رابطهٔ پاشیدگی (۹) استفاده شده است.

۲. معادلهٔ موج در پیوستار. نشان دهید که معادلهٔ حرکت (۲) برای طول موجهای بلند به این معادلهٔ موج در پیوستار کشسان تبدیل می‌شود

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

که در آن v سرعت صوت است.

۳. پایهٔ دو اتم متفاوت. در مورد مسئله‌ای که با روابط (۱۸) تا (۲۶) حل شد، نسبت دامنه‌ها، u/v ، را برای هر دو شاخه به‌ازای $K_{\max} = \pi/a$ به‌دست آورید. نشان دهید که به‌ازای این مقدار K ، دو شبکه به‌گونه‌ای عمل می‌کنند که گویی از یکدیگر جدا شده‌اند: یک شبکه ساکن می‌ماند و شبکهٔ دیگر حرکت می‌کند.

۴. بی‌هنجاری کهن. فرض می‌کنیم که ثابت نیروی بین‌صفحه‌ای، C_p ، در معادلهٔ (۱) بین صفحات s و p به‌صورت زیر باشد

$$C_p = A \frac{\sin pk_0 a}{pa}$$

که در آن A و k_0 ثابت‌اند و p همهٔ اعداد درست را در برمی‌گیرد. چنین شکلی برای فلزات انتظار می‌رود. با استفاده از این رابطه و معادلهٔ ۱۶ (الف)، عبارتی را برای ω^2 و نیز برای $\partial\omega^2/\partial K$ پیدا کنید. ثابت کنید $\partial\omega^2/\partial K$ به‌ازای $K = k_0$ بینهایت می‌شود. در نتیجه منحنی ω^2 برحسب K و یا ω برحسب K دارای یک مماس قائم در k_0 است: در رابطهٔ پاشیدگی فونون $\omega(K)$ ، یک شکن در k_0 وجود دارد.

۵. زنجیر دواتمی. مدهای بهنجار یک زنجیر خطی را در نظر بگیرید، که در آن ثابت نیرو بین اتمهای همسایهٔ اول متناوباً برابر C و C' است. فرض کنید جرمها مساوی‌اند و فاصلهٔ بین همسایه‌های اول برابر $a/2$ است. $\omega(K)$ را در $K = 0$ و $K = \pi/a$ پیدا کنید. رابطهٔ پاشیدگی را به‌طور تقریبی رسم کنید. این مسئله بلور مولکولهای دواتمی، مانند H_2 ، را شبیه‌سازی می‌کند.

۶. ارتعاشهای اتمی در فلز. یونهای نقطه‌ای به جرم M و بار e را در نظر بگیرید که در دریای یکتواختی از الکترونهای رسانش غوطه‌ورند. یونها، وقتی در نقاط منظم شبکه قرار گیرند، در تعادل پایدار فرض می‌شوند. اگر یک یون به اندازهٔ فاصلهٔ کوچک r از مکان تعادلش دور شود، نیروی بازگرداننده، به‌طور عمده از بارهای الکتریکی موجود در کره‌ای ناشی می‌شود که شعاع آن r و مرکز آن در مکان تعادلی واقع است. چگالی تعداد یونها (یا الکترونهای رسانش) را برابر $3/4\pi R^3$ بگیرید، این رابطه R را تعریف می‌کند.

الف) نشان دهید که بسامد یک تک‌یون هنگامی که به نوسان درآید برابر است با $\omega = (e^2/MR^3)^{1/2}$.
ب) مقدار این بسامد را برای سدیم به‌طور تقریبی برآورد کنید. ج) با استفاده از (الف)، (ب) و کمی عقل سلیم، مرتبهٔ بزرگی سرعت صوت را در این فلز به‌دست آورید.

* ۷. مدهای فونونی نرم. خطی از یونها با جرمهای مساوی در نظر بگیرید. بار یونها متوالیاً مثبت و منفی است، و $e_p = e(-1)^p$ بار یون p ام است. پتانسیل بین‌اتمی برابر مجموع دو بخش زیر است: (۱) برهم‌کنش کوتاه‌بردی با ثابت نیروی $C_{IR} = \gamma$ که فقط بین همسایه‌های اول عمل می‌کند. و (۲)

برهم‌کنش کولنی که بین همه یونها وجود دارد. (الف) نشان دهید که سهم برهم‌کنش کولنی در ثابت نیروی اتمی برابر است با $C_{pc} = 2(-1)^p e^2 / p^3 a^3$ ، که در آن a فاصله تعادل بین همسایه‌های اول است. (ب) با استفاده از (۱۶الف) نشان دهید که رابطه پاشیدگی را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\omega^2 / \omega_0^2 = \sin^2 \frac{1}{4} Ka + \sigma \sum_{p=1}^{\infty} (-1)^p (1 - \cos pKa) p^{-3}$$

که در آن $\omega^2 \equiv 4\omega/M$ و $\sigma = e^2 / \gamma a^3$. (ج) نشان دهید که در مرز منطقه، $Ka = \pi$ ، اگر $\sigma > 0.475$ یا $\sigma > 4.7\xi(3)$ باشد، ω^2 منفی است (مد ناپایدار). ξ ، تابع زتای ریمان است. علاوه بر این نشان دهید که اگر $\sigma > (2 \ln 2)^{-1} = 0.721$ ، سرعت صوت به‌ازای مقادیر کوچک Ka موهومی می‌شود. بنابراین اگر $0.721 < \sigma < 0.475$ ، ω^2 به صفر می‌گراید و شبکه برای بعضی از مقادیر Ka در فاصله $(\pi, 0)$ ناپایدار خواهد بود. خاطر نشان می‌سازد که در اینجا طیف فونون با طیف دواتمی یکی نیست، زیرا برهم‌کنش هر یون با همسایگانش همانند برهم‌کنش هر یون دیگر با همسایگانش است.



فونونها (۲). ویژگیهای گرمایی

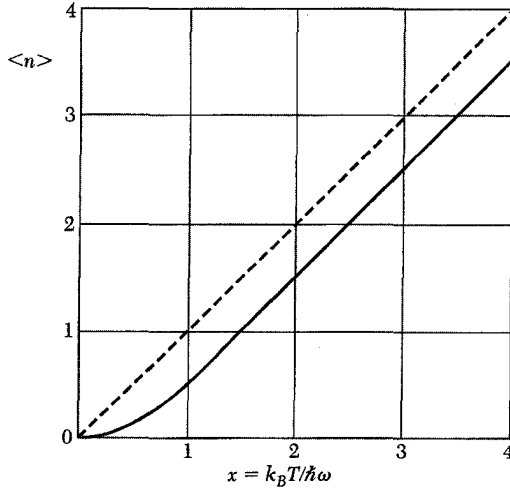
در این فصل ظرفیت گرمایی گاز فونونی و سپس آثار برهم‌کنشهای ناهماهنگ شبکه را بر فونونها و بلور بررسی می‌کنیم.

ظرفیت گرمایی فونون

مقصود از ظرفیت گرمایی معمولاً ظرفیت در حجم ثابت است که از ظرفیت گرمایی در فشار ثابت اساسیتر است.^۱ ظرفیت گرمایی در فشار ثابت از طریق آزمایش تعیین می‌شود: ظرفیت گرمایی در حجم ثابت به صورت $C_V \equiv (\partial U / \partial T)_V$ تعریف می‌شود، که در آن U انرژی و T دماست.

سهام فونونها در ظرفیت گرمایی بلور را ظرفیت گرمایی شبکه می‌گویند و با C_{lat} نمایش می‌دهند.

۱. بین این دو ظرفیت گرمایی، رابطه ساده ترمودینامیکی $C_p - C_V = \gamma \alpha^2 BVT$ وجود دارد که در آن α ضریب انبساط خطی، V حجم و B مدول حجمی است. اختلاف نسبی بین C_V و C_p معمولاً در جامدات کوچک است و غالباً می‌توان از آن صرف‌نظر کرد. مشاهده می‌شود که وقتی $T \rightarrow 0$ ، اگر α و β ثابت باشند، $C_p \rightarrow C_V$.



شکل ۱. منحنی تابع توزیع پلانک. در دماهای بالا، ضریب اشغال هر حالت برحسب دما تقریباً خطی است. تابع $\frac{1}{x} + \langle n \rangle$ ، که رسم نشده است، در دماهای بالا به صورت مجانبی به خط چین نزدیک می‌شود.

انرژی کل فونونها داخل بلور در دمای $\tau (\equiv k_B T)$ را می‌توان به صورت مجموع انرژیهای کل مدهای فونونی بیان کرد، که با بردار موج K و قطبش p شاخص‌گذاری شده‌اند:

$$U_{\text{lat}} = \sum_K \sum_p U_{K,p} = \sum_K \sum_p \langle n_{K,p} \rangle \hbar \omega_{K,p} \quad (۱)$$

که در آن $\langle n_{K,p} \rangle$ ضریب اشغال فونونها با بردار موج K و قطبش p در تعادل گرمایی است. تابع توزیع پلانک شکل $\langle n_{K,p} \rangle$ را می‌دهد:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\exp(\hbar \omega / \tau) - 1} \quad (۲)$$

که در آن $\langle \dots \rangle$ مقدار میانگین در تعادل گرمایی است. نمودار $\langle n \rangle$ در شکل ۱ نشان داده شده است.

توزیع پلانک

مجموعه‌ای از نوسانگرهای هماهنگ یکسان را در تعادل گرمایی در نظر بگیرید. نسبت تعداد نوسانگرها در حالت کوانتومی برانگیخته $(n+1)$ ام به تعداد نوسانگرها در حالت کوانتومی n ام با استفاده از ضریب بولتزمن برابر است با

$$N_{n+1}/N_n = \exp(-\hbar \omega / \tau), \quad \tau \equiv k_B T \quad (۳)$$

در نتیجه کسر تعداد کل نوسانگرها در حالت کوانتومی n ام برابر است با

$$\frac{N_n}{\sum_{s=0}^{\infty} N_s} = \frac{\exp(-n\hbar\omega/\tau)}{\sum_{s=0}^{\infty} \exp(-s\hbar\omega/\tau)} \quad (۴)$$

مشاهده می‌شود که میانگین عدد کوانتومی برانگیختگی نوسانگر برابر است با

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_s s \exp(-s\hbar\omega/\tau)}{\sum_s \exp(-s\hbar\omega/\tau)} \quad (۵)$$

مجموعه‌های رابطه (۵) برابرند با

$$\sum x^s = \frac{1}{1-x}; \quad \sum s x^s = x \frac{d}{dx} \sum x^s = \frac{x}{(1-x)^2} \quad (۶)$$

که در آن $x = \exp(-\hbar\omega/\tau)$. در نتیجه رابطه (۵) را می‌توان به صورت توزیع بلانک نوشت:

$$\langle n \rangle = \frac{x}{1-x} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/\tau) - 1} \quad (۷)$$

شمارش مدهای بهنجار

انرژی مجموعه‌ای از نوسانگرها با بسامد $\omega_{K,p}$ در تعادل گرمایی از رابطه‌های (۱) و (۲) به دست می‌آید:

$$U = \sum_K \sum_p \frac{\hbar\omega_{K,p}}{\exp(\hbar\omega_{K,p}/\tau) - 1} \quad (۸)$$

معمولاً مناسبتر است که جمع روی K با انتگرال تعویض شود. فرض کنید بلور دارای $D_p(\omega)d\omega$ مد با قطبش خاص p در گستره بسامدی ω تا $\omega + d\omega$ باشد. در این صورت انرژی برابر است با

$$U = \sum_p \int d\omega D_p(\omega) \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/\tau) - 1} \quad (۹)$$

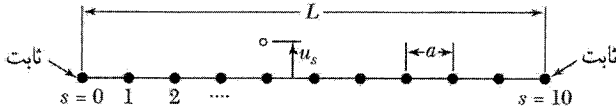
ظرفیت گرمایی شبکه، با دیفرانسیل‌گیری نسبت به دما به دست می‌آید. فرض کنید

$$x = \hbar\omega/\tau = \hbar\omega/k_B T$$

در این صورت، $\partial U/\partial T$ می‌دهد:

$$C_{\text{lat}} = k_B \sum_p \int d\omega D_p(\omega) \frac{x^2 \exp x}{(\exp x - 1)^2} \quad (۱۰)$$

مسئله اساسی یافتن $D(\omega)$ ، یعنی تعداد مدها در واحد گستره بسامد است. این تابع را چگالی مدها یا، غالباً، چگالی حالتها می‌نامند.



شکل ۲. خط کشسانی از $N + 1$ اتم، با $N = 10$ برای شرایط مرزی که در آن انتهای انتهایی $s = 0$ و $s = L$ ثابت‌اند. جابه‌جایی ذرات در مدهای بهنجار، هم برای جابه‌جاییهای طولی و هم برای جابه‌جاییهای عرضی، به شکل $u_s \propto \sin K a$ است. این عبارت به‌خودی خود برای اتم واقع در انتهای $s = 0$ صفر است، و K را به‌گونه‌ای برمی‌گزینیم که جابه‌جایی انتهایی دیگر، یعنی $s = L$ ، نیز صفر شود.

چگالی حالتها در یک بعد

مسئله مقدار مرزی را برای خطی یک‌بعدی (شکل ۲) به طول L ، که شامل $N + 1$ ذره به فاصله a از یکدیگر است، در نظر بگیرید. فرض کنید ذرات $s = 0$ و $s = L$ در دو انتها ثابت نگه‌داشته شوند. مد ارتعاشی بهنجار با قطبش p به شکل موج ایستاده است، که در آن u_s جابه‌جایی ذره s است:

$$u_s = u(0) \exp(-i\omega_{K,p}t) \sin sKa. \quad (11)$$

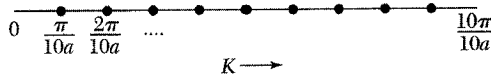
که در آن $\omega_{K,p}$ و K با یک رابطه پاشیدگی مناسب به هم مربوط می‌شوند. همان‌گونه که در شکل ۳ نشان داده شده است، شرایط مرزی انتها ثابت، K را به مقادیر زیر محدود می‌کند

$$K = \frac{\pi}{L}, \frac{2\pi}{L}, \frac{3\pi}{L}, \dots, \frac{(N-1)\pi}{L} \quad (12)$$

پاسخ به‌ازای $K = \pi/L$ به صورت زیر است

$$u_s \propto \sin(s\pi a/L) \quad (13)$$

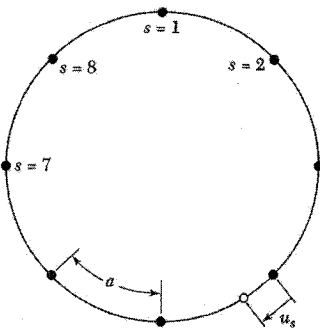
و همان‌گونه که لازم است برای $s = 0$ و $s = L$ برابر صفر می‌شود.



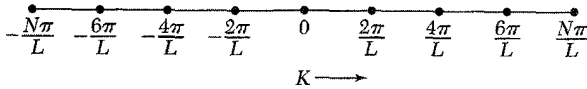
شکل ۳. شرط مرزی $\sin sKa = 0$ به‌ازای $s = 0$ را می‌توان با گزینش $\pi/10a, 2\pi/10a, 9\pi/10a$ برآورده کرد، که در آن $10a$ برابر طول خط، یعنی L ، است. این شکل در فضای K رسم شده است. نقطه‌ها اتم نیستند، بلکه مقادیر مجاز K ‌اند. از تعداد $N + 1$ ذره واقع بر خط، فقط $N - 1$ عدد از آنها مجاز به حرکت‌اند، و عمومی‌ترین حرکت آنها را می‌توان برحسب $N - 1$ مقدار مجاز K بیان کرد. این کوانتیدگی به‌هیچ‌وجه ربطی به مکانیک کوانتومی ندارد، بلکه به‌طور کلاسیکی از این شرایط مرزی نتیجه می‌شود که انتهای انتهایی باید ثابت باشند.

پاسخ مربوط به $K = N\pi/L = n/a = K_{\max}$ به صورت $u_s \alpha \sin s\pi$ خواهد بود. از آنجا که $\sin s\pi$ در روی هر اتم صفر می‌شود، این پاسخ هیچ حرکتی را برای اتمها مجاز نمی‌دارد. بنابراین، در رابطه (۱۲)، $N-1$ مقدار مجاز مستقل برای K وجود دارد. این عدد برابر تعداد ذراتی است که مجاز به حرکت‌اند. هر مقدار مجاز K به یک موج ایستاده مربوط می‌شود. برای خط یک بعدی در هر بازه $\Delta K = \pi/L$ یک مد وجود دارد. بنابراین تعداد مدها در گستره واحد $K > \pi/a$ برابر L/π و به ازای $k > \pi/a$ برابر صفر است. برای هر مقدار K سه قطبش p وجود دارد: در یک بعد، دو تای آنها عرضی و یکی طولی است. در بعد، قطبشها تنها برای بردار موجهایی که در جهت‌های خاص بلورین قرار دارند، به این سادگی‌اند. طرح دیگری برای شمارش مدها وجود دارد که به اندازه طرح اول معتبر است. در این طرح محیط را نامحدود فرض می‌کنیم، با این شرط که پاسخها در یک فاصله بزرگ L دوره‌ای باشند. بنابراین، $u(sa) = u(sa+L)$ برای یک دستگاه بزرگ روش شرایط مرزی دوره‌ای (شکل‌های ۴ و ۵) در فیزیک مسئله تغییر اساسی ایجاد نمی‌کند. در پاسخ موج رونده $u_s = u(0) \exp[i(sKa - \omega_K t)]$ ، مقادیر مجاز K عبارت‌اند از:

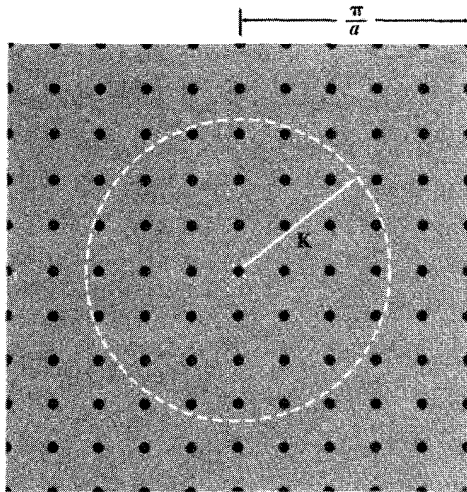
$$K = 0, \quad \pm \frac{2\pi}{L}, \quad \pm \frac{4\pi}{L}, \quad \pm \frac{6\pi}{L}, \dots, \frac{N\pi}{L} \quad (14)$$



شکل ۴. N ذره را در نظر بگیرید که مقید به لغزش روی یک حلقه دایره‌ای باشند. اگر این ذرات با فنرهای کشسان به یکدیگر متصل شوند، قادر به نوسان خواهند بود. در مد بهنجار، جابه‌جایی u_s اتم s به صورت $\sin sKa$ یا $\cos sKa$ خواهد بود: این مدها مستقل‌اند. به علت دوره‌ای بودن هندسی حلقه، شرط مرزی برای همه مقادیر s به صورت $u_{N+s} = u_s$ است، در نتیجه NKa باید مضرب درستی از 2π باشد. مقادیر مجاز مستقل K به ازای $N = N$ عبارت‌اند از $0, 2\pi/\lambda a, 4\pi/\lambda a, 6\pi/\lambda a, 8\pi/\lambda a$. مقدار $K = 0$ برای شکل سینوسی بی‌معناست. زیرا $\sin s \cdot 0 = 0$ ، مقدار $8\pi/\lambda a$ نیز فقط برای جمله کسینوسی معنا دارد، زیرا $\sin(s8\pi/\lambda a) = \sin 8\pi = 0$ به مقدار دیگر K هم برای مد سینوسی و هم برای مد کسینوسی مجازند و در کل هشت مد مجاز برای هشت ذره حاصل می‌شود. بنابراین شرط مرزی دوره‌ای به یک مد مجاز برای هر ذره منجر می‌شود، که دقیقاً مانند شرط مرزی انتها ثابت در شکل ۳ است. اگر مدها را به صورت مختلط $\exp(isKa)$ در نظر گرفته بودیم، شرط مرزی دوره‌ای، مانند معادله (۱۴)، به هشت مد $8\pi/\lambda a, 6\pi/\lambda a, 4\pi/\lambda a, 2\pi/\lambda a$ و $K = 0$ منجر می‌شد.



شکل ۵. مقادیر مجاز بردار موج K که از اعمال شرایط مرزی دوره‌ای در مورد شبکه خطی با دوره $N = 8$ اتم روی خطی به طول L به دست آمده است. پاسخ $K = 0$ مد یکتواخت است. نقاط ویژه $\pm N\pi/L$ فقط یک تک‌پاسخ نمایش می‌دهند، زیرا $\exp(i\pi s)$ با $\exp(-i\pi s)$ یکسان است. بنابراین هشت مد مجاز وجود دارد، که در آنها جابه‌جایی اتم s ام به ترتیب با $1, \exp(\pm i\pi s/2), \exp(\pm i\pi s/4), \exp(\pm i3\pi s/4), \exp(i\pi s)$ متناسب است.



شکل ۶. مقادیر مجاز بردار موج K ی فونونها در فضای فوریه برای یک شبکه مربعی یا ثابت شبکه a ، که در مورد آن شرایط مرزی دوره‌ای روی مربعی به ضلع $L = 10a$ اعمال شده است. حد یکتواخت با ضربدر مشخص شده است. در هر سطحی به مساحت $(2\pi/L)^2 = (2\pi/10a)^2$ یک مد مجاز موجود است، در نتیجه تعداد گردشده نقاط مجاز در دایره‌ای به مساحت πK^2 برابر است با $\pi K^2 (L/2\pi)^2$.

این روش شمارش، همان تعداد مدهایی (یکی به ازای هر اتم متحرک) را ارائه می‌دهد که از رابطه (۱۲) به دست می‌آید. ولی در اینجا مقادیر K هم مثبت‌اند و هم منفی و بازه بین مقادیر متوالی K برابر $\Delta K = 2\pi/L$ است. برای شرایط مرزی دوره‌ای، تعداد مدها در واحد گستره واحد K برای $-\pi/a \leq K \leq \pi/a$ و در غیر این صورت صفر است. این وضعیت در مورد شبکه دوبعدی در شکل ۶ نشان داده شده است.

احتیاج داریم که $D(\omega)$ ، تعداد مدها در گستره بسامدی واحد برای یک قطبش خاص، را بشناسیم.

تعداد مدها، $D(\omega)d\omega$ ، در $d\omega$ به‌ازای ω ، در یک بعد برابر است با

$$D(\omega)d\omega = \frac{L}{\pi} \frac{dK}{d\omega} d\omega = \frac{L}{\pi} \cdot \frac{d\omega}{dK/dK} \quad (15)$$

سرعت گروه $d\omega/dK$ را می‌توان با استفاده از رابطه پاشیدگی ω برحسب K به‌دست آورد. هر جا که رابطه پاشیدگی $\omega(K)$ افقی باشد، یعنی هر جا سرعت گروه صفر باشد، در $D(\omega)$ یک تکیه موجود خواهد بود.

چگالی حالتها در سه بعد

شرایط مرزی دوره‌ای را روی N^3 یاخته بسط در مکعبی به ضلع L به‌کار می‌بریم. بنابراین، \mathbf{K} با این شرط معین می‌شود:

$$\exp[i(K_x x + K_y y + K_z z)] \equiv \exp\{i[K_x(x+L) + K_y(y+L) + K_z(z+L)]\} \quad (16)$$

در نتیجه

$$K_x, K_y, K_z = 0; \pm \frac{2\pi}{L}; \pm \frac{4\pi}{L}; \dots; \frac{N\pi}{L} \quad (17)$$

بنابراین در هر حجم $(2\pi/L)^3$ از فضای \mathbf{K} یک مقدار مجاز \mathbf{K} وجود خواهد داشت، یا به عبارت دیگر، تعداد مقادیر مجاز \mathbf{K} در واحد حجم فضای \mathbf{K} برای هر قطبیدگی و برای هر شاخه عبارت است از

$$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 = \frac{V}{8\pi^3} \quad (18)$$

حجم نمونه برابر است با $V = L^3$.

با استفاده از رابطه (۱۸) تعداد کل مدهایی که بردار موجی کوچکتر از \mathbf{K} دارند برابر است با $(L/2\pi)^3$ ضربدر حجم کره‌ای به شعاع \mathbf{K} . در نتیجه برای هر نوع قطبیدگی داریم

$$N = (L/2\pi)^3 (4\pi K^3/3) \quad (19)$$

چگالی حالتها برای هر قطبیدگی برابر است با

$$D(\omega) = dN/d\omega = (VK^2/2\pi^2)(dK/d\omega) \quad (20)$$

مدل دبی در مورد چگالی حالتها

در تقریب دبی سرعت صوت، همانند پیوستارکشسان مکانیکی، برای هر نوع قطبیدگی ثابت فرض می‌شود. رابطه پاشیدگی به این صورت نوشته می‌شود

$$\omega = vK \quad (21)$$

که در آن v سرعت ثابت صوت است.

چگالی حالت‌های (۲۰) می‌شود:

$$D(\omega) = V\omega^2 / 2\pi^2 v^3 \quad (22)$$

اگر N یاختهٔ بسیط در نمونه وجود داشته باشد، تعداد کل مدهای فونونی اکوستیکی برابر N است. رابطه (۱۹) یک بسامد قطع ω_D را تعیین می‌کند:

$$\omega_D^3 = 6\pi^2 v^3 N/V \quad (23)$$

به این بسامد یک بردار موج قطع در فضای \mathbf{K} مربوط می‌شود:

$$K_D = \omega_D/v = (6\pi^2 N/V)^{1/3} \quad (24)$$

بر مبنای مدل دبی مدهای بردار موجی که بزرگتر از K_D است مجاز نیستند. تعداد مدهای با $K \leq K_D$ ، تعداد درجات آزادی شبکهٔ تک‌اتمی را کامل می‌کند.

انرژی گرمایی رابطه (۹) برای هر نوع قطبیدگی به این صورت بیان می‌شود

$$U = \int d\omega D(\omega) \langle n(\omega) \rangle \hbar\omega = \int_0^{\omega_D} d\omega \left(\frac{V\omega^2}{2\pi^2 v^3} \right) \left(\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/\tau} - 1} \right) \quad (25)$$

برای اختصار فرض می‌کنیم که سرعت فونون از نوع قطبیدگی مستقل باشد، در نتیجه طرف راست رابطه بالا را در ۳ ضرب می‌کنیم و خواهیم داشت

$$U = \frac{3V\hbar}{2\pi^2 v^3} \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/\tau} - 1} = \frac{3Vk_B^3 T^3}{2\pi^2 v^3 \hbar^3} \int_0^{x_D} dx \frac{x^3}{e^x - 1} \quad (26)$$

که در آن $x \equiv \hbar\omega/\tau \equiv \hbar\omega/k_B T$ و

$$x_D \equiv \hbar\omega_D/k_B T \equiv \theta/T \quad (27)$$

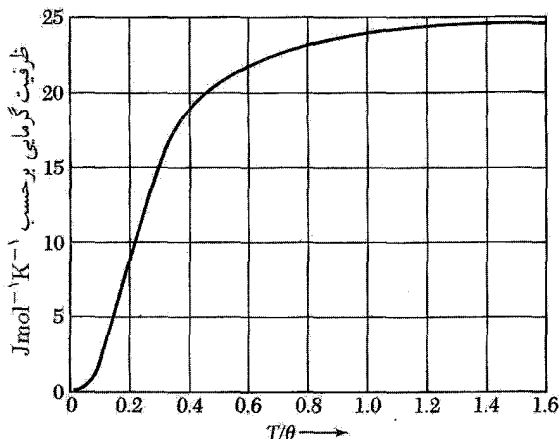
این رابطه دمای دبی θ را برحسب ω_D تعریف می‌کند که با رابطه (۲۳) تعریف شده است. θ را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

$$\theta = \frac{\hbar v}{k_B} \cdot \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \quad (28)$$

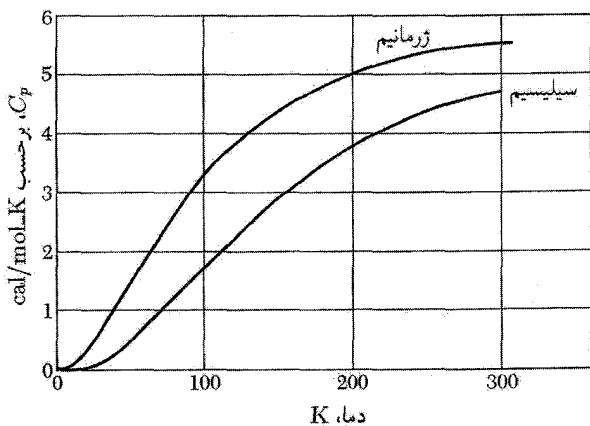
در نتیجه انرژی کل فونونی برابر است با

$$U = 9Nk_B T \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^{x_D} dx \frac{x^3}{e^x - 1} \quad (29)$$

که در آن N تعداد اتمهای موجود در نمونه و $x_D = \theta/T$ است.



شکل ۷. ظرفیت گرمایی C_V جامد، طبق تقریب دبی. مقیاس عمودی بر حسب $J mol^{-1} K^{-1}$ است. مقیاس افقی دماست که نسبت به دمای دبی θ بهنجار شده است. ناحیهٔ مربوط به قانون T^3 پایین دمای θ است. به ازای مقادیر بزرگ T/θ مقدار مجانبی برابر $24.94 J mol^{-1} K^{-1}$ است.



شکل ۸. ظرفیت گرمایی سیلیسیم و ژرمانیم. به کاهش در دماهای پایین توجه کنید. برای تبدیل J/mol_K به cal/mol_K آن را در 4.186 ضرب می‌کنیم.

ظرفیت گرمایی به آسانی از بخش میانی رابطه (۲۶) نسبت به دما به دست می‌آید. به این ترتیب،

$$C_V = \frac{3V\hbar^2}{2\pi^2 v^3 k_B T^2} \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\omega^4 e^{\hbar\omega/\tau}}{(e^{\hbar\omega/\tau} - 1)^2} = 9Nk_B \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \int_0^{x_D} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} \quad (30)$$

در شکل ۷ ظرفیت گرمایی دبی رسم شده است. در $T \gg \theta$ ظرفیت گرمایی به مقدار کلاسیکی $3Nk_B$ نزدیک می‌شود. مقادیر تجربی برای سیلیسیم و ژرمانیم در شکل ۸ ترسیم شده است.

قانون T^3 دبی

در دماهای بسیار پایین به طور تقریبی می‌توان حد بالای انتگرال را در رابطه (۲۹) بینهایت فرض کرد.

بنابراین خواهیم داشت:

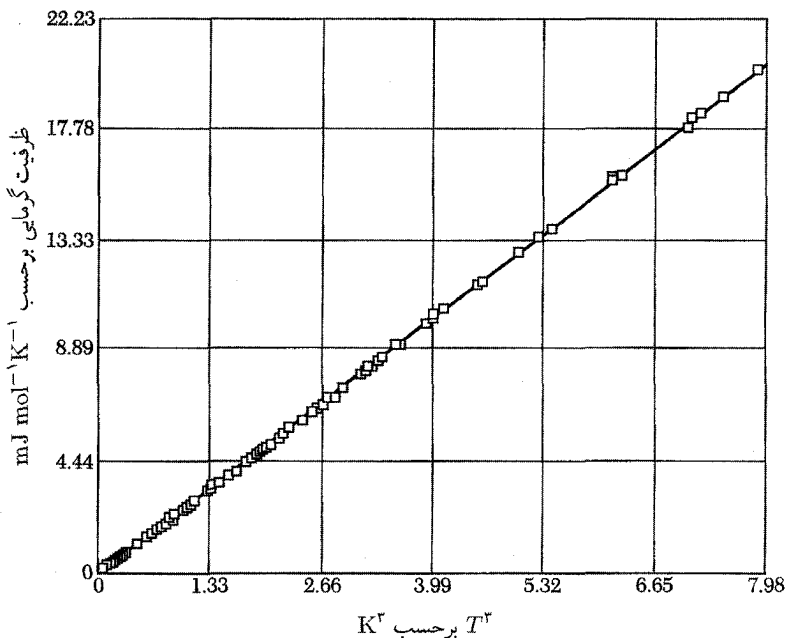
$$\int_0^{\infty} dx \frac{x^3}{e^x - 1} = \int_0^{\infty} dx x^3 \sum_{s=1}^{\infty} \exp(-sx) = 6 \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s^4} = \frac{\pi^4}{15} \quad (31)$$

که جمع‌زنی روی s^{-4} در جدولهای استاندارد موجود است. بنابراین برای $T \ll \theta$ داریم:

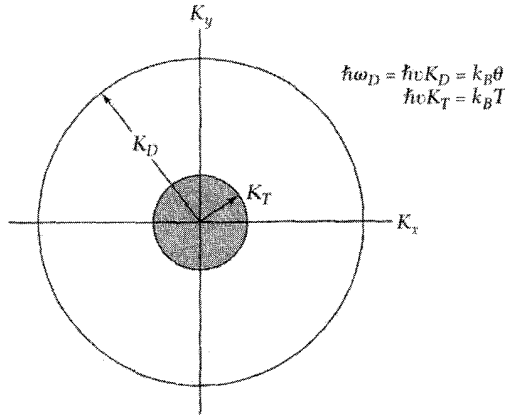
$$U \cong 3\pi^4 Nk_B T^4 / 5\theta^3$$

$$C_V \cong \frac{12\pi^4}{5} Nk_B \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 = 234 Nk_B \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \quad (32)$$

این رابطه تقریب T^3 دیبی است: نتایج تجربی برای آرگون در شکل ۹ ترسیم شده است. در دماهای به اندازه کافی پایین، تقریب T^3 کاملاً خوب است، یعنی، وقتی که فقط مدهای اکوستیکی با طول موج بلند برانگیخته می‌شود. اینها درست همان مدهایی‌اند که برای آنها می‌توان، همانند مدهای موجود



شکل ۹. ظرفیت گرمایی آرگون جامد در دمای پایین، که نسبت به T^3 رسم شده است. در این ناحیه از دما، سازگاری بسیار خوبی بین نتایج تجربی و قانون T^3 دیبی به‌ازای $\theta = 92^\circ \text{K}$ وجود دارد.



شکل ۱۰. برای آنکه توضیحی کیفی از قانون T^3 دبی به دست آوریم، فرض می‌کنیم همهٔ مدهای فونونی که بردار موج‌شان از K_T کوچکتر است، دارای انرژی گرمایی کلاسیکی $k_B T$ باشند و مدهای بین K_T و بردار موج قطع دبی K_D اصلاً برانگیخته نشوند. از $3N$ مد ممکن تا کسر $(T/\theta)^3 = (K_T/K_D)^3$ برانگیخته می‌شود؛ زیرا این کسر برابر نسبت حجم کرهٔ داخلی به حجم کرهٔ خارجی است. انرژی برابر $U \approx k_B T \cdot 3N(T/\theta)^3$ و ظرفیت گرمایی برابر $C_V = \partial U / \partial T \approx 12Nk_B(T/\theta)^3$ است.

در پیوستار کشسان، ثابتهای کشسان ماکروسکوپی در نظرگرفت. انرژی مدهای با طول موج کوتاه (که برای آنها این تقریب به شکست می‌انجامد) بالاتر از آن است که در ماهای پایین به طور قابل ملاحظه‌ای اشغال شود. نتیجهٔ T^3 را می‌توان با یک استدلال ساده درک کرد (شکل ۱۰). در دمای پایین T ، تنها مدهایی که برای آنها $\hbar\omega < k_B T$ تا حد قابل ملاحظه‌ای برانگیخته می‌شوند. طبق شکل ۱، برانگیختگی این مدها تقریباً به صورت کلاسیکی و با انرژی نزدیک به $k_B T$ خواهد بود.

حجم مجازی از فضای \mathbf{K} را که مدهای برانگیخته اشغال می‌کنند، کسری از مرتبهٔ $(\omega_T/\omega_D)^3$ یا $(K_T/K_D)^3$ است. در اینجا بردار «موج گرمایی» K_T به گونه‌ای تعریف می‌شود که داشته باشیم $\hbar v K_T = k_B T$ و بردار موج قطع دبی است. به این ترتیب کسر اشغال شده کل حجم در فضای \mathbf{K} از مرتبهٔ $(T/\theta)^3$ است. تعداد مدهای برانگیخته از مرتبهٔ $3N(T/\theta)^3$ و هر یک از این مدها دارای انرژی $k_B T$ است، انرژی تقریباً برابر $3Nk_B T(T/\theta)^3$ و ظرفیت گرمایی تقریباً برابر $12Nk_B(T/\theta)^3$ است. در مورد بلورهای واقعی دماهایی که در آنها تقریب T^3 صادق است، کاملاً پایین است. برای آنکه رفتاری پذیرفتنی از T^3 محض به دست آوریم، ممکن است لازم باشد که دما پایینتر از $T = \theta/5^\circ$ باشد. گزیده‌ای از مقادیر θ در جدول ۱ داده شده‌اند. دقت کنید که، برای مثال در فلزات قلیایی، اتمهای سنگینتر پایینترین θ ها را دارند، زیرا سرعت صوت با افزایش چگالی کاهش می‌یابد.

مدل اینشتین در مورد چگالی حالتها

انرژی گرمایی N نوسانگر را، که همه دارای بسامد یکسان ω در یک بعدند، در نظر بگیرید. چگالی حالت‌های اینشتین برابر است با $D(\omega) = N\delta(\omega - \omega_0)$ ، که تابع دلتا در ω متمرکز است. انرژی گرمایی دستگاه برابر است با

$$U = N \langle n \rangle \hbar \omega = \frac{N \hbar \omega}{e^{\hbar \omega / \tau} - 1} \quad (33)$$

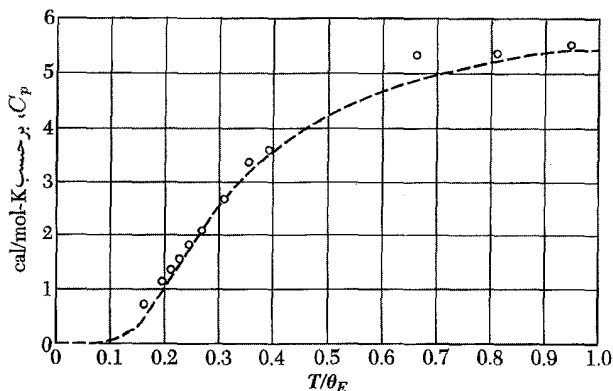
که اکنون برای سادگی از ω به جای ω_0 استفاده شده است.

ظرفیت گرمایی این نوسانگرها به گونه زیر بیان می‌شود و نمودارش در شکل ۱۱ بیان شده است.

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = N k_B \left(\frac{\hbar \omega}{\tau} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega / \tau}}{(e^{\hbar \omega / \tau} - 1)^2} \quad (34)$$

این رابطه نتیجه مدل اینشتین (۱۹۰۷) برای سهم N نوسانگر با بسامد یکسان، در ظرفیت گرمایی جامد است. در سه بعد به جای N ، $3N$ قرار می‌دهیم، زیرا هر نوسانگر دارای سه بعد خواهد بود. حد C_V در دماهای بالا برابر $3Nk_B$ می‌شود که به مقدار دولون و پتی مشهور است.

در دماهای پایین، رابطه (۳۴) به گونه $\exp(-\hbar \omega / \tau)$ کاهش می‌یابد، در حالی که معلوم شده است شکل تجربی سهم فونونی به گونه T^3 است، که پیش از این با مدل دبی توجیه شد. به هر حال، مدل اینشتین اغلب برای تقریب زدن بخش فونون اپتیکی طیف فونونی به‌کار می‌رود.



شکل ۱۱. مقایسه مقادیر تجربی ظرفیت گرمایی الماس با مقداری که از نخستین مدل کوانتومی (اینشتین) با استفاده از دمای مشخصه $\theta_E = \hbar \omega / k_B = 1320 \text{ K}$ محاسبه شده‌اند. برای تبدیل به J/mol-deg آن را در 4.186 ضرب کنید.

نتیجه عمومی برای $D(\omega)$

می‌خواهیم با داشتن رابطه پاشیدگی، $\omega(\mathbf{K})$ ، فونونها یک رابطه عمومی برای $D(\omega)$ ، یعنی تعداد حالتها در واحد گستره بسامد، پیدا کنیم. تعداد مقادیر مجاز \mathbf{K} ، که برای آنها بسامد فونونی بین ω و $\omega + d\omega$ باشد، برابر است با

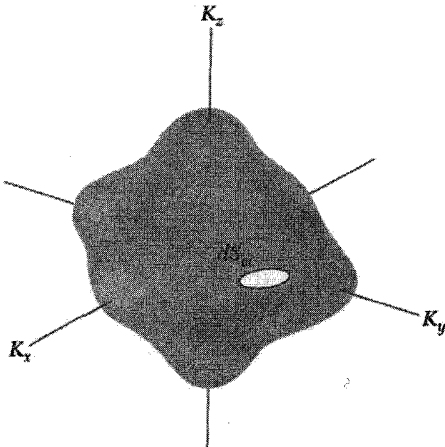
$$D(\omega)d\omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_{\text{پوسته}} d^3K \quad (35)$$

در اینجا انتگرال روی حجم پوسته‌ای در فضای \mathbf{K} گرفته می‌شود که با دو سطحی که روی آنها بسامد فونون ثابت است محصور می‌شود، روی یکی از این سطوحا بسامد ω است و روی دیگری $\omega + d\omega$ است. مسئله واقعی محاسبه حجم این پوسته است. در فضای \mathbf{K} ، عنصر مساحت روی سطحی را که دارای بسامد انتخابی ثابت ω است، با dS_ω نشان می‌دهیم (شکل ۱۲). عنصر حجم بین دو سطح با بسامدهای ثابت ω و $\omega + d\omega$ ، استوانه قائمی است که قاعده‌اش برابر dS_ω و ارتفاعش dK_\perp باشد، در نتیجه

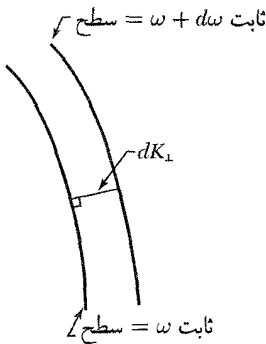
$$\int_{\text{پوسته}} d^3K = \int dS_\omega dK_\perp \quad (36)$$

در اینجا dK_\perp فاصله عمودی بین سطح با بسامد ثابت ω و سطح با بسامد ثابت $\omega + d\omega$ است (شکل ۱۳). مقدار dK_\perp از یک نقطه به نقطه دیگر سطح تغییر می‌کند. گرادیان ω ، یعنی $\nabla_{\mathbf{K}}\omega$ ، نیز بر سطح با بسامد ثابت ω عمود است، و این مقدار برابر تفاضل بسامد دوسطحی است که dK_\perp آنها را بهم مربوط کرده است.

$$|\nabla_{\mathbf{K}}\omega|dK_\perp = d\omega$$



شکل ۱۲. عنصر مساحت dS_ω بر روی سطحی با بسامد ثابت در فضای \mathbf{K} . حجم بین سطوح با بسامد ثابت در ω و $\omega + d\omega$ برابر با $|\Delta_{\mathbf{K}}\omega| \int dS_\omega d\omega$ است.



شکل ۱۳. کمیت dK_{\perp} فاصله عمودی بین دو سطح با بسامد ثابت در فضای \mathbf{K} است. یک سطح دارای بسامد ω و دیگری دارای بسامد $\omega + d\omega$ است.

در نتیجه عنصر حجم برابر است با

$$dS_{\omega} dK_{\perp} = dS_{\omega} \frac{d\omega}{|\nabla_{\mathbf{K}}\omega|} = dS_{\omega} \frac{d\omega}{v_g}$$

که در آن $v_g = |\nabla_{\mathbf{K}}\omega|$ سرعت گروه فونون است. رابطه (۳۵) به صورت زیر درمی‌آید

$$D(\omega)d\omega = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int \frac{dS_{\omega}}{v_g} d\omega$$

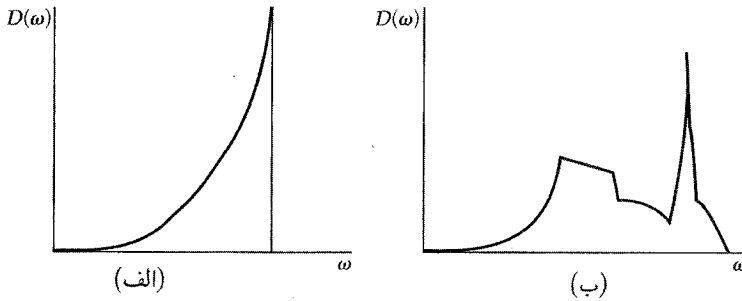
دو طرف این رابطه را بر $d\omega$ تقسیم می‌کنیم و حجم بلور را به صورت $V = L^3$ می‌نویسیم: در نتیجه چگالی حالتها برابر است با

$$D(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{dS_{\omega}}{v_g} \quad (37)$$

این انتگرال روی مساحت سطحی با بسامد ثابت ω در فضای \mathbf{K} گرفته می‌شود. این نتیجه به یک تک‌شاخه از رابطه پاشیدگی مربوط است. این نتیجه را می‌توانیم در نظریه نواری الکترون نیز به‌کار ببریم. در $D(\omega)$ سهم ناشی از نقاطی که در آنها سرعت گروه صفر است اهمیت ویژه‌ای دارد. این نقاط بحرانی تکیه‌هایی را (که به نام تکیه‌های وان هوف معروف‌اند) در تابع توزیع ایجاد می‌کنند (شکل ۱۴).

برهم‌کنشهای ناهماهنگ در بلورها

- در نظریه ارتعاشهای شبکه مورد بحث، تاکنون انرژی پتانسیل برحسب جابه‌جاییهای بین‌اتمی به جملات درجه دوم محدود شده است. این نظریه، نظریه هماهنگ است و برخی از پیامدهای آن عبارت‌اند از:
- دو موج شبکه برهم‌کنش ندارند؛ یک تک‌موج نسبت به زمان فرو نمی‌افتد و تغییر شکل نمی‌دهد.
 - انبساط گرمایی وجود ندارد.



شکل ۱۴. چگالی حالتها به صورت تابعی از بسامد. (الف) برای جامد دبی و (ب) برای ساختار بلوری واقعی. برای بلور، طیف به ازای ω های کوچک به صورت ω^2 شروع می شود. ولی در نقاط تکین ناپیوستگیهایی پدیدار می شوند.

• ثابتهای کشسان تکدما و بی دررو با هم برابرند.

• ثابتهای کشسان از فشار و دما مستقل اند.

• ظرفیت گرمایی در دماهای بالا، $T > \theta$ ، ثابت می شود.

در بلورهای واقعی هیچیک از این نتایج دقیقاً صادق نیست. انحراف از این نتایج را می توان به علت چشم پوشی از جملات ناهماهنگ برحسب جابه جاییهای بین اتمی (با توانهای بیش از دو) دانست. درباره برخی از جنبه های ساده تر اثرهای ناهماهنگ بحث خواهیم کرد.

آزمایشهای مربوط به برهم کنش دو فونون برای ایجاد فونون سوم با بسامد $\omega_3 = \omega_1 + \omega_2$ اثرهای ناهماهنگ را به زیبایی نمایش می دهند. فرایندهای سه فونونی از جملات درجه سوم در انرژی پتانسیل شبکه ناشی می شوند. فیزیک برهم کنش فونونها را می توان به سادگی بیان کرد: حضور یک فونون، باعث ایجاد کرنش کشسان دوره ای می شود که (از طریق برهم کنش ناهماهنگ) ثابت کشسانی بلور را در فضا و زمان مدوله می کند. فونون دوم مدولاسیون ثابت کشسانی را مشاهده می کند و در نتیجه، درست مانند پراکندگی ناشی از توری سه بعدی متحرک، پراکنده می شود و فونون سوم را ایجاد می کند.

انبساط گرمایی

انبساط گرمایی را می توان در مورد نوسانگر کلاسیکی با در نظر گرفتن اثر جملات ناهماهنگ در انرژی پتانسیل روی فاصله متوسط یک زوج اتم در دمای T درک کرد. انرژی پتانسیل اتمهایی را که در صفر مطلق به اندازه x از فاصله تعادل شان جابه جا شده اند، به صورت زیر در نظر می گیریم

$$U(x) = cx^2 - gx^3 - fx^4 \quad (38)$$

c ، g و f همه مثبت‌اند. جمله شامل x^3 نامتقارن بودن دافعه متقابل آنها و جمله شامل x^4 نرم‌شدن ارتعاش در دامنه‌های زیاد را نشان می‌دهد—کمینه واقع در $x = 0$ کمینه مطلق نیست، ولی در نوسانهای کوچک، این شکل برای نمایش پتانسیل بین‌اتمی کافی است.

جابه‌جایی میانگین را با استفاده از تابع توزیع بولتزمن محاسبه می‌کنیم که در آن وزن مقادیر ممکن x بر مبنای احتمال ترمودینامیکی شان تعیین می‌شود:

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx x \exp[-\beta U(x)]}{\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp[-\beta U(x)]}$$

که در آن، $\beta \equiv 1/k_B T$. برای جابه‌جاییهایی که جملات ناهماهنگ در انرژی در مقایسه با $k_B T$ کوچک باشند، انتگرالده‌ها را می‌توان به این صورت بسط داد:

$$\begin{aligned} \int dx x \exp(-\beta U) &\cong \int dx [\exp(-\beta c x^2)] (x + \beta g x^4 + \beta f x^5) \\ &= \left(\frac{\sqrt{3\pi}}{4} \right) \left(\frac{g}{c^{5/2}} \right) \beta^{-3/2}; \\ \int dx \exp(-\beta U) &\cong \int dx \exp(-\beta c x^2) = (\pi/\beta c)^{1/2} \end{aligned} \quad (39)$$

بنابراین انبساط گرمایی در ناحیه کلاسیکی برابر است با

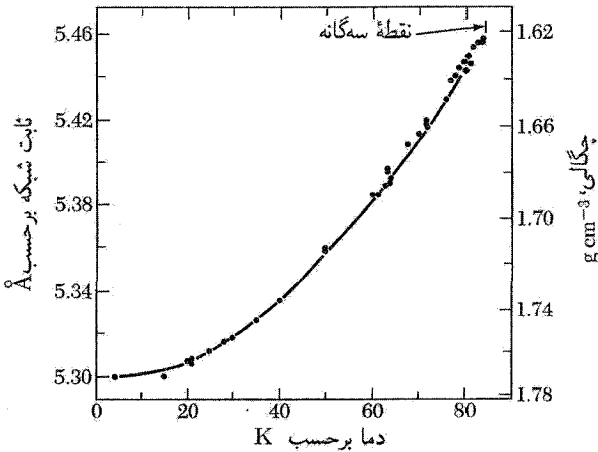
$$\langle x \rangle = \frac{\sqrt{3}g}{4c^{5/2}} k_B T \quad (40)$$

خاطر نشان می‌سازد که در تابع نمایی رابطه (۳۹)، $c x^2$ را نگه‌داشته و

$$\exp(\beta g x^4 + \beta f x^5) \cong 1 + \beta g x^4 + \beta f x^5 + \dots$$

را بسط داده‌ایم.

اندازه‌گیریهای ثابت شبکه آرگون جامد در شکل ۱۵ نشان داده شده‌اند. شیب منحنی با ضریب انبساط گرمایی متناسب است. همان‌گونه که از مسئله ۵ انتظار می‌رود، وقتی $T \rightarrow 0$ ، ضریب انبساط صفر می‌شود. در پایینترین مرتبه، انبساط گرمایی شامل جمله متقارن $f x^5$ در $U(x)$ نیست و فقط جمله پادمقارن $g x^4$ را در برمی‌گیرد.



شکل ۱۵. ثابت شبکه آرگون جامد به صورت تابعی از دما.

رسانندگی گرمایی

ضریب رسانندگی گرمایی K ی جامد را به سادگی می‌توان برحسب شار گرما در حالت پایا در طول یک میله بلند، که دارای گرادیان دمای dT/dx است، به صورت زیر تعریف کرد:

$$j_U = -K \frac{dT}{dx} \quad (41)$$

که j_U شار انرژی گرمایی، یا انرژی تراگسیل یافته از واحد سطح در واحد زمان است. شکل این معادله اشاره بر این دارد که فرایند انتقال انرژی گرمایی، یک فرایند کاتوره‌ای است. انرژی به سادگی از یک انتهای نمونه پرتابه‌ای وارد نمی‌شود و مسیر مستقیم را به سوی انتهای دیگر ادامه نمی‌دهد، بلکه در طول نمونه پخش می‌شود و تحت تأثیر برخوردهای متعددی قرار می‌گیرد. اگر انرژی مستقیماً بدون انحراف در طول نمونه منتشر می‌شد، عبارت شار گرمایی به گرادیان دما بستگی نداشت، بلکه، بدون توجه به طول نمونه، فقط به اختلاف دمای ΔT بین دو انتهای آن وابسته بود. طبیعت کاتوره‌ای فرایند رسانندگی باعث می‌شود که گرادیان دما، همان‌گونه که بعداً خواهیم دید، مسیر آزاد میانگین را در عبارت شار گرمایی وارد کند. با استفاده از نظریه جنبشی گازها عبارت زیر را برای رسانندگی گرمایی به دست خواهیم آورد:

$$K = \frac{1}{3} C v l, \quad (42)$$

که در آن C ظرفیت گرمایی به ازای واحد حجم، v سرعت متوسط ذره، و l مسافت آزاد میانگین ذره بین برخوردهاست. دبی برای نخستین بار این نتیجه را برای توضیح رسانندگی گرمایی در جامدات دی‌الکتریک به کار گرفت، که در آن C را ظرفیت گرمایی فونونها، v سرعت فونونها، و l را مسافت آزاد میانگین فونونها در نظر گرفت. چند مقدار از مسافت آزاد میانگین در جدول ۲ داده شده است.

جدول ۲. مسافتهای آزاد و میانگین فونون

[محاسبه شده از رابطه (۴۴)، با قراردادن $v = 5 \times 10^5 \text{ cm/s}$ به عنوان سرعت نوعی صوت. ℓ هایی که از این روش به دست می آیند به فرایندهای واگرد مربوط می شوند.]

بلور	T برحسب $^{\circ}\text{C}$	C ، برحسب $\text{J cm}^{-2}\text{K}^{-1}$	K ، برحسب $\text{W cm}^{-1}\text{K}^{-1}$	ℓ ، برحسب \AA
کوارتز	۰	۲۰۰	۰٫۱۳	۴۰
	-۱۹۰	۰٫۵۵	۰٫۵۰	۵۴۰
NaCl	۰	۱٫۸۸	۰٫۰۷	۲۳
	-۱۹۰	۱٫۰۰	۰٫۲۷	۱۰۰

نظریه جنبشی مقدماتی را که به (۴۲) منجر می شود، شرح می دهیم. شار ذرات در جهت x برابر است با $\frac{1}{4}n\langle |v_x| \rangle$ ، که در آن n غلظت مولکولهاست. در تعادل، شاری با همین اندازه در جهت مخالف وجود دارد. نماد $\langle \dots \rangle$ نمایشگر مقدار میانگین است.

اگر ظرفیت گرمایی ذره c باشد، آنگاه ذره حین حرکت از ناحیه ای با دمای موضعی $T + \Delta T$ به ناحیه دیگری با دمای موضعی T ، انرژی $c\Delta T$ را از دست می دهد. حال، ΔT بین دو انتهای مسافت آزاد ذره از رابطه زیر به دست می آید

$$\Delta T = \frac{dT}{dx} \ell_x = \frac{dT}{dx} v_x \tau$$

که در آن τ زمان میانگین بین برخوردهاست.

بنابراین شار خالص انرژی (ناشی از شار ذره در هر دو جهت) برابر است با

$$j_U = -n\langle v_x^2 \rangle c \tau \frac{dT}{dx} = -\frac{1}{3}n\langle v^2 \rangle c \tau \frac{dT}{dx} \quad (43)$$

اگر v ، مانند سرعت فونونها، ثابت باشد، رابطه (۴۳) را می توان به این صورت نوشت:

$$j_U = -\frac{1}{3}Cv\ell \frac{dT}{dx} \quad (44)$$

که در آن $\ell \equiv v\tau$ و $C \equiv nc$. بدین ترتیب، $K = (1/3)Cv\ell$.

مقاومت ویژه گرمایی گاز فونونی

مساحت آزاد میانگین فونون، l ، را در اصل دو فرایند، یکی پراکندگی هندسی و دیگری پراکندگی در اثر سایر فونونها، تعیین می‌کنند. اگر نیروهای بین اتمها کاملاً هماهنگ بودند، برای برخورد فونونهای مختلف هیچ سازوکاری وجود نداشت و مسافت آزاد میانگین منحصراً به وسیله برخورد های فونون با مرزهای بلور و ناکاملیهای شبکه محدود می‌شد. وضعیتهایی وجود دارند که در آنها این آثار کاملاً حاکم اند.

در اثر برهم‌کنشهای ناهماهنگ شبکه، یک جفت‌شدگی بین فونونهای مختلف به وجود می‌آید که مقدار مسافت آزاد میانگین را محدود می‌کند. حالت‌های دقیق دستگاه ناهماهنگ دیگر مانند فونونهای خالص نیستند. نظریه اثر جفت‌شدگی ناهماهنگ روی مقاومت ویژه گرمایی پیش‌بینی می‌کند که در دماهای بالا l با $1/T$ متناسب باشد. این امر با آزمایشهای بسیاری سازگار است. این وابستگی را می‌توان برحسب تعداد فونونهایی که یک فونون معلوم می‌تواند با آنها برهم‌کنش داشته باشد، درک کرد: در دمای بالا تعداد کل فونونهای برانگیخته با T متناسب است. بسامد برخوردهای یک فونون معلوم، باید با تعداد فونونهایی که آن فونون می‌تواند با آنها برخورد کند متناسب باشد، بنابراین $l \propto 1/T$.

برای تعریف رسانندگی گرمایی باید در بلور سازوکارهایی موجود باشند که بتوانند توزیع فونونها را به طور موضعی به حالت تعادل گرمایی درآورند. بدون چنین سازوکارهایی نمی‌توانیم سخن از این برانیم که فونونهای یک سر بلور در دمای T_1 و فونونهای سر دیگر در دمای T_2 در حالت تعادل اند.

در مورد رسانندگی گرمایی، تنها کافی نیست که راهی برای محدود کردن مسافت آزاد میانگین وجود داشته باشد، بلکه باید راهی برای برقراری توزیع تعادلی موضعی برای فونونها نیز موجود باشد. برخوردهای فونون با ناکاملی استاتیکی یا مرز شبکه به تنهایی حالت تعادل گرمایی را برقرار نمی‌کند، زیرا چنین برخوردهایی انرژی تک‌تک فونونها را تغییر نمی‌دهند: بسامد فونون پراکنده شده، ω_2 ، با بسامد فونون فرودی، ω_1 ، برابر است.

این نکته نیز شایان توجه است که فرایند برخورد سه فونونی

$$K_1 + K_2 = K_3 \quad (45)$$

حالت تعادل را برقرار نمی‌کند. این امر به این دلیل زیرکانه است که تکانه کل گاز فونون در اثر چنین برخوردی تغییر نمی‌کند. توزیع تعادلی فونونها در دمای T در بلور با سرعت رانشی‌ای حرکت می‌کند، که در اثر برخوردهای سه فونونی به شکل (۴۵) آشفته نمی‌شود. برای چنین برخوردهایی تکانه فونون

$$J = \sum_{\mathbf{K}} n_{\mathbf{K}} \hbar \mathbf{K} \quad (46)$$

پایسته است، زیرا تغییر J در چنین برخوردهایی برابر است با $K_3 - K_2 - K_1 = 0$. در اینجا n_K تعداد فونونهایی است که بردار موج K را دارند.

برای توزیعی با $J \neq 0$ برخوردهایی مانند (۴۵) در برقراری تعادل گرمایی کامل ناتواناند، زیرا در اثر این برخوردها J بدون تغییر باقی می‌ماند. اگر با توزیعی از فونونهای داغ در امتداد میله با $J \neq 0$ شروع کنیم، این توزیع بدون تغییر J در میله منتشر می‌شود. بنابراین هیچ مقاومت گرمایی‌ای وجود نخواهد داشت. این مسئله، همان‌گونه که در شکل ۱۶ نمایش داده شده است، شبیه برخوردهای بین مولکولهای گاز در یک لوله مستقیم با دیوارهای بدون اصطکاک است.

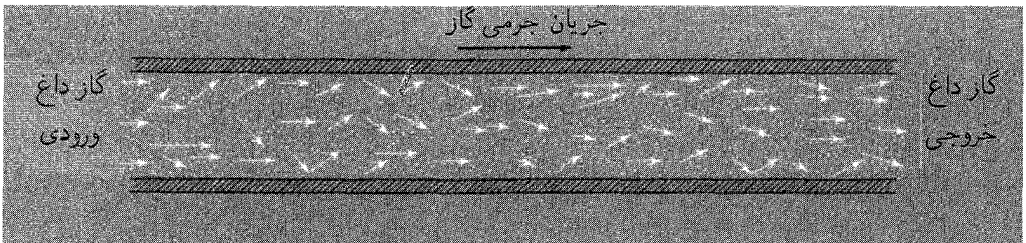
فرایندهای واگرد

فرایندهای سه فونونی مهم که مقاومت ویژه گرمایی را ایجاد می‌کنند، به شکل $K_1 + K_2 = K_3$ ، که در آن K پایسته است نیستند، بلکه به شکل زیرند

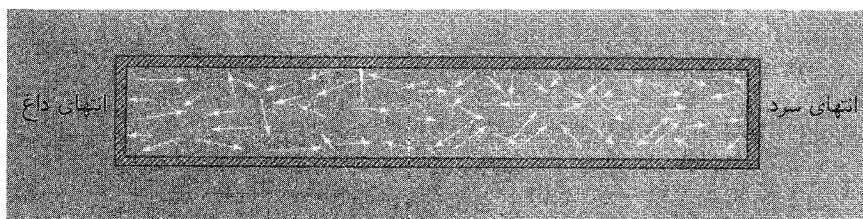
$$K_1 + K_2 = K_3 + G \quad (47)$$

که در آن G بردار شبکه وارون است (شکل ۱۷). این فرایند توسط پایلز کشف شد و به فرایندهای واگرد معروف است. یادآور می‌شود که G می‌تواند در کلیه قوانین پایستگی تکانه در بلورها ظاهر شود. در همه فرایندهای مجازی که به شکل (۴۶) و (۴۷) اند، انرژی پایسته است.

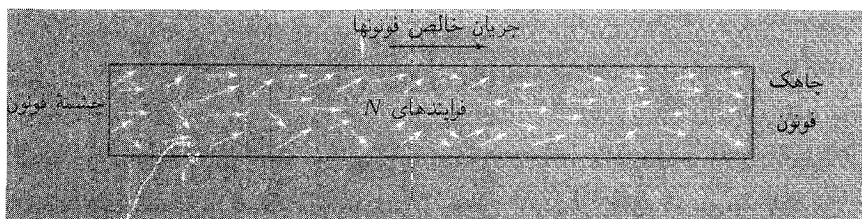
قبلاً در میان فرایندهای برهم‌کنش موجی در بلورها، با مثالهایی مواجه شده‌ایم که در آنها تغییر بردار موج کل الزاماً صفر نیست و ممکن است برابر با بردار شبکه وارون باشد. در شبکه‌های دوره‌ای چنین فرایندهایی همیشه امکان‌پذیرند. این استدلال به‌ویژه در مورد فونونها قوی است: K های معنی‌دار فونونها،



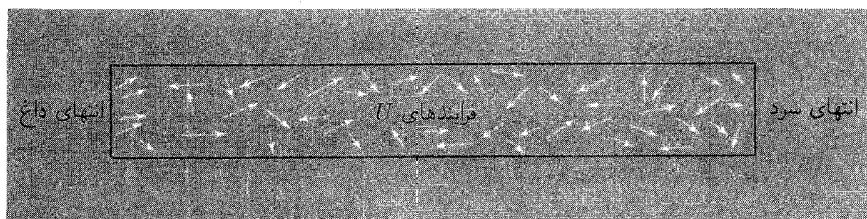
شکل ۱۶ الف. شار مولکولهای گاز در حالت تعادل رانشی در طول لوله باز با دیوارهای بدون اصطکاک، فرایندهای برخورد کشسان بین مولکولهای گاز، شار تکانه یا انرژی گاز را تغییر نمی‌دهند. زیرا، در هر برخورد سرعت مرکز جرم ذرات برخوردکننده و انرژی آنها بدون تغییر باقی می‌ماند. بنابراین انرژی، بدون آنکه توسط گردادیان دما رانده شود، از چپ به راست ترابری می‌شود. در نتیجه مقاومت ویژه گرمایی برابر صفر و رسانندگی گرمایی بینهایت است.



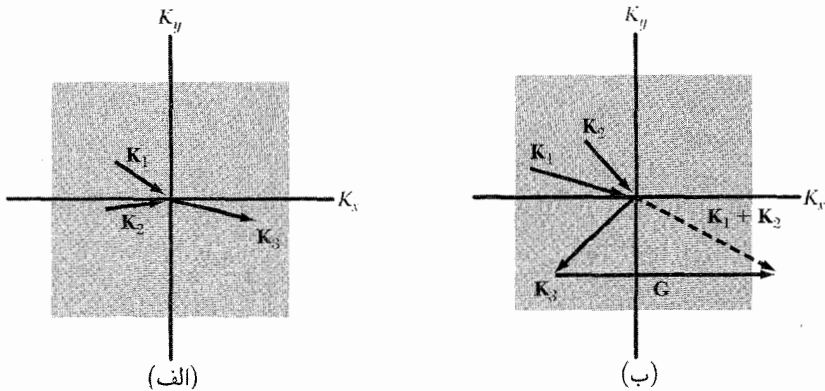
شکل ۱۶ ب. در تعریف متداول رسانندگی گرمایی در گاز وضعیتی در نظر گرفته می‌شود که در آن هیچ شار جرمی مجاز نیست. در اینجا لوله در هر دو سر بسته شده است، تا از فرار یا ورود مولکولها جلوگیری به عمل آید. در گرادیان دما زوج مولکولهای برخوردکننده‌ای که سرعت مرکز جرمشان از مقدار میانگین بیشتر است، به سمت راست و آنهایی که سرعت مرکز جرمشان از مقدار میانگین کمتر است، به سمت چپ متمایل خواهند بود. گرادیان غلظت مختصری، که در سمت راست بیشتر است، ایجاد خواهد شد تا در حالی که ترابری خالص انرژی از انتهای داغ به انتهای سرد را میسر می‌سازد، ترابری خالص جرم برابر صفر باشد.



شکل ۱۶ ج. در بلوری می‌توان، مثلاً با تاباندن نور لامپ به انتهای چپ بلور، ترتیبی اتخاذ کرد که فونونها عمدتاً در یک انتها ایجاد شوند. از این انتها شاره خالصی از فونونها به طرف انتهای راست بلور وجود خواهد داشت. اگر تنها فرایندهای N رخ دهند، تکانه شار فونون در اثر برخورد تغییر نمی‌کند و مقداری شار فونون در طول بلور برقرار می‌ماند. می‌توان در اصل ترتیبی اتخاذ کرد که در موقع ورود فونونها به انتهای سمت راست، بیشتر انرژی آنها به تابش تبدیل شود و در نتیجه چاهکی برای فونونها ایجاد شود. در اینجا نیز درست مانند (الف) مقاومت ویژه گرمایی صفر است.



شکل ۱۶ د. در فرایندهای U ، در هر رویداد برخورد، تغییر خالص تکانه فونون زیاد است. شار خالص اولیه فونون حین رفتن به سمت راست به سرعت فرو می‌افتد. دو انتها ممکن است به صورت چشمه و چاهک عمل کنند. تحت تأثیر گرادیان دما، ترابری انرژی خالصی رخ می‌دهد، مانند شکل ب.

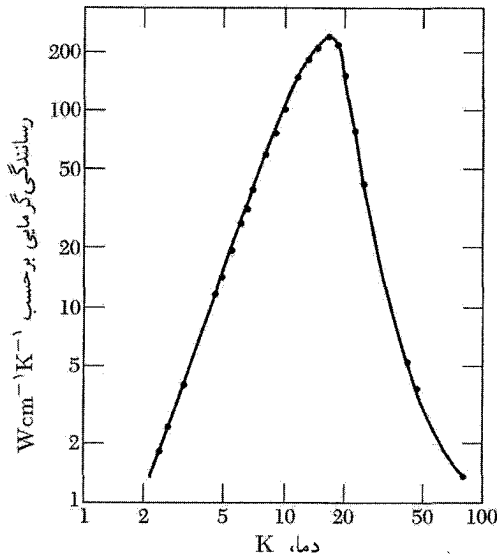


شکل ۱۷. (الف) فرایند برخورد فونونی عادی، $K_1 + K_2 = K_3$ و (ب) فرایند برخورد فونونی واگرد، $K_1 + K_2 = K_3 + G$ در شبکه مربعی دوبعدی. مربع نشان داده شده در هر شکل نمایشگر منطقه اول بریلوئن در فضای K ی فونونهاست؛ این منطقه شامل همه مقادیر مستقل ممکن بردار موج فونونهاست. آن بردارهای K که نوک آنها در مرکز منطقه واقع است، فونونهای جذب شده را در فرایند برخورد نشان می دهند؛ و آنهایی که جهتایشان از مرکز دور می شوند، فونونهای گسیل یافته را در برخورد نمایش می دهند. در (ب) مشاهده می کنیم که در فرایند واگرد جهت مؤلفه x شار فونون معکوس شده است. بردار شبکه وارون G ، همان طور که نشان داده شده است، موازی با محور K_x و دارای طول $2\pi/a$ است که a ثابت شبکه بلور است. در هر دو فرایند N یا U ، انرژی باید پایسته باشد، در نتیجه $\omega_1 + \omega_2 = \omega_3$.

تنها داخل منطقه اول بریلوئن قرار دارند، بنابراین هر K ی بزرگتر که در برخورد ایجاد شود، باید با افزودن G به درون منطقه اول برگردانده شود. از برخورد دو فونون، که برای هر دو K_x منفی است، فونونی توسط فرایند واگرد ($G \neq 0$) با K_x مثبت به وجود می آید. فرایندهای واگرد را فرایندهای U نیز می نامند.

برخوردهایی که در آنها $G = 0$ است فرایندهای عادی یا فرایندهای N نام دارند. در دماهای بالا ($T < \theta$) از آنجا که $k_B T > \hbar \omega_{\max}$ ، تمام مدهای فونونی برانگیخته می شوند. در نتیجه بخش قابل ملاحظه ای از تمام برخوردهای فونونی از نوع فرایندهای U خواهد بود که با تغییر زیاد تکانه در برخورد همراه اند. در دماهای بالا مقاومت ویژه گرمایی را می توانیم بدون آنکه بین فرایندهای U و N تفاوت ویژه ای قائل شویم، برآورد کنیم؛ با استفاده از استدلال قبلی درباره آثار غیرخطی، انتظار داریم که در دماهای بالا مقاومت ویژه گرمایی شبکه را متناسب با T بیابیم.

انرژی فونونهای K_1 و K_2 ، که برای وقوع واگرد مناسب است از مرتبه $\frac{1}{2} k_B T$ است. زیرا، برای آنکه برخورد (۴۷) امکان پذیر باشد، بردار موج هر یک از فونونهای ۱ و ۲ باید از مرتبه $\frac{1}{2} G$ باشد. اگر هر دو فونون دارای K ی کوچک و در نتیجه دارای انرژی پائینی باشند، از برخورد آنها به هیچ وجه فونونی با بردار موجی که خارج از منطقه اول باشد به وجود نخواهد آمد. در فرایند واگرد، درست به گونه فرایند عادی، اصل پایستگی



شکل ۱۸. رسانندگی گرمایی بلور بسیار خالص سدیم فلورید.

انرژی باید برقرار باشد. در دماهای پایین می‌توان انتظار داشت که تعداد فونونهای مناسبی که انرژی زیاد لازم $k_B\theta$ را دارند، بر طبق ضریب بولتزمن، تقریباً به گونه $\exp(-\theta/2T)$ تغییر کند. این شکل نمایی با تجربه به خوبی سازگار است. به‌طور خلاصه، مسافت آزاد میانگین فونونی که در رابطه (۴۲) وارد می‌شود، مسافت آزاد میانگین برای برخوردهای واگرد بین فونونهاست و نه برای تمامی برخوردهای بین فونونها.

ناکاملیها

آثار هندسی نیز می‌توانند در محدود کردن مسافت آزاد میانگین مهم باشند. پراکندگی توسط مرزهای بلور، توزیع جرمهای ایزوتوپی در عناصر شیمیایی طبیعی، ناخالصیهای شیمیایی، ناکاملیهای شبکه، و ساختارهای بی‌شکل (آمورف) را نیز باید در نظر گرفت.

هنگامی که در دماهای پایین، مسافت آزاد میانگین l ، با پهنای نمونه مورد آزمایش قابل مقایسه می‌شود، پهنای نمونه مقدار l را محدود می‌کند و رسانندگی گرمایی تابعی از ابعاد نمونه می‌شود. این اثر را دوهااس و بیرماس^۱ کشف کردند. کاهش ناگهانی رسانندگی گرمایی بلورهای خالص در دماهای پایین از اثر پیکر ناشی می‌شود.

در دماهای پایین فرایند واگرد اثر خود را در محدود کردن رسانندگی از دست می‌دهد، و همان‌گونه که در شکل ۱۸ نشان داده شده است، اثر پیکر غالب می‌شود. در نتیجه می‌توان انتظار داشت که مسافت

آزاد میانگین فونون ثابت و از مرتبه قطر D نمونه باشد، در نتیجه

$$K \approx CvD \quad (۴۸)$$

تنها جمله وابسته به دما در طرف راست، ظرفیت گرمایی C است که در دماهای پایین به گونه T^3 تغییر می‌کند. انتظار داریم که رسانندگی گرمایی در دماهای پایین به شکل T^3 تغییر کند. اثر پیکر هنگامی ظاهر می‌شود، که مسافت آزاد فونون با قطر نمونه مقایسه پذیر باشد.

رسانندگی گرمایی بلورهای دی‌الکتریک ممکن است به اندازه رسانندگی گرمایی فلزات بالا باشد. یاقوت کبود مصنوعی (Al_2O_3) دارای یکی از بیشترین مقادیر رسانندگی است: تقریباً $200 \text{ W cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$ در دمای 30°K . بیشینه رسانندگی گرمایی یاقوت کبود از بیشینه رسانندگی گرمایی مس یعنی $100 \text{ W cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$ بیشتر است. ولی رسانندگی گرمایی گالیم فلزی در دمای 1 K برابر $845 \text{ W cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$ است. سهم الکترونی در رسانندگی گرمایی فلزات در فصل ۶ بررسی می‌شود.

توزیع ایزوتوپیهای عناصر شیمیایی، در بلوری که از سایر لحاظ کامل است، غالباً سازوکار مهمی برای پراکندگی فونونها فراهم می‌کند. توزیع کاتوره‌ای جرم ایزوتوپی، دوره‌ای بودن چگالی را از دیدگاه موج کشسان بر هم می‌زند. در بعضی مواد اهمیت پراکندگی فونونها توسط ایزوتوپها با پراکندگی توسط سایر فونونها مقایسه پذیر است. نتایج مربوط به ژرمانیم در شکل ۱۹ نشان داده شده‌اند. افزایش رسانندگی گرمایی در سیلیسیم و الماسی که خلوص ایزوتوپی دارند نیز مشاهده شده است؛ مورد اخیر به صورت چاهک گرمایی برای چشمه‌های لیزری اهمیت ابزاری دارد.

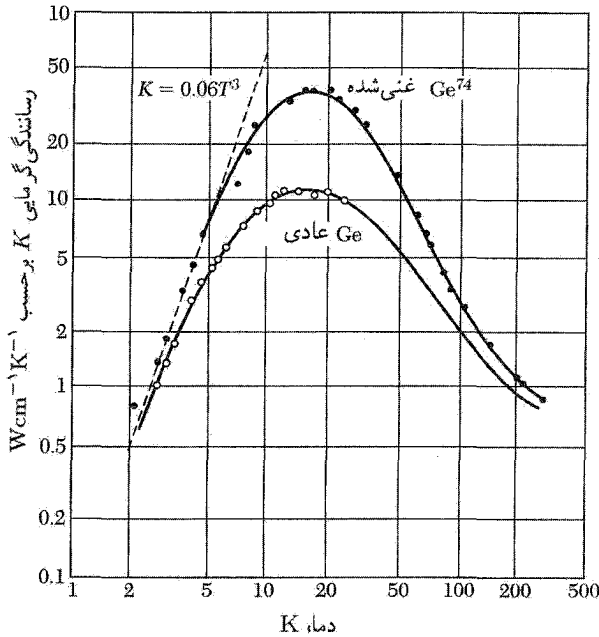
مسائل

۱. تکین در چگالی حالتها. (الف) استفاده از رابطه پاشیدگی که در فصل ۴ برای شبکه خطی تک‌اتمی با داشتن N اتم برهم‌کنش‌کننده با همسایه‌های اول به دست آمد، نشان دهید چگالی مدها برابر است با

$$D(\omega) = \frac{2N}{\pi} \cdot \frac{1}{(\omega_m^2 - \omega^2)^{1/2}}$$

که در آن ω_m بسامد بیشینه است. (ب) فرض کنید که در نزدیکی $K = 0$ یک شاخه فونون اپتیکی در سه بعد به شکل $\omega(K) = \omega_0 - AK^2$ باشد. نشان دهید که به ازای $\omega < \omega_0$ ، $D(\omega) = (L/2\pi)^3 (2\pi/A^3/2)(\omega_0 - \omega)^{1/2}$ و به ازای $\omega > \omega_0$ ، $D(\omega) = 0$. در اینجا چگالی مدها، ناپیوسته است.

۲. Rms انبساط گرمایی یاخته بلور. (الف) ریشه میانگین مربعی انبساط گرمایی $\Delta V/V$ یاخته بسیط سدیم را در 30°K برآورد کنید. مدول حجمی را برابر $7 \times 10^{11} \text{ erg cm}^{-3}$ بگیرید. دقت کنید



شکل ۱۹. اثر ایزوتوپی در مورد رسانندگی گرمایی ژرمانیم، که آن را در بیشینه رسانندگی تا سه برابر می‌رساند. در نمونه غنی شده ۹۶ درصد Ge^{74} و در ژرمانیم طبیعی ۲۰ درصد Ge^{70} ، ۲۷ درصد Ge^{72} ، ۸ درصد Ge^{73} ، ۳۷ درصد Ge^{74} و ۸ درصد Ge^{76} وجود دارد. در دماهای پایتتر از $5K$ ، برای نمونه غنی شده $T^3 = 6 \times 10^3 K$ ، که به خوبی با نظریه کازیمیر در مورد مقاومت گرمایی ناشی از پراکندگی مرزی سازگار است.

که دمای دبی $158K$ از $30^\circ K$ پایتتر و بنابراین انرژی گرمایی از مرتبه $k_B T$ است. (ب) از این نتیجه استفاده کنید و ریشه میانگین مربعی افت وخیر گرمایی $\Delta a/a$ پارامتر شبکه را برآورد کنید.

۳. جابه‌جایی شبکه در نقطه صفر و کرنش. (الف) در تقریب دبی، نشان دهید که میانگین مربعی جابه‌جایی اتم در صفر مطلق به صورت $\langle R^2 \rangle = 3 \hbar \omega_D^2 / \lambda \pi^2 \rho v^3$ است، که در آن v سرعت صوت است. با جمع کردن نتیجه (۲۹) از فصل ۴ روی مدهای مستقل شبکه، یعنی $\langle R^2 \rangle = (\hbar / 2 \rho V) \sum \omega^{-1}$ ، شروع می‌کنیم. برای تبدیل مربع دامنه به مربع جابه‌جایی یک ضریب $\frac{1}{3}$ وارد کرده‌ایم. (ب) نشان دهید که در شبکه یک بعدی $\sum \omega^{-1}$ و $\langle R^2 \rangle$ واگرا می‌شوند، ولی میانگین مربعی کرنش متناهی است. رابطه $\langle (\partial R / \partial x)^2 \rangle = \frac{1}{3} \sum K^2 u^2$ را میانگین مربعی کرنش در نظر بگیرید و نشان دهید که این کمیت برای یک خط N اتمی که جرم هر اتم آن M است، اگر فقط مدهای طولی را در نظر بگیریم، برابر $\hbar \omega_D^2 L / 4 M N v^3$ است. واگرایی R^2 در هیچ اندازه‌گیری فیزیکی‌ای مهم نیست.

۴. ظرفیت گرمایی شبکه لایه‌ای. (الف) بلوردی الکتریکی را با لایه‌های اتمی در نظر بگیرید. جفت‌شدگی

بین لایه‌ها را صلب فرض کنید به طوری که حرکت آنها به صفحه لایه محدود شده باشد. نشان دهید که ظرفیت گرمایی فونونی در تقریب دبی در حد دمای پایین متناسب با T^2 است. (ب) اکنون فرض کنید، مانند بسیاری از ساختارهای لایه‌ای، لایه‌های مجاور به طور ضعیف به یکدیگر مقید باشند. در دماهای بسیار پایین انتظار دارید ظرفیت گرمایی فونونی به چه شکلی نزدیک شود؟

*۵. ثابت گرونایزن. (الف) نشان دهید که انرژی آزاد یک مد فونونی با بسامد ω برابر است با $k_B T \ln [2 \sinh(\hbar\omega/2k_B T)]$. برای پیدا کردن این نتیجه لازم است انرژی نقطه صفر، $\frac{1}{2}\hbar\omega$ ، در نظر گرفته شود. (ب) اگر Δ تغییر حجم نسبی باشد، انرژی آزاد بور را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$F(\Delta, T) = \frac{1}{2} B \Delta^2 + k_B T \sum \ln \left[2 \sinh \frac{\hbar\omega_{\mathbf{K}}}{2k_B T} \right]$$

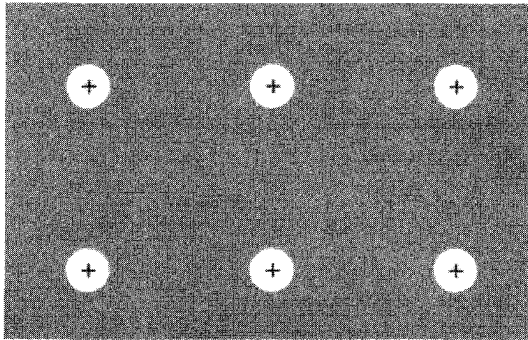
که در آن B مدول حجمی است. فرض کنید وابستگی حجمی $\omega_{\mathbf{K}}$ به صورت $\delta\omega/\omega = -\gamma\Delta$ باشد که γ را ثابت گرونایزن می‌نامند. اگر γ مستقل از مد \mathbf{K} در نظر گرفته شود، نشان دهید هرگاه $F, B, \Delta = \gamma \sum \frac{1}{2} \hbar\omega \coth(\hbar\omega/2k_B T)$ نسبت به Δ کمینه خواهد بود، و نشان دهید که این رابطه را برحسب چگالی انرژی گرمایی می‌توان به صورت $\Delta = \gamma U(T)/B$ نوشت. (ج) نشان دهید در مدل دبی، $\gamma = -\partial \ln \theta / \partial \ln V$. توجه: در این نظریه تقریبهای بسیاری به کار رفته‌اند: نتیجه (الف) فقط هنگامی که ω مستقل از دما باشد صادق است؛ γ برای مدهای مختلف می‌تواند کاملاً متفاوت باشد.

گاز فرمی الکترون آزاد

در نظریه‌ای که چنین نتایجی را به بار آورده است، باید یقیناً حقایق بسیاری نهفته باشد.

ه. ا. لورنتس

تعدادی از ویژگیهای مهم فلزها، نه فقط مربوط به فلزهای ساده، را می‌توان برحسب مدل الکترون آزاد درک کرد. برطبق این مدل، الکترونهای ظرفیتی اتمهای تشکیل‌دهنده فلز، الکترونهای رسانش می‌شوند و آزادانه درون فلز به اطراف حرکت می‌کنند. معلوم شده است که حتی در مورد فلزهایی که مدل الکترون آزاد برای آنها به نتایج خوبی می‌انجامد توزیع بار الکترونهای رسانش پتانسیل الکتروستاتیکی قوی مغزهای یونی را منعکس می‌کند. سودمندی مدل الکترون آزاد بیشتر در مورد آزمایشهایی است که عمدتاً به ویژگیهای جنبشی الکترونهای رسانش بستگی دارند. برهم‌کنش الکترونهای رسانش با یونهای شبکه در فصل بعد بررسی می‌شود. ساده‌ترین فلزها، فلزهای قلیایی‌اند (لیتیم، سدیم، پتاسیم، سزیم و روبیدیم): در اتم آزاد سدیم الکترون ظرفیت در حالت $3s$ است که در این فلز به صورت الکترون رسانش در نوار رسانش $3s$ می‌شود.



شکل ۱. مدل طرح وار بلور فلز سدیم. یونهای Na^+ مغزهای اتمی اند که در دریایی از الکترونهای رسانش غوطه‌ورند. الکترونهای رسانش از الکترونهای ظرفیت $3s$ اتمهای آزاد مشتق شده‌اند. مغزهای اتمی شامل 10 الکترون با پیکربندی $1s^2 2s^2 2p^6$ هستند. در فلز قلیایی، مغزهای اتمی قسمت نسبتاً کوچکی (~ 15 درصد) از حجم کل بلور را اشغال می‌کنند، ولی در فلز نجیب (Cu, Ag, Au) مغزهای اتمی نسبتاً بزرگترند و ممکن است با یکدیگر در تماس باشند. ساختار بلوری متداول در دمای اتاق برای فلزهای قلیایی bcc و برای فلزهای نجیب fcc است.

بلوری یک ظرفیتی که شامل N اتم است، N الکترون رسانش و N مغز یونی مثبت دارد. مغز یونی Na^+ شامل 10 الکترون است که پوسته‌های $1s$ ، $2s$ ، و $2p$ یون آزاد را اشغال می‌کنند، توزیع الکترونهای مغز، یونی در فلز و در یون آزاد اساساً یکسان است. مغزهای یونی، به‌گونه‌ی شکل ۱، تنها حدود ۱۵ درصد حجم بلور سدیم را اشغال می‌کنند. شعاع یون آزاد Na^+ برابر است با 98 \AA ، در حالی‌که نصف فاصله همسایه اول در این فلز برابر 183 \AA است.

تعبیر ویژگیهای فلزی برحسب حرکت الکترونهای آزاد بسیار پیش از ابداع مکانیک کوانتومی گسترش یافت. نظریه کلاسیکی چندین موفقیت چشمگیر، به‌ویژه در به‌دست آوردن شکل قانون اهم و رابطه بین رسانندگی گرمایی و الکتریکی، داشت. نظریه کلاسیکی در توضیح ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی الکترونهای رسانش با شکست روبه‌رو می‌شود (این شکست نظریه الکترون آزاد نیست، بلکه شکستهای تابع کلاسیکی توزیع ماکسول است).

مشکل دیگری نیز برای مدل کلاسیکی وجود دارد. آزمایشهای گوناگون بسیاری نشان می‌دهند که الکترون رسانش در فلز می‌تواند فواصل اتمی متعددی را در مسیر مستقیمی آزادانه بپیماید، بدون آنکه در اثر برخورد با سایر الکترونهای رسانش یا مغزهای اتمی منحرف شود. در یک نمونه بسیار خالص در دماهای پایین مسافت آزاد میانگین الکترون آزاد ممکن است تا 10^8 برابر فاصله بین اتمی (بیش از یک سانتیمتر) باشد. چرا جسم چگال می‌تواند تا این حد در مقابل الکترونهای رسانش شفاف باشد؟ پاسخ این سؤال شامل دو قسمت است. (الف) مغزهای یونی که روی یک شبکه دوره‌ای مرتب شده‌اند الکترون رسانش را منحرف

نمی‌کنند، زیرا امواج مادی، به دلیل محاسباتی که در فصل بعد مطرح می‌شود، آزادانه در ساختار دوره‌ای منتشر می‌شوند. (ب) سایر الکترونیهای رسانش به ندرت الکترون رسانش را پراکنده می‌کنند. این ویژگی پیامدی از اصل طرد پاولی است. منظور از گاز فرمی الکترون آزاد، گازی از الکترونیهای آزاد است که تابع اصل پاولی باشد.

ترازهای انرژی در یک بعد

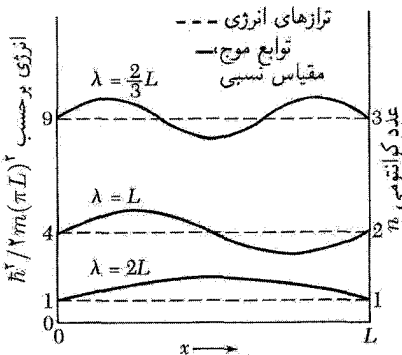
گاز الکترون آزاد یک بعدی را با توجه به نظریه کوانتومی و اصل پاولی در نظر می‌گیریم. الکترونی به جرم m ، توسط سدهای نامتناهی، در طول L محبوس است (شکل ۲). تابع موج الکترون پاسخی از معادله شرودینگر $\mathcal{H}\psi = \epsilon\psi$ است. با چشم‌پوشی از انرژی پتانسیل داریم: $\mathcal{H} = p^2/2m$ ، که در آن p تکانه است. در نظریه کوانتومی p را می‌توان با عملگر $-i\hbar d/dx$ نمایش داد، در نتیجه

$$\mathcal{H}\psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_n}{dx^2} = \epsilon_n\psi_n \quad (۱)$$

که در آن ϵ_n انرژی الکترون در اوربیتال است.

از واژه اوربیتال برای مشخص کردن پاسخ معادله موج برای دستگاهی استفاده می‌کنیم، که تنها شامل یک الکترون است. این واژه امکان تشخیص یک حالت کوانتومی دقیق معادله موج دستگاه N الکترونی را از یک حالت کوانتومی تقریبی فراهم می‌کند. این حالت تقریبی را با اختصاص دادن N الکترون به N اوربیتال مختلف که هر یک پاسخی از یک معادله موج الکترون است، بنا می‌کنیم. این مدل اوربیتالی فقط وقتی دقیق است که هیچ برهم‌کنشی بین الکترونها صورت نگیرد.

شرایط مرزی که سد انرژی پتانسیل نامتناهی تحمیل می‌کند، عبارت‌اند از $\psi_n(0) = 0$ و $\psi_n(L) = 0$ ؛ این شرایط هنگامی برآورده می‌شوند که تابع موج، سینوس‌گونه و تعداد نیم‌طول موجها در فاصله 0 و L برابر عدد درست n باشد.



شکل ۲. سه تراز اول انرژی و توابع موج آنها مربوط به الکترون آزادی به جرم m که در خطی به طول L محبوس است. ترازهای انرژی برحسب عدد کوانتومی n ، که تعداد نیم‌طول موجها را در تابع موج مشخص می‌کند، شاخص‌گذاری شده‌اند. طول موجها روی توابع موج مشخص شده‌اند. انرژی ϵ_n مربوط به تراز با عدد کوانتومی n برابر است با $(\hbar^2/2m)(n/2L)^2$.

$$\psi_n = A \sin\left(\frac{\sqrt{2}\pi}{\lambda_n} x\right); \quad \frac{1}{\sqrt{2}} n \lambda_n = L \quad (2)$$

که در آن A ثابت است. مشاهده می‌شود که (۲) پاسخی از (۱) است، زیرا

$$\frac{d\psi_n}{dx} = A \left(\frac{n\pi}{L}\right) \cos\left(\frac{n\pi}{L} x\right); \quad \frac{d^2\psi_n}{dx^2} = -A \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

در نتیجه انرژی ϵ_n از رابطه زیر به دست می‌آید

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \quad (3)$$

می‌خواهیم n الکترون را روی این خط جای دهیم. بنابر اصل طرد پائولی هیچ دو الکترونی نمی‌توانند دارای اعداد کوانتومی یکسان باشند. یعنی، هر اوربیتال حداکثر با یک الکترون اشغال می‌شود. این امر در مورد الکترونهای اتمها، مولکولها، یا جامدات صادق است.

در جامد خطی، اعداد کوانتومی اوربیتال الکترون رسانش عبارت‌اند از n و m_s که n هر عدد درست مثبتی است و، برحسب جهت اسپین، عدد کوانتومی مغناطیسی $m_s = \pm \frac{1}{2}$ یک زوج اوربیتال که با عدد کوانتومی n مشخص شده باشد، می‌تواند دو الکترون، یکی با اسپین بالا و دیگری با اسپین پایین، در خود جای دهد.

اگر شش الکترون موجود باشد، اوربیتالهای پر شده در حالت پایه دستگاه در جدول زیر آمده‌اند:

ضریب اشغال الکترون		m_s	n	ضریب اشغال الکترون		m_s	n
۱	↑	۳	۱	↑	۱	۱	۱
۱	↓	۳	۱	↓	۱	۱	۱
۰	↑	۴	۱	↑	۲	۱	۲
۰	↓	۴	۱	↓	۲	۱	۲

ممکن است بیش از یک اوربیتال دارای انرژی یکسان باشند. تعداد اوربیتالهای هم‌انرژی را واگنی می‌نامند. فرض کنید بالاترین تراز انرژی پر با n_F نشان داده شود. عمل پر کردن ترازها با الکترونها را از پایین ($n = 1$) شروع می‌کنیم و به این کار ادامه می‌دهیم تا همه N الکترون جای داده شوند. مناسبتر است N را عدد زوج فرض کنیم. مقدار n را برای بالاترین تراز پر، یعنی n_F ، می‌توان با استفاده از شرط $2n_F = N$ به دست آورد.

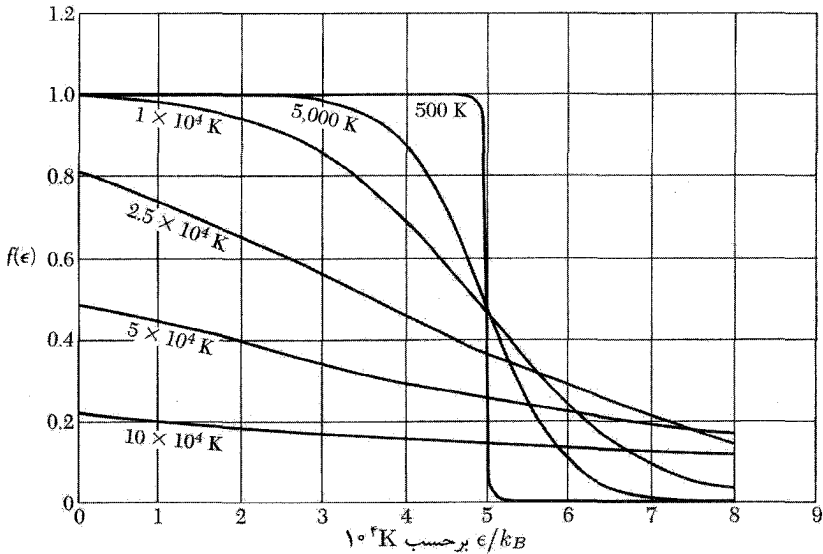
انرژی فرمی ϵ_F بنابه تعریف عبارت است از انرژی بالاترین تراز پر در حالت پایه تک دستگانه N الکترونی. به کمک رابطه (۳) با قرار دادن $n = n_F$ در یک بعد داریم:

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n_F \pi}{L} \right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N \pi}{2L} \right)^2 \quad (4)$$

اثر دما روی توزیع فرمی-دیراک

حالت پایه، حالت دستگانه N الکترونی در صفر مطلق است. اگر دما زیاد شود چه اتفاقی می افتد؟ این یک مسئله استاندارد در مکانیک آماری مقدماتی است و پاسخ آن با تابع توزیع فرمی-دیراک داده می شود (پیوست د و فصل ۷ کتاب فیزیک گرما، TP).

انرژی جنبشی گاز الکترون با افزایش دما زیاد می شود: بعضی ترازهای انرژی که در صفر مطلق خالی بودند، اشغال می شوند و بعضی ترازها که در صفر مطلق اشغال شده بودند، خالی می شوند (شکل ۳). احتمال اینکه اوربیتالی با انرژی ϵ در گاز الکترون ایده آل در تعادل گرمایی اشغال شود با توزیع فرمی-دیراک



شکل ۳. تابع توزیع فرمی-دیراک در دماهای مختلف به ازای $T_F \equiv \epsilon_F/k_B = 50000 \text{ K}$. این نتایج در مورد گاز در سه بعد نیز صادق است. تعداد کل ذرات ثابت و مستقل از دماست. در هر دما پتانسیل شیمیایی را می توان از نمودار مربوطه به صورت انرژی ای که در آن $f = 0.5$ است، به دست آورد.

داده می‌شود:

$$f(\epsilon) = \frac{1}{\exp[(\epsilon - \mu)/k_B T] + 1} \quad (5)$$

کمیت μ تابعی از دماست؛ μ را در هر مسئله خاص باید به گونه‌ای برگزید که برای تعداد کل ذرات موجود در دستگاه پاسخ صحیح، که همان N است، به دست آید. در صفر مطلق داریم $\mu = \epsilon_F$ ، زیرا در حد $T \rightarrow 0$ تابع $f(\epsilon)$ به ازای $\mu = \epsilon_F = \mu$ به طور ناپیوسته از مقدار یک (پر) به مقدار صفر (خالی) تغییر می‌کند. در همهٔ دماها $f(\epsilon)$ به ازای μ برابر $\frac{1}{2}$ است، زیرا در این صورت مخرج کسر در رابطه (۵) برابر ۲ خواهد شد. کمیت μ به پتانسیل شیمیایی معروف است (TP ، فصل پنجم) و مشاهده می‌کنیم که در صفر مطلق پتانسیل شیمیایی برابر انرژی فرمی است که، در بالا، انرژی فرمی بالاترین اوربیتال پر در صفر مطلق تعریف شده است.

دنبالهٔ منحنی توزیع در انرژیهای بالا قسمتی است که برای آن $\epsilon - \mu \gg k_B T$ ؛ در اینجا جملهٔ نمایی در مخرج (۵) نقش عمده را داراست، بنابراین $f(\epsilon) \cong \exp[(\mu - \epsilon)/k_B T]$ ، که همان توزیع بولتزمن یا ماکسول است.

گاز الکترون آزاد در سه بعد

معادلهٔ شرودینگر ذرهٔ آزاد در سه بعد عبارت است از

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (6)$$

اگر الکترونها در مکعبی به ضلع L محبوس باشند، تابع موج به صورت موج ایستاده است،

$$\psi_n(\mathbf{r}) = A \sin(\pi n_x x/L) \sin(\pi n_y y/L) \sin(\pi n_z z/L) \quad (7)$$

که در آن n_x, n_y, n_z اعداد درست مثبت‌اند. مبدأ مختصات در یک گوشهٔ مکعب است. همان‌گونه که در فصل ۵ در مورد فونونها انجام شد، مناسب است توابع موجی معرفی کنیم که در شرایط مرزی دوره‌ای صدق کنند. در اینجا لازم است توابع موج بر حسب x, y, z ، با دورهٔ L ، دوره‌ای باشند. در نتیجه

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z) \quad (8)$$

و همین‌طور برای مختصات y و z توابع موجی که در معادلهٔ شرودینگر ذرهٔ آزاد و شرط دوره‌ای بودن صدق می‌کنند، به صورت موج تخت متحرک خواهند بود:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (9)$$

مشروط بر اینکه مؤلفه‌های بردار موج \mathbf{k} در شرط زیر صدق کنند،

$$k_x = 0; \quad \pm \frac{2\pi}{L}; \quad \pm \frac{4\pi}{L}; \dots \quad (10)$$

و همین‌طور برای k_y و k_z .

هر مؤلفه \mathbf{k} که به صورت $2n\pi/L$ است، شرط دوره‌ای را در طول L برآورده می‌کند که در آن n عدد درست مثبت یا منفی است. مؤلفه‌های k و عدد کوانتومی m_s ، برای جهت اسپین، اعداد کوانتومی مسئله‌اند. این مقادیر k_x در رابطه (۸) صدق می‌کنند، زیرا

$$\begin{aligned} \exp[ik_x(x+L)] &= \exp[i2n\pi(x+L)/L] \\ &= \exp(i2n\pi x/L) \exp(i2n\pi) = \exp(i2n\pi x/L) = \exp(ik_x x) \end{aligned} \quad (11)$$

با نشانیدن (۹) در (۶) انرژی $\epsilon_{\mathbf{k}}$ مربوط به اوربیتال با بردار موج \mathbf{k} برابر خواهد بود با

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (12)$$

بزرگی بردار موج از رابطه $k = 2\pi/\lambda$ به طول موج مربوط می‌شود.

در مکانیک کوانتومی، تکانه خطی \mathbf{p} را می‌توان با عملگر $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ نشان داد. بنابراین، برای اوربیتال رابطه (۹) داریم

$$\mathbf{p}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -i\hbar\nabla\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \hbar\mathbf{k}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (13)$$

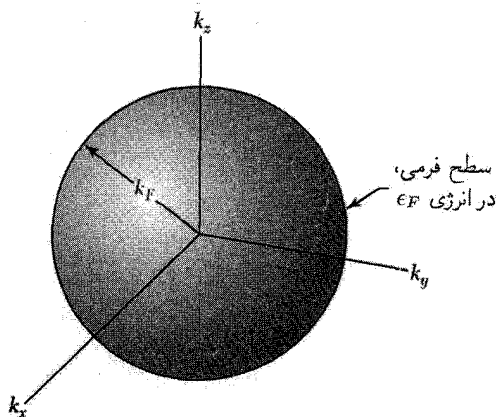
در نتیجه موج تخت $\psi_{\mathbf{k}}$ ویژه‌تابع تکانه خطی با ویژه‌مقدار $\hbar\mathbf{k}$ خواهد بود. سرعت ذره در اوربیتال \mathbf{k} از رابطه $\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k}/m$ به دست می‌آید.

در حالت پایه یک دستگاه شامل N الکترون آزاد، اوربیتالهای اشغال شده را می‌توان به صورت نقاطی داخل کره‌ای در فضای \mathbf{k} نشان داد. انرژی در سطح کره برابر انرژی فرمی است؛ بزرگی بردار موجها در سطح فرمی برابر k_F است (شکل ۴). بنابراین:

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \quad (14)$$

با استفاده از رابطه (۱۰) مشاهده می‌شود که برای عنصر حجم $(2\pi/L)^3$ در فضای \mathbf{k} ، یک بردار موج مجاز — یعنی، یک دسته سه‌تایی متمایز از اعداد کوانتومی k_x ، k_y و k_z — وجود دارد. بنابراین در کره‌ای به حجم $4\pi k_F^3/3$ تعداد کل اوربیتالها برابر است با

$$2 \cdot \frac{4\pi k_F^3/3}{(2\pi/L)^3} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 = N \quad (15)$$



شکل ۴. در حالت پایه یک دستگاه شامل N الکترون آزاد، اوربیتالهای اشغال شده دستگاه، کره‌ای به شعاع k_F را پر می‌کنند. $\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ انرژی الکترون با بردار موج k_F است.

ضریب ۲ در طرف چپ به این دلیل آمده است که برای هر مقدار مجاز k دو مقدار عدد کوانتومی اسپینی، وجود دارد. بنابراین از رابطه (۱۵) نتیجه می‌شود

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \quad (16)$$

که فقط به غلظت الکترونی بستگی دارد.

با استفاده از روابط (۱۴) و (۱۶) داریم

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3} \quad (17)$$

این رابطه انرژی فرمی را به غلظت الکترونی N/V مربوط می‌کند. v_F سرعت الکترون در سطح فرمی، برابر است با

$$v_F = \left(\frac{\hbar k_F}{m} \right) = \left(\frac{\hbar}{m} \right) \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \quad (18)$$

مقادیر محاسبه شده k_F ، v_F ، و ϵ_F برای فلزات برگزیده‌ای در جدول ۱ ارائه شده‌اند. در این جدول مقادیر کمیت T_F نیز، که به صورت ϵ_F / k_B تعریف می‌شود، داده شده‌اند. (کمیت T_F هیچ ارتباطی با دمای گاز الکترون ندارد!).

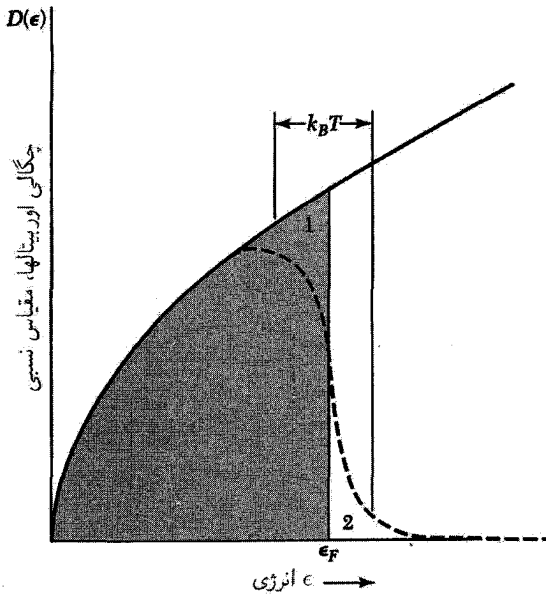
اینک عبارتی برای تعداد اوربیتالهای در واحد گستره انرژی، یعنی $D(\epsilon)$ ، که چگالی حالتها^۱ نامیده

۱. $D(\epsilon)$ اکیداً چگالی حالتهای یک ذره‌ای، یا چگالی اوربیتالهاست.

جدول ۱. پارامترهای محاسبه‌شده سطح فرمی الکترون آزاد برای فازات در دمای اتاق
(بجز برای Cs, Rb, K, Na در ΔK و Li در ۷۸K)

ظرفیت	فاز	غلظت الکترونی برحسب cm^{-3}	پارامتر شعاعی* r_n	بردار موج فرمی برحسب cm^{-1}	سرعت فرمی برحسب cm s^{-1}	انرژی فرمی برحسب eV	دمای فرمی $T_F \equiv \epsilon_F/k_B$ برحسب درجه کلوین
۱	Li	4.7×10^{22}	۳.۲۵	1.11×10^8	1.29×10^6	۴.۷۲	5.48×10^4
	Na	2.65	۳.۹۳	۰.۹۲	۱.۰۷	۳.۲۳	۳.۷۵
۲	K	1.4	۴.۸۶	۰.۷۵	۰.۸۶	۲.۱۲	۲.۴۶
	Rb	1.15	۵.۲۰	۰.۷۰	۰.۸۱	۱.۸۵	۲.۱۵
	Cs	۰.۹۱	۵.۶۳	۰.۶۴	۰.۷۵	۱.۵۸	۱.۸۳
	Cu	8.45	۲.۶۷	۱.۳۶	۱.۵۷	۷.۰۰	۸.۱۲
	Ag	5.85	۳.۰۲	۱.۲۰	۱.۳۹	۵.۴۸	۶.۳۶
	Au	5.9	۳.۰۱	۱.۲۰	۱.۳۹	۵.۵۱	۶.۳۹
	Be	۴.۴۲	۱.۸۸	۱.۹۳	۲.۲۳	۱۴.۱۴	۱۶.۴۱
	Mg	8.6	۲.۶۵	۱.۳۷	۱.۵۸	۷.۱۳	۸.۲۷
	Ca	۴.۶۰	۳.۲۷	۱.۱۱	۱.۲۸	۴.۶۸	۵.۴۳
	Sr	3.56	۳.۵۶	۱.۰۲	۱.۱۸	۳.۹۵	۴.۵۸
۳	Ba	3.2	۳.۶۹	۰.۹۸	۱.۱۳	۳.۶۵	۴.۲۴
	Zn	1.31	۲.۳۱	۱.۵۷	۱.۸۲	۹.۳۹	۱۰.۹۰
	Cd	9.28	۲.۵۹	۱.۴۰	۱.۶۲	۷.۴۶	۸.۶۶
	Al	1.8	۲.۰۷	۱.۷۵	۲.۰۲	۱۱.۶۳	۱۳.۴۹
	Ga	15.3	۲.۱۹	۱.۹۱	۱.۹۱	۱۰.۳۵	۱۲.۰۱
	In	11.49	۲.۴۱	۱.۵۰	۱.۷۴	۸.۶۰	۹.۹۸
	Pb	13.2	۲.۳۰	۱.۵۷	۱.۸۲	۹.۳۷	۱۰.۸۷
	Sn ^(m)	14.48	۲.۲۳	۱.۶۲	۱.۸۸	۱۰.۰۳	۱۱.۶۴

* پارامتر شعاعی بدون بعد به صورت $r_n = \hbar^3 / a_H$ که در آن a_H شعاع مدار اول بور و \hbar شعاع گرای است که شامل یک الکترون می‌شود.



شکل ۵. چگالی حالت‌های تک‌ذره‌ای به صورت تابعی از انرژی برای گاز الکترون آزاد در سه بعد. منحنی خط‌چین چگالی $D(\epsilon)f(\epsilon, T)$ اوربیتال‌های پر را در دمای متناهی در صورتی نمایش می‌دهد. که $k_B T$ در مقایسه با ϵ_F کوچک باشد. مساحت هاشورزده اوربیتال‌های پر را در صفر مطلق نشان می‌دهد. هنگامی که دما از صفر به T افزایش یابد انرژی میانگین زیاد می‌شود، زیرا الکترون‌ها به‌طور گرمایی از ناحیه ۱ به ناحیه ۲ برانگیخته می‌شوند.

می‌شود، به دست می‌آوریم. با استفاده از (۱۷) تعداد کل اوربیتال‌هایی را که انرژی آنها کوچکتر یا مساوی ϵ است پیدا می‌کنیم:

$$N = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (19)$$

در نتیجه چگالی اوربیتال‌های (شکل ۵) عبارت است از

$$D(\epsilon) \equiv \frac{dN}{d\epsilon} = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \epsilon^{1/2} \quad (20)$$

این نتیجه را می‌توان به‌سادگی، با مقایسه روابط (۱۹) و (۲۰) در انرژی ϵ به صورت زیر به دست آورد.

$$D(\epsilon) \equiv \frac{dN}{d\epsilon} = \frac{3N}{2\epsilon} \quad (21)$$

تعداد اوربیتال‌ها در واحد گستره انرژی در انرژی فرمی، همان‌گونه که انتظار می‌رود با ضریب تناسبی از مرتبه واحد، درست برابر تعداد کل الکترون‌های رسانش تقسیم بر انرژی فرمی است.

ظرفیت گرمایی گاز الکترون

مسئله‌ای که باعث ایجاد بزرگترین مشکل در پیشبرد اولیه نظریه الکترونی فلزات شد، مربوط به ظرفیت گرمایی الکترونی‌های رسانش بود. مکانیک آماری کلاسیک پیش‌بینی می‌کند که ذره آزاد باید دارای ظرفیت گرمایی $\frac{3}{2}k_B$ باشد، که در آن k_B ثابت بولتزمن است. اگر هر یک از N اتم موجود یک الکترون ظرفیت خود را به گاز الکترون بدهد، و این الکترونها آزادانه حرکت کنند، سهم الکترونی در ظرفیت گرمایی باید درست به‌گونه ظرفیت گرمایی گاز تک‌اتمی، $\frac{3}{2}Nk_B$ ، باشد. ولی سهم الکترونی مشاهده‌شده در ظرفیت گرمایی در دمای اتاق معمولاً از 10^{-1} مقدار کمتر است.

این اختلاف مهم برای پژوهشگران اولیه، چون لورنتس، این ابهام را به‌وجود آورد: چگونه ممکن است الکترونها در ظرفیت گرمایی سهمی نداشته باشند ولی در فرایندهای رسانش الکتریکی به‌گونه‌ای شرکت کنند که گویی کاملاً متحرک‌اند؟ به این سؤال فقط با کشف اصل طرد پاؤلی و تابع توزیع فرمی پاسخ داده شد. فرمی معادله صحیح را یافت و چنین نوشت، «درمی‌یابیم که ظرفیت گرمایی در صفر مطلق صفر می‌شود و در دماهای پایین با دمای مطلق متناسب است.»

هنگامی که نمونه‌ای را از صفر مطلق گرم می‌کنیم، آن‌طور که به‌گونه کلاسیکی انتظار می‌رود، همه الکترونها انرژی در حدود $k_B T$ کسب نمی‌کنند، بلکه تنها الکترونی‌هایی که در اوربیتال‌هایی در گستره انرژی $k_B T$ از تراز فرمی قرار دارند، مانند شکل ۵، به‌گونه گرمایی برانگیخته می‌شوند؛ این مطلب یک پاسخ کیفی سریع به مسئله ظرفیت گرمایی گاز الکترون رسانش می‌دهد. اگر تعداد کل الکترونها N باشد، تنها کسر مرتبه T/T_F آنها در دمای T به‌صورت گرمایی برانگیخته می‌شوند، زیرا فقط این الکترونها در گستره انرژی مرتبه $k_B T$ در بالای توزیع انرژی قرار می‌گیرند.

انرژی گرمایی هر یک از این NT/T_F الکترون از مرتبه $k_B T$ است. انرژی جنبشی گرمایی الکترونی کل، U ، از مرتبه

$$U_{el} \approx (NT/T_F)k_B T \quad (22)$$

خواهد بود. ظرفیت گرمایی الکترونی از این رابطه به‌دست می‌آید:

$$C_{el} = \partial U / \partial T \approx Nk_B(T/T_F) \quad (23)$$

که مستقیماً با T متناسب است و با آن نتایج تجربی که در بخش بعد بحث می‌شود، سازگار است. در دمای اتاق، برای $T_F \sim 5 \times 10^4 \text{ K}$ ، C_{el} از مقدار کلاسیکی $\frac{3}{2}Nk_B$ ، با ضریبی از مرتبه 10^{-1} یا کمتر از آن، کوچکتر خواهد بود.

حال یک عبارت کمی برای ظرفیت گرمایی الکترونی، که در دماهای پایین $k_B T \ll \epsilon_F$ معتبر باشد، به دست می‌آوریم. هنگامی که دمای دستگاهی شامل N الکترون در صفر به T برسد، افزایش انرژی کل $\Delta U \equiv U(T) - U(0)$ (شکل ۵) برابر است با

$$\Delta U = \int_0^\infty d\epsilon \epsilon D(\epsilon) f(\epsilon) - \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon D(\epsilon) \quad (24)$$

در اینجا $f(\epsilon)$ تابع فرمی-دیراک (۵) است:

$$f(\epsilon, T, \mu) = \frac{1}{\exp[(\epsilon - \mu)/k_B T] + 1} \quad (24 \text{ الف})$$

و $D(\epsilon)$ تعداد اوربیتالها در واحد گستره انرژی است. تعداد ذرات

$$N = \int_0^\infty d\epsilon D(\epsilon) f(\epsilon) = \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon D(\epsilon) \quad (25)$$

را در ϵ_F ضرب می‌کنیم تا این عبارت را به دست آوریم

$$\left(\int_0^{\epsilon_F} + \int_{\epsilon_F}^\infty \right) d\epsilon \epsilon_F f(\epsilon) D(\epsilon) = \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon_F D(\epsilon) \quad (26)$$

با استفاده از رابطه (۲۶)، می‌توان معادله (۲۴) را به صورت زیر نوشت

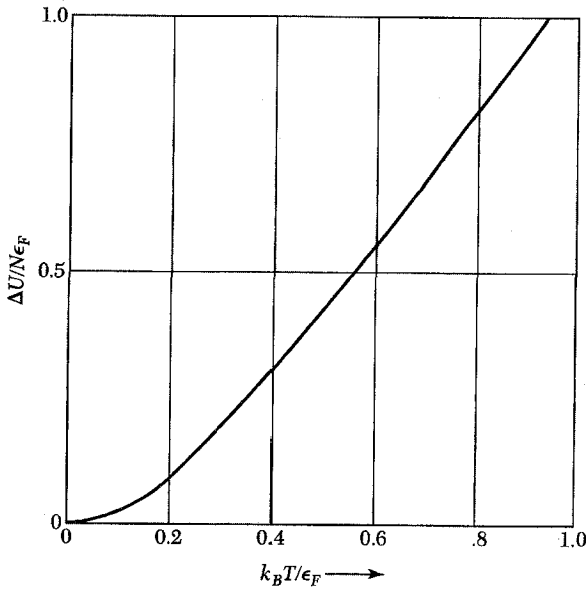
$$\Delta U = \int_{\epsilon_F}^\infty d\epsilon (\epsilon - \epsilon_F) f(\epsilon) D(\epsilon) + \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon (\epsilon_F - \epsilon) [1 - f(\epsilon)] D(\epsilon) \quad (27)$$

نخستین انتگرال در طرف راست رابطه (۲۷) انرژی مورد نیاز را برای بردن الکترونها از ϵ_F به اوربیتالهای با انرژی $\epsilon > \epsilon_F$ ارائه می‌دهد، و دومین انتگرال برابر انرژی مورد نیاز برای آوردن الکترونها از اوربیتالهای زیر ϵ_F به ϵ_F است. این انرژیها هر دو مثبت‌اند.

حاصلضرب $f(\epsilon) D(\epsilon) d\epsilon$ در نخستین انتگرال (۲۷) برابر است با تعداد الکترونهايي که به اوربیتالهای در گستره انرژی $d\epsilon$ در انرژی ϵ صعود کرده‌اند. عامل $[1 - f(\epsilon)]$ در انتگرال دوم عبارت است از احتمال کنده شدن یک الکترون از اوربیتال ϵ . تابع ΔE در شکل ۶ ترسیم شده است.

گرمای ویژه گاز الکترونی از دیفرانسیل‌گیری ΔU نسبت به T به دست می‌آید. $f(\epsilon)$ تنها جمله وابسته به دما در رابطه (۲۷) است، لذا می‌توانیم جملات را جمع کنیم تا رابطه زیر حاصل شود

$$C_{el} = \frac{dU}{dT} = \int_0^\infty d\epsilon (\epsilon - \epsilon_F) \frac{df}{dT} D(\epsilon) \quad (28)$$



شکل ۶. وابستگی دمایی انرژی گاز فرمیونی برهم‌کنش‌ناپذیر در سه‌بعد. انرژی بهنجار شده به صورت $\Delta U/N\epsilon_F$ نمایش داده شده است، که در آن N تعداد الکترونهاست. دما به صورت $k_B T/\epsilon_F$ نشان داده شده است.

در دماهای مورد نظر در فلزات، $\tau/\epsilon_F < 10^{-5}$ ، و از شکل ۳ متوجه می‌شویم که $(\epsilon - \epsilon_F)df/dT$ در انرژی‌های نزدیک ϵ_F دارای قله‌های مثبت بزرگی است. با تقریب خوبی می‌توان چگالی حالتها، $D(\epsilon)$ ، را در ϵ_F حساب کرده آن را از انتگرال بیرون آوریم

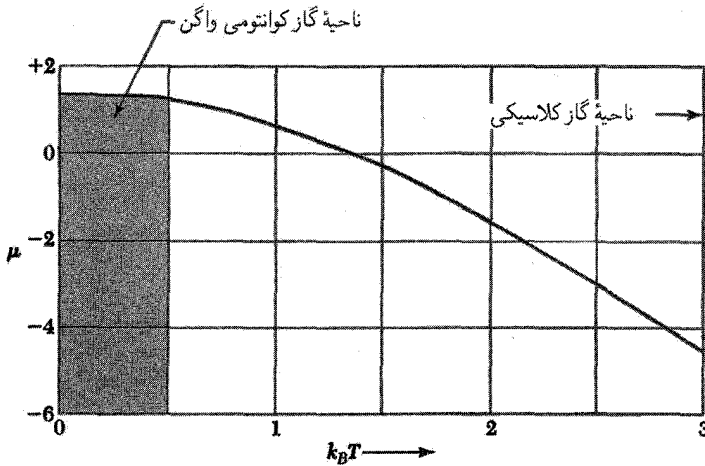
$$C_{el} \cong D(\epsilon_F) \int_0^{\infty} d\epsilon (\epsilon - \epsilon_F) \frac{df}{dT} \quad (29)$$

بررسی منحنیهای تغییرات μ بر حسب T در شکل‌های ۷ و ۸ حاکی از آن است که وقتی $k_B \ll \epsilon_F$ وابستگی دمایی پتانسیل شیمیایی μ در تابع توزیع فرمی-دیراک چشم‌پوشیدنی است و می‌توان به جای μ مقدار ثابت ϵ_F را قرار داد. آنگاه با $\tau \equiv k_B T$ داریم

$$\frac{df}{d\tau} = \frac{\epsilon - \epsilon_F}{\tau^2} \cdot \frac{\exp[(\epsilon - \epsilon_F)/\tau]}{\{\exp[(\epsilon - \epsilon_F)\tau] + 1\}^2} \quad (30)$$

با قراردادن

$$x \equiv (\epsilon - \epsilon_F)/\tau \quad (31)$$



شکل ۷. منحنی نمایش انرژی شیمیایی μ برحسب دما به گونه $k_B T$ برای یک گاز از فرمیونهای برهم‌کنش‌ناپذیر در سه بعد. برای سهولت ترسیم، واحدهای μ ، $k_B T$ با $763 \epsilon_F$ و 0 برابرند.

از روابط (۲۹) و (۳۰) داریم

$$C_{el} = k_B^2 T D(\epsilon_F) \int_{-\epsilon_F/T}^{\infty} dx x^2 \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} \quad (32)$$

می‌توان حد پایینی انتگرال را با اطمینان $-\infty$ قرار داد، زیرا اگر دماهای پایین مورد نظر باشند، به طوری که $\epsilon_F/T \sim 100$ یا بیشتر باشد، عامل e^x در $x = -\epsilon_F/T$ در انتگرالده تقریباً چشم‌پوشیدنی خواهد بود. این انتگرال به این صورت درمی‌آید

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} = \frac{\pi^2}{3} \quad (33)$$

در نتیجه ظرفیت گرمایی گاز الکترون عبارت است از

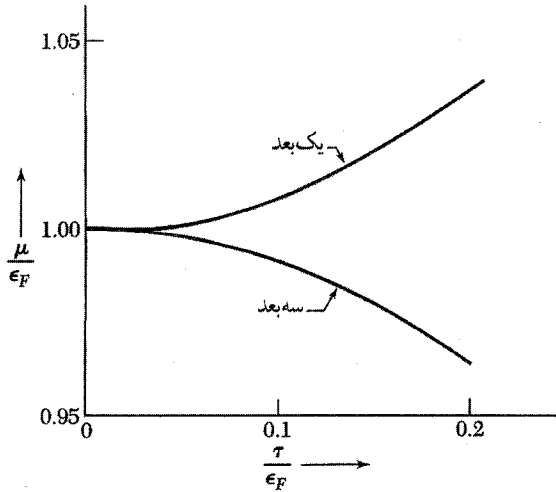
$$C_{el} = \frac{1}{3} \pi^2 D(\epsilon_F) k_B^2 T \quad (34)$$

برای گاز الکترون آزاد، با $k_B T_f \equiv \epsilon_F$ از رابطه (۲۱) داریم

$$D(\epsilon_F) = 3N/2\epsilon_F = 3N/2k_B T_f \quad (35)$$

بدین ترتیب رابطه (۳۴) به صورت زیر درمی‌آید

$$C_{el} = \frac{1}{2} \pi^2 N k_B T / T_f \quad (36)$$



شکل ۸. تغییر پتانسیل شیمیایی μ با دما، برای گازهای فرمی الکترون آزاد در یک بعد و سه بعد. در فلزات معمولی در دمای اتاق $\tau/\epsilon_F \cong 0.1$ ، در نتیجه μ تقریباً با ϵ_F برابر است. این منحنیها با استفاده از بسطهای سری انتگرال برای تعداد ذرات دستگاه محاسبه شده‌اند.

به یاد آورید که T_F ، با وجود آنکه دمای فرمی نامیده می‌شود، دمای واقعی الکترونی نیست، بلکه تنها نماد مرجع مناسبی است.

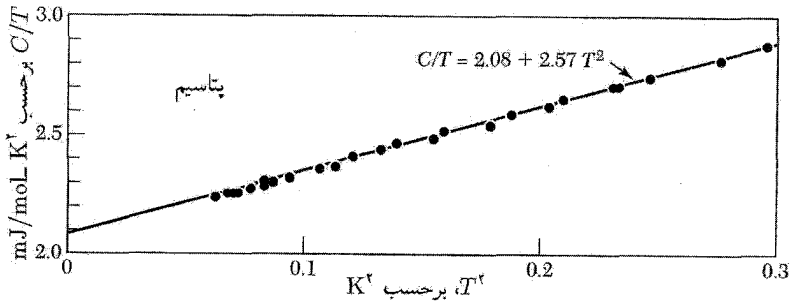
ظرفیت گرمایی تجربی فلزها

در دماهای بسیار پایینتر از دمای دبی و دمای فرمی، ظرفیت گرمایی فلزات را می‌توان به صورت مجموع سهمهای الکترونی و فونونی نوشت: $C = \gamma T + AT^3$ ، که در آن γ و A ثابتهای مشخصه ماده‌اند. جمله مربوط به سهم الکترونی برحسب T خطی است و در دماهای به اندازه کافی پایین نقش عمده را بازی می‌کند، مناسب است مقادیر تجربی C را به صورت نموداری از C/T برحسب T^2 نشان دهیم:

$$C/T = \gamma + AT^2 \quad (37)$$

زیرا در این صورت همه نقاط باید روی یک خط مستقیم به شیب A و عرض از مبدأ γ قرار گیرند. چنین نموداری برای پتاسیم در شکل ۹ نشان داده شده است. مقادیر مشاهده شده γ که پارامترهای زومرفلد نام دارند، در جدول ۲ داده شده‌اند.

مقادیر مشاهده شده ضریب γ دارای بزرگی مورد انتظارند. ولی این مقادیر اغلب با مقدار محاسبه شده از روابط (۱۷) و (۳۴) برای الکترونهاى آزاد به جرم m ، دقیقاً برابر نیستند. متداول است که نسبت ظرفیت



شکل ۹. مقادیر ظرفیت گرمایی تجربی پتاسیم، که به صورت C/T بر حسب T^2 ترسیم شده است.

گرمایی الکترونی مشاهده شده به ظرفیت گرمایی ناشی از نظریه الکترون آزاد به صورت نسبت جرم مؤثر گرمایی، m_{th} ، به جرم الکترون، m ، نشان داده شود. که با این رابطه تعریف می‌شود:

$$\frac{m_{th}}{m} = \frac{\gamma \text{ (مشاهده شده)}}{\gamma \text{ (آزاد)}} \quad (38)$$

از آنجا که ϵ_F با جرم الکترون متناسب معکوس دارد، و در نتیجه $\gamma \propto m$ ، این شکل به طور طبیعی به وجود می‌آید. مقادیر این نسبت در جدول ۲ داده شده‌اند. سه اثر جداگانه زیر باعث دور شدن این نسبت از مقدار واحد می‌شوند.

- برهم‌کنش الکترونی‌های رسانش با پتانسیل دوره‌ای شبکه بلوری صلب. جرم مؤثر الکترون در این پتانسیل، جرم مؤثر نواری نامیده می‌شود.
- برهم‌کنش الکترونی‌های رسانش با فونونها. هر الکترون در جهت قطبی کردن یا واپیچش شبکه در همسایگی اثر می‌گذارد، بدین‌گونه که الکترون متحرک یونهای مجاورش را همراه خود می‌کشد و در نتیجه جرم مؤثر الکترون زیاد می‌شود.
- برهم‌کنش الکترونی‌های رسانش با یکدیگر الکترون متحرک باعث واکنش لختی در گاز الکترونی اطرافش می‌شود، و در نتیجه جرم مؤثر الکترون بالا می‌رود.

فرمیونهای سنگین. چندین ترکیب فلزی کشف شده‌اند که ثابت ظرفیت گرمایی الکترونی γ آنها بسیار بزرگ، یعنی دو یا سه مرتبه بزرگی بالاتر از مقدار متداول است. ترکیبات فرمیونی سنگین شامل UBe_{13} ، $CeAl_3$ ، و $CeCu_2Si_2$ اند. به خاطر همپوشانی ضعیف توابع موج الکترونی‌های f روی یونهای همسایه، به نظر می‌رسد الکترونی‌های f در این ترکیبات بتوانند جرمهای لختی به بزرگی $1000m$ داشته باشند (فصل ۹، «بستگی محکم» را ببینید).

رسانندگی الکتریکی و قانون اهم

تکانه الکترون آزاد با رابطه $mv = \hbar k$ به بردار موج مربوط می‌شود. در میدان الکتریکی \mathbf{E} و میدان مغناطیسی \mathbf{B} نیروی \mathbf{F} وارد بر الکترونی با بار $-e$ برابر است با $-e[\mathbf{E} + (1/c)\mathbf{v} \times \mathbf{B}]$. بنابراین، قانون دوم حرکت نیوتون به صورت زیر درمی‌آید

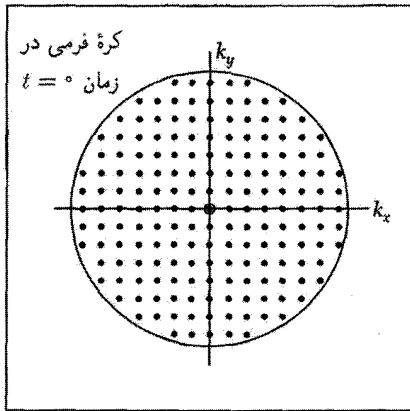
$$\mathbf{F} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e(\mathbf{E} + \frac{1}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (39)$$

(CGS)

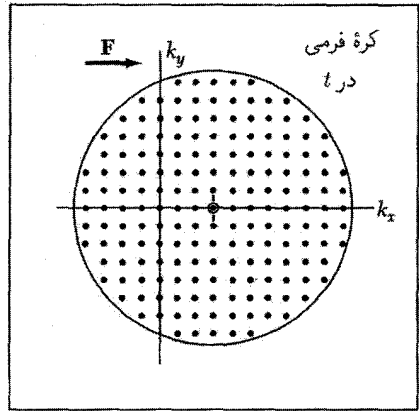
در غیاب برخوردها میدان الکتریکی ثابت اعمال شده، کره فرمی را در فضای \mathbf{k} (شکل ۱۰) با آهنگ یکنواختی جابه‌جا می‌کند. با قراردادن $\mathbf{B} = 0$ ، از رابطه (۳۹) انتگرال می‌گیریم و رابطه زیر را به دست می‌آوریم

$$\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0) = -e\mathbf{E}t/\hbar \quad (40)$$

اگر نیروی $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$ در زمان $t = 0$ روی گاز الکترون که کره فرمی به مرکز مبدأ فضای \mathbf{k} را پر



(الف)



(ب)

شکل ۱۰. (الف) کره فرمی اوربیتالهای الکترونی اشغال شده را در فضای \mathbf{k} در حالت پایه گاز الکترون در برمی‌گیرد. تکانه کل برابر صفر است، زیرا به ازای هر اوربیتال \mathbf{k} ، اوربیتال اشغال شده‌ای در $-\mathbf{k}$ وجود دارد. (ب) بردار \mathbf{k} هر اوربیتال، تحت تأثیر نیروی ثابت \mathbf{F} که در فاصله زمانی t عمل می‌کند، به اندازه $\delta\mathbf{k} = \mathbf{F}t/\hbar$ افزایش می‌یابد. این با جابه‌جایی همه کره فرمی به اندازه $\delta\mathbf{k}$ معادل است. اگر N الکترون موجود باشد، تکانه کل برابر است با $N\hbar\delta\mathbf{k}$. اعمال نیرو انرژی دستگاه را به اندازه $N(\hbar\delta\mathbf{k})^2/2m$ افزایش می‌دهد.

می‌کند، اعمال شود در لحظه بعدی t کره به مرکز جدیدی در

$$\delta \mathbf{k} = -e\mathbf{E}t/\hbar \quad (41)$$

جابه‌جا می‌شود. توجه کنید که کره فرمی به‌طور کامل جابه‌جا شده است، زیرا هر الکترون با $\delta \mathbf{k}$ یکسان جابه‌جا می‌شود.

به دلیل برخورد‌های الکترونها با ناخالصیها، ناکاملیهای شبکه، و فونونها، کره جابه‌جا شده ممکن است در میدان الکتریکی در حالت پایا نگاه داشته شود. اگر زمان برخورد τ باشد، جابه‌جایی کره فرمی در حالت پایا از رابطه (۴۱) با $t = \tau$ به دست می‌آید. نمو سرعت برابر است با $\mathbf{v} = \delta \mathbf{k}/m = -e\mathbf{E}\tau/m$. اگر الکترون با بار $q = -e$ ، در واحد حجم در میدان الکتریکی ثابت \mathbf{E} موجود باشند، چگالی جریان الکتریکی برابر است با

$$\mathbf{j} = nq\mathbf{v} = ne^2\tau\mathbf{E}/m \quad (42)$$

این رابطه، قانون اهم است.

رسانندگی الکتریکی σ با $\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E}$ تعریف می‌شود، در نتیجه با استفاده از رابطه (۴۲)

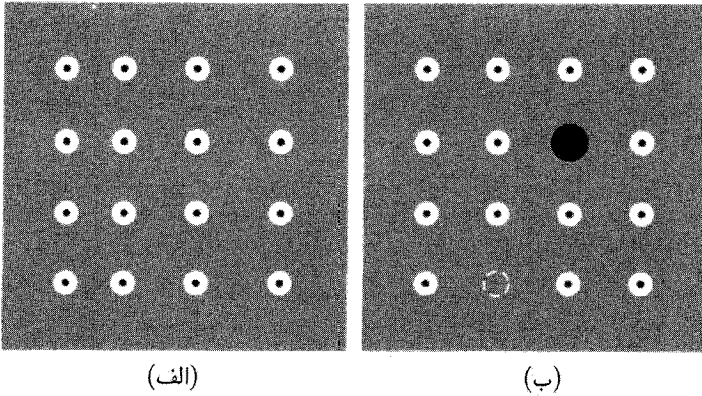
$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \quad (43)$$

مقاومت ویژه ρ به صورت عکس رسانندگی تعریف می‌شود، بنابراین

$$\rho = m/ne^2\tau \quad (44)$$

مقادیر مقاومت ویژه و رسانندگی الکتریکی عناصر در جدول ۳ داده شده‌اند. σ برحسب واحدهای گاوسی دارای ابعاد بسامد است.

درک نتیجه (۴۳) برای رسانندگی ساده است. انتظار داریم که بار ترابرده با چگالی بار، ne متناسب باشد؛ ضریب e/m ، به دلیل آنکه شتاب در یک میدان الکتریکی معلوم به‌طور مستقیم با e و معکوس با جرم m متناسب است در رابطه (۴۳) وارد می‌شود. زمان τ ، زمان آزادی است که در خلال آن میدان بر حامل اثر می‌کند. تقریباً همین نتیجه برای رسانندگی الکتریکی گاز کلاسیکی (ماکسولی) از الکترونها حاصل می‌شود، همان‌طور که در بسیاری از مسائل نیمرساناهای با غلظت حامل پایین چنین است.



شکل ۱۱. در اکثر فلزها مقاومت ویژه الکتریکی از برخورد الکترونها با بی‌نظمیهای شبکه، مثلاً در (الف) با فونونها و در (ب) با ناخالصیها و جایگاههای خالی شبکه، ناشی می‌شود.

مقاومت ویژه الکتریکی تجربی فلزها

مقاومت ویژه الکتریکی اکثر فلزها در دمای اتاق (300°K) عمدتاً از برخورد الکترونها با فونونها و شبکه و در دمای هلیوم مایع (4K) از برخورد این الکترونها با اتمهای ناخالصی و ناکاملیهای مکانیکی موجود در شبکه ناشی می‌شود (شکل ۱۱). آهنگهای این برخوردها غالباً با تقریب خوبی از یکدیگر مستقل‌اند. بنابراین، اگر میدان الکتریکی قطع شود، توزیع تکانه با زمان واهلش کل τ

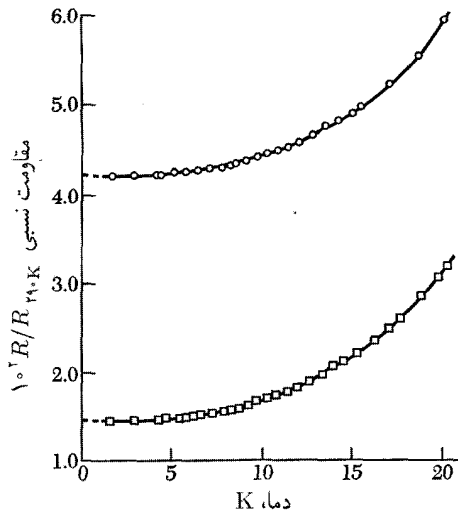
$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_L} + \frac{1}{\tau_i} \quad (45)$$

به حالت پایه خود باز می‌گردد، که در آن τ_L و τ_i ، به ترتیب، عبارت‌اند از زمانهای برخورد برای پراکندگی ناشی از فونونها و پراکندگی ناشی از ناکاملیها. مقاومت ویژه نهایی از رابطه زیر به دست می‌آید

$$\rho = \rho_L + \rho_i \quad (46)$$

که در آن ρ_L مقاومت ویژه ناشی از فونونهای گرمایی و ρ_i مقاومت ویژه ناشی از پراکندگی امواج الکترونی توسط ناراستیهای استاتیکی است که دوره‌ای بودن شبکه را برهم می‌زنند. اگر غلظت ناراستیها کم باشد، ρ_L غالباً از تعدادشان مستقل است و ρ_i غالباً مستقل از دماست. این مشاهده تجربی، قاعده ماتیسین را بیان می‌کند که برای تحلیل داده‌های تجربی مناسب است (شکل ۱۲).

مقاومت ویژه باقیمانده، $\rho_i(0)$ ، مقاومت ویژه برون‌یابی شده در 0°K است، زیرا وقتی $T \rightarrow 0$ ، ρ_L صفر می‌شود. حتی با وجود آنکه خود $\rho_i(0)$ ممکن است به‌طور گسترده تغییر کند، مقاومت ویژه شبکه،



شکل ۱۲. مقاومت پتاسیم در دمای پایینتر از ۲۰K، که روی دو نمونه اندازه‌گیری شده است. اختلاف بین مقاومت در ۰K به دلیل غلظتهای متفاوت ناخالصیها و ناکاملیهای استاتیکی موجود در دو نمونه است.

نسبت مقاومت ویژه $\rho_L(T) = \rho - \rho_i(0)$ برای نمونه‌های مختلف فلز یکسان است. نسبت مقاومت ویژه نمونه معمولاً به صورت نسبت مقاومت ویژه آن در دمای اتاق به مقاومت ویژه باقیمانده‌اش تعریف می‌شود. این نسبت نشانگر تقریبی مناسب برای خلوص نمونه است: برای بسیاری از مواد، ناخالصی در محلول جامد مقاومت ویژه باقیمانده‌ای در حد یک میکروهم سانتیمتر (10^{-6} ohm_cm) به ازای هر درصد اتمی ایجاد می‌کند. مقاومت ویژه باقیمانده نمونه‌ای از مس با نسبت مقاومت ویژه 10^5 ، برابر $1.7 \times 10^{-3} \mu\text{ohm_cm}$ است که متناظر است با غلظت ناخالصی حدود ۲۰ ppm. در نمونه‌های فوق‌العاده خالص ممکن است نسبت مقاومت ویژه به بزرگی 10^6 باشد، در حالی‌که در بعضی از آلیاژها (مانند منگائین) این نسبت به کوچکی ۱/۱ است.

امکان به دست آوردن بلورهای مس با چنان خلوصی وجود دارد که رسانندگی آنها در دماهای هلیوم مایع (۴K) تقریباً 10^5 برابر رسانندگی‌شان در دمای اتاق باشد؛ در این شرایط در ۴K، $\tau \approx 2 \times 10^{-9} \text{ s}$. مسافت آزاد میانگین ℓ الکترون رسانش چنین تعریف می‌شود:

$$\ell = v_{FT} \tau \quad (47)$$

که در آن v_F سرعت در سطح فرمی است، زیرا تمامی برخوردها فقط الکترونهای نزدیک سطح فرمی را درگیر می‌کنند. با استفاده از جدول ۱ برای Cu داریم $v_F = 1.57 \times 10^8 \text{ cm s}^{-1}$ ، در نتیجه مسافت

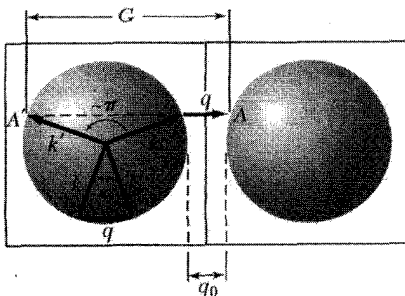
آزاد میانگین برابر است با $3\text{cm} \approx 0.4\text{K}$. در گستره دمای هلیوم مایع، مسافتهای آزاد میانگین در فلزات بسیار خالص به درازای 10cm مشاهده شده‌اند.

بخش وابسته به دمای مقاومت ویژه با آهنگی که با آن الکترون با فونونهای گرمایی و الکترونهای گرمایی برخورد می‌کند متناسب است. آهنگ برخورد با فونونها با غلظت فونونهای گرمایی متناسب است. یک حد ساده در دماهای بالای دمای دبی، θ ، است: در اینجا غلظت فونون با دمای T متناسب است، در نتیجه برای $T > \theta$ ، $\rho \propto T$ ، خلاصه این نظریه در پیوست ی ارائه شده است.

پراکندگی واگرد

پراکندگی واگرد الکترونها توسط فونونها (فصل ۵) مقاومت الکتریکی فلزات را در دماهای پایین توجیه می‌کند. اینها فرایندهای پراکندگی الکترون-فونونی‌اند که به بردار شبکه وارون \mathbf{G} نیازمندند، به طوری که تغییر تکانه الکترون در این فرایند ممکن است به مراتب بزرگتر از تغییر تکانه الکترون در فرایند پراکندگی الکترون-فونون بهنجار در دماهای پایین باشد. (در فرایند واگرد بردار موج ذره ممکن است سروته بشود یا «معلق بزند».)
مقطعی عمود بر $[100]$ در نظر بگیرید که از دو منطقه بریلوئن مجاور در پتاسیم bcc بگذرد و کره‌های فرمی معادلی در هر یک از این مناطق محاط شده باشند (شکل ۱۳). نیمه پایینی شکل نشانگر برخورد الکترون-فونون بهنجار $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$ است در حالی که نیمه بالایی نشانگر فرایند پراکندگی ممکن $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{G}$ است که شامل همان فونون است و منطقه اول بریلوئن در نقطه A پایان می‌یابد. این نقطه دقیقاً معادل نقطه A' داخل منطقه نخستین است، که در آن AA' بردار شبکه وارون \mathbf{G} است. این پراکندگی، به مانستگی با فونونها، فرایند واگرد است: چنین برخوردهایی پراکننده‌هایی قوی‌اند زیرا زاویه پراکندگی می‌تواند نزدیک به π باشد.

اگر سطح فرمی مرز منطقه را قطع نکند، بردار موج فونونی کمینه q_0 برای پراکندگی واگرد وجود خواهد داشت. در دماهای به اندازه کافی پایین تعداد فونونهای در دسترس برای پراکندگی واگرد به گونه $\exp(-\theta U/T)$ کاهش می‌یابد، که در آن θU دمای مشخصه محاسبه‌پذیری از هندسه سطح فرمی درون منطقه بریلوئن است. برای سطح فرمی کروی با اوربیتال یک الکترونی به ازای هر اتم درون منطقه بریلوئن bcc، می‌توان نشان داد که $q_0 = 267k_F$.



شکل ۱۳. دو کره فرمی در دو منطقه مجاور: ترسیم هندسی که نقش فرایندهای واگرد را در مقاومت ویژه الکتریکی نشان می‌دهد.

نتایج تجربی برای پتاسیم (شکل ۱۲) دارای شکل نمایی انتظاری با $\theta_U = 23\text{K}$ در مقایسه با دمای دبی $\theta = 91\text{K}$ است. در پایینترین دماها (زیر حدود 2K در پتاسیم) تعداد فرایندهای واگرد چشمپوشیدنی است و در نتیجه مقاومت ویژه شبکه فقط از پراکندگی با زاویه کوچک ناشی می‌شود، که پراکندگی بهنجار (نه واگرد) است.

حرکت در میدانهای مغناطیسی

برای ذراتی که تحت تأثیر نیروی \mathbf{F} و اصطکاک ناشی از برخوردها با آهنگ $1/\tau$ قرار دارند، با استفاده از استدلال روابط (۳۹) و (۴۱)، به این معادله حرکت برای جابه‌جایی $\delta\mathbf{k}$ ی کره فرمی می‌رسیم

$$\hbar \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \delta\mathbf{k} = \mathbf{F} \quad (48)$$

جمله $(\hbar d/dt)\delta\mathbf{k}$ به شتاب ذره آزاد مربوط است و اثر برخوردها (اصطکاک) با $\hbar\delta\mathbf{k}/\tau$ نشان داده می‌شود؛ که در آن τ زمان برخورد است.

اکنون حرکت دستگاه را در یک میدان مغناطیسی یکنواخت \mathbf{B} در نظر بگیرید. نیروی لورنتس وارد بر الکترون برابر است با

$$\mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \frac{1}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B}); \quad (\text{CGS}) \quad (49)$$

$$\mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (\text{SI})$$

اگر $m\mathbf{v} = \hbar\delta\mathbf{k}$ ، معادله حرکت به صورت زیر است

$$m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \mathbf{v} = -e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B} \right) \quad (\text{CGS}) \quad (50)$$

یک وضعیت مهم به این صورت است: میدان مغناطیسی استاتیکی \mathbf{B} را در امتداد محور z در نظر بگیرید. بدین ترتیب معادلات مؤلفه‌ای حرکت عبارت‌اند از:

$$\begin{aligned} (\text{CGS}) \quad m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_x &= -e \left(E_x + \frac{B}{c} v_y \right) \\ m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_y &= -e \left(E_y - \frac{B}{c} v_x \right) \end{aligned} \quad (51)$$

$$m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_z = -eE_z$$

این نتایج در SI با قرار دادن 1 به جای c حاصل می‌شوند.

در حالت پایا در میدان الکتريکی استاتیکی مشتقهای زمانی صفر می‌شوند، بنابراین سرعت رانش برابر است با

$$v_x = -\frac{e\tau}{m}E_x - \omega_c\tau v_y; \quad v_y = -\frac{e\tau}{m}E_y + \omega_c\tau v_x; \quad v_z = -\frac{e\tau}{m}E_z, \quad (52)$$

که در آن $\omega_c = eB/mc$ ، همان‌گونه که در فصل ۸ برای تشدید سیکلوترونی در نیمرسانا مطرح می‌شود. بسامد سیکلوترونی است.

اثر هال

هرگاه در رسانا جریان \mathbf{j} از میان میدان مغناطیسی \mathbf{B} عبور کند، یک میدان الکتريکی در جهت $\mathbf{j} \times \mathbf{B}$ بین دو وجه که به وجود می‌آید که میدان هال نامیده می‌شود. نمونه‌ای میله‌ای شکلی را در یک میدان الکتريکی طولی E_x و یک میدان مغناطیسی عرضی، مانند شکل ۱۴، در نظر بگیرید. اگر جریان بتواند در جهت y از میله به خارج شارش کند، باید $\delta v_y = 0$ با استفاده از رابطه (۵۲)، این امر فقط هنگامی میسر است که میدان الکتريکی عرضی موجود باشد:

$$(CGS) \quad E_y = -\omega_c\tau E_x = -\frac{eB\tau}{mc}E_x; \quad (53)$$

$$(SI) \quad \boxed{E_y = -\omega_c\tau E_x = -\frac{eB\tau}{m}E_x}$$

کمیت زیر ضریب هال نام دارد:

$$\boxed{R_H = \frac{E_y}{j_x B}} \quad (54)$$

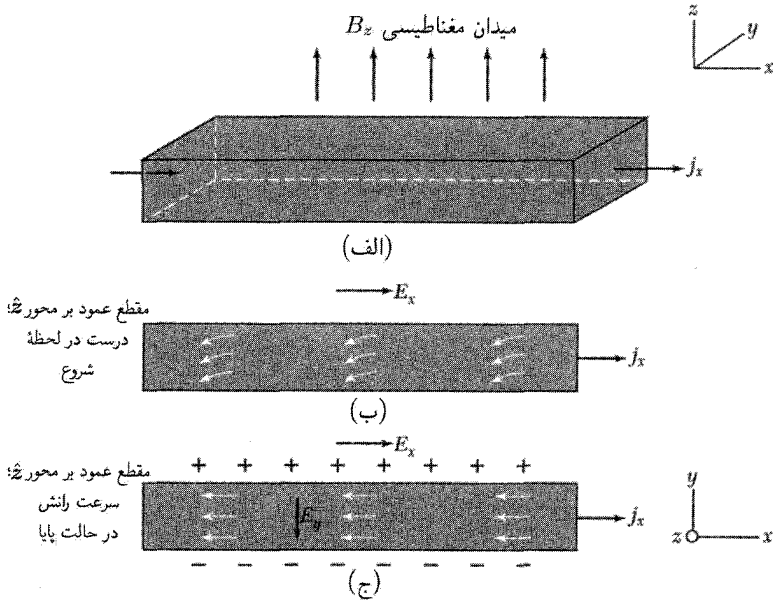
برای محاسبه این کمیت بر مبنای مدل ساده‌مان، $j_x = ne^2\tau E_x/m$ را به کار می‌بریم و رابطه زیر را به دست می‌آوریم

$$(CGS) \quad R_H = -\frac{eB\tau E_x/mc}{ne^2\tau E_x B/m} = -\frac{1}{nec} \quad (55)$$

$$(SI) \quad \boxed{R_H = -\frac{1}{ne}}$$

این کمیت برای الکترونهاى آزاد منفی است، زیرا e مطابق تعریف مثبت است.

هر چه غلظت حاملها کمتر باشد، بزرگی ضریب هال بیشتر خواهد بود. اندازه‌گیری R_H روش مهمی برای اندازه‌گیری غلظت حاملهاست. توجه: نماد R_H ، ضریب هال (۵۴) را نمایش می‌دهد، ولی گاهی آن را با معنای متفاوتی به کار می‌برند، یعنی به مفهوم مقاومت هال در مسائل دویعدی.



شکل ۱۴. هندسه استاندارد برای اثر هال: یک نمونه میله‌ای شکل با قطع مستطیلی در میدان مغناطیسی B_z ، مانند (الف)، قرار می‌گیرد. میدان الکتریکی E_x که بین دو الکترود انتهایی اعمال می‌شود باعث شارش جریان الکتریکی با چگالی J_x در طول میله می‌شود. سرعت رانش الکترونها، بلافاصله بعد از اعمال میدان الکتریکی در (ب) نشان داده شده است. میدان مغناطیسی انحراف در جهت $-y$ را ایجاد می‌کند. الکترونها در یک وجه میله جمع می‌شوند و فزونی یون مثبت در وجه مقابل به وجود می‌آید، تا اینکه، مانند (ج)، میدان الکتریکی عرضی (میدان هال) درست نیروی لورنتس حاصل از میدان الکتریکی را حذف می‌کند.

نتیجه ساده (۵۵) از این فرض حاصل می‌شود، که تمام زمانهای واهلش مستقل از سرعت الکترون و با هم برابرند. اگر زمان واهلش تابعی از سرعت باشد، یک ضریب عددی از مرتبه یک وارد می‌شود. اگر الکترونها و حفره‌ها هر دو در رسانندگی شرکت کنند، این عبارت تا حدی پیچیده‌تر خواهد شد.

در جدول ۴ مقادیر تجربی ضریب هال با مقادیری مقایسه شده‌اند، که از غلظت حاملهای بار به دست آمده‌اند. دقیقترین اندازه‌گیرها با استفاده از روش تشدید مارپیچی انجام می‌شود که به صورت مسئله‌ای در فصل ۱۴ بررسی می‌کنیم.

مقادیر دقیق برای سدیم و پتاسیم با مقادیر محاسبه شده برای الکترون رسانش به‌ازای هر اتم، با استفاده از رابطه (۵۵) سازگاری بسیار خوبی دارند. ولی به مقادیر مربوط به عناصر سه‌ظرفیتی آلومینیم و ایندیم توجه کنید: این مقادیر تجربی با مقادیر محاسبه شده برای یک حامل بار مثبت به‌ازای هر اتم توافق دارد و از نظر بزرگی و علامت با مقادیر محاسبه شده برای سه حامل بار منفی به‌ازای هر اتم سازگار نیست.

جدول ۴. مقایسه ضرایب هال مشاهده شده با ضرایبی که بر اساس نظریه الکترون آزاد محاسبه شده‌اند. [مقادیر تجربی R_H که با استفاده از روشهای متداول تعیین شده‌اند از داده‌های موجود برای دمای اتاق در جدولهای Landolt-Bornstein خلاصه شده‌اند. مقادیر حاصل از روش موج ماریچی در $4K$ به دست آمده‌اند. مقادیر غلظت حاملها، n ، از جدول ۴ از فصل ۱ گرفته شده‌اند. بجز برای K, Na, Al و In که در مورد آنها از روش ماریچی استفاده شده است. برای تبدیل R_H در دستگاه CGS بر حسب $V\text{-cm/A-G}$ ، آن را در $10^{11} \times 9$ و برای تبدیل R_H در دستگاه CGS به m^3/c آن را در $10^{13} \times 9$ ضرب می‌کنیم.]

فلز	روش	R_H تجربی بر حسب 10^{-24} - 10 واحد CGS	تعداد حاملهای مفروض به آزادی یک اتم	$-1/nec$ محاسبه شده بر حسب 10^{-24} - 10 واحد CGS
Li	متداول	-۱٫۸۹	۱ الکترون	-۱٫۴۸
Na	ماریچی	-۲٫۶۱۹	۱ الکترون	-۲٫۶۰۳
	متداول	-۲٫۳		
K	ماریچی	-۴٫۹۴۶	۱ الکترون	-۴٫۹۴۴
	متداول	-۴٫۷		
Rb	متداول	-۵٫۶	۱ الکترون	-۶٫۰۴
Cu	متداول	-۰٫۶	۱ الکترون	-۰٫۸۲
Ag	متداول	-۱٫۰	۱ الکترون	-۱٫۱۹
Au	متداول	-۰٫۸	۱ الکترون	-۱٫۱۸
Be	متداول	+۲٫۷	—	—
Mg	متداول	-۰٫۹۲	—	—
Al	ماریچی	+۱٫۱۳۶	۱ حفره	+۱٫۱۳۵
In	ماریچی	+۱٫۷۷۴	۱ حفره	+۱٫۷۸۰
As	متداول	+۵۰٫۰	—	—
Sb	متداول	-۲۲٫۰	—	—
Bi	متداول	-۶۰۰۰٫۰	—	—

همانگونه که در جدول دیده می‌شود، مسئله علامت مثبت ظاهری برای حاملهای بار برای Be ، و As نیز رخ می‌دهد. این ناهنجاری علامت را پیرلز^۱ (۱۹۲۸) توضیح داد. حرکت حاملهای با علامت بار مثبت ظاهری را، که هاینبرگ بعداً آنها را «حفره» نامید، نمی‌توان توسط گاز الکترون آزاد توضیح

داد، ولی به زبان نظریه نواری انرژی که در فصلهای ۷ تا ۹ گسترش می‌یابد، می‌توان توضیح طبیعی حفره‌ها را یافت. نظریه نواری وقوع مقادیر بسیار بزرگ ضریب هال را برای As، Sb و Bi نیز توجیه می‌کند.

رسانندگی گرمایی فلزها

در فصل ۵ عبارت $K = \frac{1}{3} C v l$ را برای رسانندگی گرمایی ذراتی که دارای سرعت v ، ظرفیت گرمایی C به‌ازای واحد حجم، و مسافت آزاد میانگین l اند، به‌دست آوردیم. رسانندگی گرمایی گاز فرمی با استفاده از رابطه (۳۶)، برای ظرفیت گرمایی، و $\epsilon_F = \frac{1}{2} m v_F^2$ به این صورت به‌دست می‌آید:

$$K_{el} = \frac{\pi^2}{3} \cdot \frac{n k_B^2 T}{m v_F^2} \cdot v_F \cdot l = \frac{\pi^2 n k_B^2 T \tau}{3 m} \quad (56)$$

در اینجا $l = v_F \tau$ ؛ غلظت الکترون‌ها برابر n و τ زمان برخورد است.

آیا در فلز، بیشتر جریان گرما را الکترون‌ها منتقل می‌کنند یا فونون‌ها در فلزهای خالص الکترون‌ها در تمام دماها سهم عمده‌ای دارند. در فلزهای ناخالص یا در آلیاژهای نامنظم مسافت آزاد میانگین الکترون توسط برخورد با ناخالصیها کاهش می‌یابد و سهم فونونی ممکن است با سهم الکترونی قابل مقایسه شود.

نسبت رسانندگی گرمایی به رسانندگی الکتریکی

قانون ویدمان-فرانتس بیان می‌کند که برای فلزها نسبت رسانندگی گرمایی به رسانندگی الکتریکی، در دماهای نه چندان پایین، مستقیماً با دما متناسب است و مقدار ثابت تناسب از نوع فلز مستقل است. این امر مهمترین نتیجه در تاریخ نظریه فلزها بود، زیرا تصویر گاز الکترون را به منزله حامل بار و انرژی تأیید کرد. این قانون را می‌توان با به‌کار بردن رابطه (۴۳) برای σ و (۵۶) برای K توضیح داد

$$\frac{K}{\sigma} = \frac{\pi^2 k_B^2 T n \tau / 3 m}{n e \tau^2 / m} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 T \quad (57)$$

عدد لورنتس L به‌گونه زیر تعریف می‌شود

$$L = K / \sigma T \quad (58)$$

و طبق رابطه (۵۷) باید دارای مقدار زیر باشد

$$\begin{aligned} L &= \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 2.72 \times 10^{-13} \text{ (erg/esu-deg)}^2 \\ &= 2.45 \times 10^{-8} \text{ W-}\Omega/\text{deg}^2 \end{aligned} \quad (59)$$

جدول ۵. اعداد لورنتس تجربی

$L \times 10^8 W_{\Omega} / \text{deg}^2$			$L \times 10^8 W_{\Omega} / \text{deg}^2$		
100°C	0°C	فلز	100°C	0°C	فلز
۲٫۵۶	۲٫۴۷	Pb	۲٫۳۷	۲٫۳۱	Ag
۲٫۶۰	۲٫۵۱	Pt	۲٫۴۰	۲٫۳۵	Au
۲٫۴۹	۲٫۵۲	Su	۲٫۴۳	۲٫۴۲	Cd
۳٫۲۰	۳٫۰۴	W	۲٫۳۳	۲٫۲۳	Cu
۲٫۳۳	۲٫۳۱	Zn	۲٫۷۹	۲٫۶۱	Mo

در این نتیجه شایان توجه نه n وارد می‌شود، نه m . بنابر آنچه در جدول ۵ آمده است، مقادیر تجربی L در صفر درجه سلسیوس و صد درجه سلسیوس با رابطه (۵۹) سازگاری خوبی دارند.

مسائل

۱. انرژی جنبشی گاز الکترون. نشان دهید که انرژی جنبشی یک گاز سه‌بعدی که شامل N الکترون است در 0°K برابر است با

$$U_0 = \frac{3}{5} N \epsilon_F \quad (60)$$

۲. فشار و مدول حجمی گاز الکترون. (الف) رابطه‌ای پیدا کنید که فشار و حجم گاز الکترون را در 0°K بهم مربوط سازد: راهنمایی: از نتیجه مسئله ۱ و رابطه بین ϵ_F و غلظت الکترونها استفاده کنید. نتیجه حاصل را می‌توان به صورت $p = \frac{2}{3} (U_0/V)$ نوشت: (ب) نشان دهید که مدول حجمی $B = -V (\partial p / \partial V)$ گاز الکترون در 0°K به صورت $B = 5p/3 = 10U_0/9V$ است. (ج) مقدار سم گاز الکترون در B را با استفاده از جدول ۱ برای پتاسیم برآورد کنید.

۳. پتانسیل شیمیایی در دو بعد. نشان دهید که پتانسیل شیمیایی گاز فرمی در دو بعد برای n الکترون در واحد سطح از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\mu(T) = k_B T \ln[\exp(\pi n \hbar^2 / m k_B T) - 1] \quad (61)$$

توجه: چگالی اوربیتالهای گاز الکترون آزاد در دو بعد مستقل از انرژی است: $D(\epsilon) = m / \pi \hbar^2$. به‌ازای واحد سطح نمونه.

۴. گازهای فرمی در اخترفیزیک. (الف) با داشتن $M_{\odot} = 2 \times 10^{33} \text{ g}$ برای جرم خورشید، تعداد الکترونها موجود در خورشید را برآورد کنید. در ستاره کوتوله سفید، این تعداد الکترون ممکن است یونیده شوند و در کره‌ای به شعاع $2 \times 10^9 \text{ cm}$ قرار گیرند؛ انرژی فرمی این الکترونها را برحسب الکترون‌ولت پیدا کنید. (ب) انرژی الکترون در حد نسبیته $\epsilon \gg mc^2$ با رابطه $\epsilon \cong pc = \hbar kc$ به بردار موج مربوط می‌شود. نشان دهید که در این حد، انرژی فرمی تقریباً به صورت $\epsilon_F \approx \hbar c(N/V)^{1/3}$ است. (ج) نشان دهید که اگر تعداد فوق‌الذکر از الکترونها تب اختری به شعاع 10^6 km موجود بود، انرژی فرمی تقریباً برابر 10^8 eV می‌شد. این مقدار دلیل این اعتقاد را توضیح می‌دهد که تب اخترها عمدتاً به جای پروتون و الکترون از نوترون تشکیل شده‌اند، زیرا انرژی آزاد شده در واکنش $n \rightarrow p + e^-$ فقط 10^6 eV است. این انرژی آنقدر زیاد نیست که الکترونها بتوانند دریای فرمی تشکیل دهند. واپاشی نوترونی فقط تا آنجا پیش می‌رود که غلظت الکترونها به حدی برسد که برای ایجاد تراز فرمی 10^6 eV کافی باشد، در این نقطه غلظتهای نوترونها، پروتونها، و الکترونها در تعادلند.

۵. He^2 مایع. اتم He^3 اسپینی $\frac{1}{2}$ دارد و فرمیون است. چگالی He^3 مایع در نزدیکی صفر مطلق برابر 81 g/cm^3 است. انرژی فرمی ϵ_F و دمای فرمی T_F را حساب کنید.

۶. وابستگی رسانندگی الکتریکی به بسامد. از معادله $m(dv/dt + v/\tau) = -eE$ برای سرعت رانش الکترون، v ، استفاده کنید و نشان دهید که رسانندگی در بسامد ω برابر است با

$$\sigma(\omega) = \sigma(\infty) \left(\frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2} \right) \quad (62)$$

که در آن $\sigma(\infty) = ne^2\tau/m$.

*۷. تانسور مغناطوسانندگی و دینامیکی برای الکترونهاى آزاد. فلزی که برای آن غلظت الکترونهاى آزاد با بار $-e$ برابر n است، در میدان مغناطیسی استاتیکی $B\hat{z}$ قرار دارد. چگالی جریان الکتریکی در صفحه xy به صورت زیر به میدان الکتریکی مربوط می‌شود،

$$j_x = \sigma_{xx}E_x + \sigma_{xy}E_y; \quad j_y = \sigma_{yx}E_x + \sigma_{yy}E_y$$

فرض کنید که بسامد $\omega \gg \omega_c$ و $\omega \gg 1/\tau$ که در آن $\omega_c = eB/mc$ و τ زمان برخورد است. (الف) معادله سرعت رانش (۵۱) را حل کنید و مؤلفه‌های تانسور مغناطوسانندگی زیر را پیدا کنید:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{i\omega_p^2}{4\pi\omega}; \quad \sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \frac{\omega_c\omega_p^2}{4\pi\omega^2}$$

* این مسئله تا حدودی مشکل است.

که در آن $\omega_p^2 = 4\pi n e^2 / m$ ، (ب) توجه کنید که با استفاده از معادلهٔ ماکسول تانسور تابع دی الکترونیک محیط به صورت $\epsilon = 1 + i(4\pi/\omega)\sigma$ به تانسور رسانندگی مربوط می‌شود. یک موج الکترومغناطیسی با بردار موج $\mathbf{k} = k\hat{z}$ را در نظر بگیرید. نشان دهید که رابطهٔ پاشیدگی این موج در این محیط به صورت زیر است،

$$c^2 k^2 = \omega^2 - \omega_p^2 \pm \omega_c \omega_p^2 / \omega \quad (63)$$

در بسامد معلوم، دو مد انتشار با بردار موجهای متفاوت و سرعتهای متفاوت موجود است. این دو مد به امواج با قطبش دایره‌ای مربوط می‌شوند. از آنجا که موج قطبش خطی را می‌توان به دو موج با قطبش دایره‌ای تجزیه کرد، نتیجه می‌شود که صفحهٔ قطبش موج با قطبش خطی در اثر میدان مغناطیسی دوران می‌کند. *۸. انرژی چسبندگی گاز فرمی الکترون آزاد. طول بدون بعد r_s را به صورت r_s / a_H تعریف می‌کنیم،

که در آن r_s شعاع کره‌ای است که شامل یک الکترون و a_H شعاع بور $\hbar^2 / e^2 m$ است. (الف) نشان دهید که انرژی جنبشی میانگین به‌ازای یک الکترون در گاز فرمی الکترون آزاد در K برابر است با $(2/3) r_s^{-2}$ ، که در آن انرژی برحسب ریدبرگ بیان شده است و $1 Ry = me^4 / 2\hbar^2$. (ب) نشان دهید که انرژی کولنی بار نقطه‌ای مثبت e که با توزیع یکنواخت الکترونی الکترون در حجمی به شعاع r_s برهم‌کنش دارد برابر است با $(3/2) r_s^{-2}$ ، یا $-3/r_s$ برحسب ریدبرگ. (ج) نشان دهید که خود-انرژی کولنی توزیع الکترون در این کره برابر است با $(3/5) r_s^{-2}$ ، یا $6/5 r_s$ برحسب ریدبرگ. (د) انرژی کولنی کل به‌ازای یک الکترون، از مجموع انرژیهای (ب) و (ج) برابر $1/8 r_s^{-2}$ به دست می‌آید. نشان دهید که مقدار تعادلی r_s برابر

۲۴۵ است. آیا چنین فلزی نسبت به اتمهای مجزای H پایدار خواهد بود؟

۹. تانسور مغناطورسانندگی استاتیکی. برای نظریهٔ سرعت رانشی (۵۱)، نشان دهید که چگالی جریان استاتیکی را می‌توان به شکل ماتریسی زیر نوشت:

$$\begin{pmatrix} j_x \\ j_y \\ j_z \end{pmatrix} = \frac{\sigma_0}{1 + (\omega_c \tau)^2} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c \tau & 0 \\ \omega_c \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + (\omega_c \tau)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \quad (64)$$

در میدان مغناطیسی بالا، $\omega_c \tau \gg 1$ نشان دهید که

$$\sigma_{yx} = nec/B = -\sigma_{xy} \quad (65)$$

در این حد تا مرتبهٔ $1/\omega_c \tau$ ، $\sigma_{xx} = 0$. کمیت σ_{yx} رسانندگی هال نام دارد.

* این مسئله تا حدودی مشکل است.

۱۰. مقاومت سطحی بیشینه. یک ورق مربعی به ضلع L ، ضخامت d ، و مقاومت ویژه الکتریکی ρ را در نظر بگیرید. مقاومت اندازه‌گیری شده بین لبه‌های مقابل این ورق را مقاومت سطحی می‌نامند: $R_{sq} = \rho L/Ld = \rho/d$ ، که مستقل از مساحت L^2 ی این ورق است. R_{sq} را مقاومت مربع می‌نامند و برحسب اهم به‌ازای مربع بیان می‌شود، زیرا ρ/d دارای ابعاد اهم است. اگر ρ را با رابطه (۴۴) بیان کنیم، نتیجه می‌شود $R_{sq} = m/nde^2\tau$. اکنون فرض می‌کنیم مقدار کمینه زمان برخورد توسط پراکندگی از سطوح این ورق تعیین شود، به‌گونه‌ای که $\tau \approx d/v_F$ ، که در آن v_F سرعت فرمی است. بنابراین، مقاومت سطحی $R_{sq} \approx mv_F/nd^2e^2$ است. نشان دهید که برای ورق فلزی تک اتمی با ضخامت یک اتم $R_{sq} \approx \frac{\hbar}{e^2} = 4/1k\Omega$.

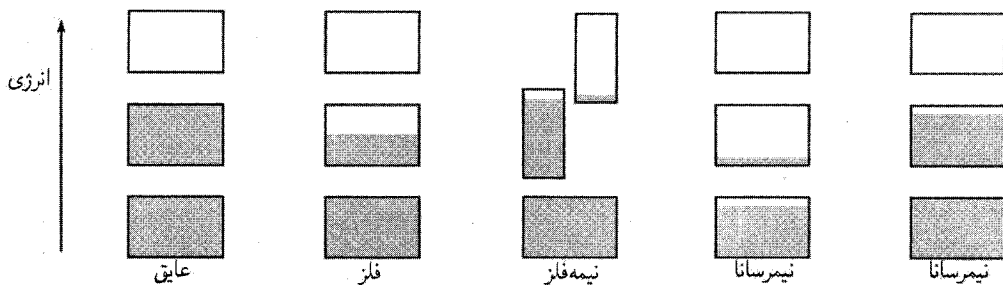


نوارهای انرژی

در آغاز که دربارهٔ این موضوع می‌اندیشیدم، به گمانم مسئلهٔ عمده آن بود که الکترونها چگونه می‌توانند یواشکی از کنار همهٔ یونهای فلز بگذرند.... به کمک تحلیل سادهٔ فوریه با شادی دریافتم که تنها تفاوت موج حاصل با موج تخت الکترونها آزاد در مدولانسیون دوره‌ای است.

ف. بلوخ

مدل الکترون آزاد فلزات در مورد ظرفیت گرمایی، رسانندگی گرمایی، رسانندگی الکتریکی، پذیرفتاری مغناطیسی، و الکترودینامیک فلزات بینش مطلوبی به ما می‌دهد. ولی این مدل در پاسخ‌گویی به این مسائل عمده با شکست روبه‌رو می‌شود: تمایز بین فلزات، نیمه‌فلزات، نیمه‌رساناها، و عایقها؛ پیدایش مقادیر مثبت ضریب هال؛ رابطهٔ الکترونها رسانش در فلزات با الکترونها ظرفیتی اتمهای آزاد؛ و بسیاری از ویژگیهای ترابرد، به‌ویژه ترابرد مغناطیسی. برای رفع این مسائل به نظریه‌ای نیاز داریم که کمتر ابتدایی باشد، و



شکل ۱. طرحواره اشغال نوارهای انرژی مجاز توسط الکترونها، برای عایق، فلز، نیمه فلز، و نیمرسانا. ارتفاع جعبه‌ها نمایشگر نواحی انرژی مجاز است؛ قسمت‌های سایه‌دار، نواحی پر شده توسط الکترونها را نشان می‌دهند. نیمه فلز (مانند بیسموت) در صفر مطلق یک نوار تقریباً پر نوار دیگر تقریباً خالی است، ولی نیمرسانای خالص (مانند سیلیسیم) در صفر مطلق عایق می‌شود. در نیمرسانای نشان داده شده، آن که در سمت چپ قرار دارد دارای یک دمای متناهی است و حامل‌های آن به‌طور گرمایی برانگیخته شده‌اند، نیمرسانای دیگر به دلیل وجود ناخالصیها کمبود الکترون دارد.

خوشبختانه چنین برمی‌آید که تقریباً هر کوشش ساده‌ای برای بهسازی مدل الکترون آزاد فوق‌العاده سودمند است.

تفاوت بین رسانای خوب و عایق خوب در خور توجه است. مقاومت ویژه الکتریکی فلز خالص در 300K ، صرف‌نظر از امکان ابررسانایی، ممکن است به کوچکی $10^{-10}\ \Omega\text{-cm}$ باشد. مقاومت ویژه عایق خوب می‌تواند به بزرگی $10^{22}\ \Omega\text{-cm}$ باشد. این گستره 10^{32} ممکن است وسیعترین گستره در بین ویژگی‌های فیزیکی مشترک جامدات باشد.

هر جامدی دارای الکترون است. پرسش مهم در مورد رسانندگی این است که الکترونها در مقابل میدان الکتریکی اعمال شده چگونه پاسخ می‌دهند. خواهیم دید که الکترونها در داخل بلورها در نوارهای انرژی مرتب می‌شوند (شکل ۱). ناحیه‌هایی از انرژی که برای آنها هیچ اوربیتال الکترونی موج‌گونه وجود ندارد، این نوارها را از هم جدا می‌کنند. چنین نواحی ممنوعی را گافهای انرژی یا گافهای نواری می‌نامند. این نواحی از برهم‌کنش امواج الکترونها رسانش با مغزهای یونی بلور نتیجه می‌شوند.

اگر نوارهای انرژی مجاز پر یا خالی باشند، بلور مانند عایق رفتار می‌کند، زیرا در این صورت هیچ الکترونی نمی‌تواند در میدان الکتریکی حرکت کند. اگر کسری، مثلاً 10% تا 90% درصد، از یک یا چند نوار پر باشند، بلور مانند فلز رفتار می‌کند. اگر تمامی نوارها، به استثنای یک یا دو نوار که اندکی پر یا خالی‌اند، کاملاً پر شده باشند، بلور نیمرسانا یا نیمه فلز خواهد بود.

برای درک تفاوت بین عایقها و رساناها، باید مدل الکترون آزاد را با در نظر گرفتن شبکه دوره‌ای جامد گسترش داد. امکان وجود گاف نواری مهمترین ویژگی جدیدی است که پدیدار می‌شود.

بعداً با دیگر ویژگیهای در خور توجه الکترونها در بلور روبه‌رو خواهیم شد. برای مثال، پاسخ الکترونها در میدانهای الکتریکی یا مغناطیسی اعمال شده به‌گونه‌ای است که گویی آنها جرم مؤثر m^* دارند. این جرم ممکن است بزرگتر یا کوچکتر از جرم الکترون آزاد و یا حتی منفی باشد. پاسخ الکترونها در بلورها در میدانهای اعمال شده به‌گونه‌ای است که گویی بارهای منفی یا مثبت، $-e$ یا $+e$ ، دارند و لذا می‌توان مقادیر منفی و مثبت ضریب هال را توجیه کرد.

مدل الکترون تقریباً آزاد

در مدل الکترون آزاد مقادیر انرژی مجاز به‌طور پیوسته از صفر تا بینهایت توزیع می‌شوند. در فصل ۶ مشاهده کردیم که

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (1)$$

که برای شرایط مرزی دوره‌ای روی مکعبی به ضلع L داریم،

$$k_x, k_y, k_z = 0; \quad \pm \frac{2\pi}{L}; \pm \frac{4\pi}{L}; \dots \quad (2)$$

توابع موج الکترون آزاد به شکل زیرند

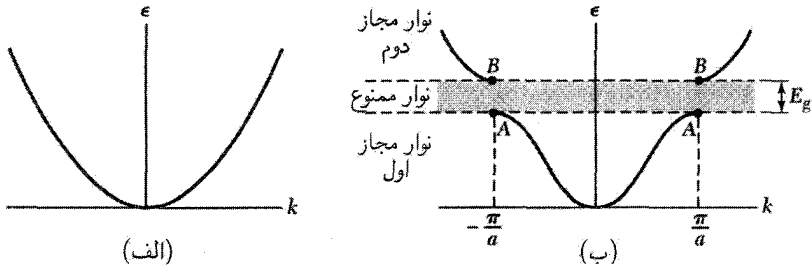
$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (3)$$

که نمایشگر امواج رونده‌اند و تکانه $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ را حل می‌کنند.

ساختار نواری بلورها را اغلب می‌توان با مدل الکترون تقریباً آزاد توصیف کرد. در این مدل الکترونها نوار به‌گونه‌ای بررسی می‌شوند که گویی پتانسیل دوره‌ای مغزهای یونی آنها را تنها به‌طور ضعیفی مختل می‌کند. این مدل تقریباً پاسخگوی تمامی سؤالات کیفی درباره رفتار الکترونها در فلزات است.

می‌دانیم که بازتاب براگ از ویژگیهای مشخصه انتشار موج در بلور است. بازتاب براگ امواج الکترونی در بلورها سبب گاف انرژی می‌شود. (همان‌طور که در شکل ۲ نشان داده شده است، در بازتاب براگ پاسخهای موج‌گونه‌ای برای معادله شرودینگر وجود ندارد.) این گافها انرژی در تعیین عایق یا رسانا بودن جامد اهمیت قاطعی دارند.

منشأ گاف انرژی را به‌طور فیزیکی برای مسئله ساده یک جامد خطی با ثابت شبکه a توضیح می‌دهیم. قسمتهای با انرژی پایین ساختار نواری به‌طور کیفی در شکل ۲ نشان داده شده‌اند، در (الف) برای الکترونها کاملاً آزاد و در (ب) برای الکترونهايي که تقریباً آزادند ولی یک گاف انرژی در $k = \pm\pi/a$



شکل ۲. (الف) نمودار انرژی ϵ برحسب بردار موج k برای الکترون آزاد. (ب) نمودار انرژی برحسب بردار موج برای الکترون در یک شبکه خطی تک‌اتمی یا ثابت شبکه a . گاف انرژی E_g که در اینجا نشان داده شده است به اولین بازتاب براگ در $k = \pm\pi/a$ مربوط می‌شود: گافهای دیگر در انرژیهای بالاتر در $\pm n\pi/a$ یافت می‌شوند، که n عددی درست است.

دارند. شرط براگ $(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 = k^2$ برای پراش موج با بردار موج \mathbf{k} در یک بعد چنین است:

$$k = \pm \frac{1}{2} G = \pm n\pi/a \quad (4)$$

که در آن $G = 2\pi n/a$ بردار شبکه وارون و n عدد درست است. اولین بازتابها و اولین گاف انرژی در $k = \pm\pi/a$ رخ می‌دهند. در فضای k ، ناحیه بین $-\pi/a$ و π/a منطقه اول بریلوئن این شبکه است. دیگر گافهای انرژی به‌ازای مقادیر دیگر عدد درست n به‌وقوع می‌پیوندند.

در $k = \omega/a$ توابع موج به‌صورت امواج متحرک $\exp(i\pi x/a)$ یا $\exp(-i\pi x/a)$ مدل الکترون آزاد نیستند. توابع موج در این مقادیر خاص k به‌طور مساوی از امواجی که به راست و چپ حرکت می‌کنند، تشکیل می‌شوند. بردار موج وقتی شرط بازتاب براگ $k = \pm\pi/a$ را برآورده کند، موجی که به سمت راست حرکت می‌کند بازتاب براگ انجام می‌دهد و به چپ حرکت می‌کند و برعکس. هر بازتاب براگ بعدی جهت حرکت موج را معکوس می‌کند. موجی که نه به راست و نه به چپ حرکت می‌کند، موج ایستاده است: این موج جایی نمی‌رود.

امواج ایستاده حالت مستقل از زمان را نشان می‌دهند. از این دو موج متحرک می‌توان دو موج ایستاده متفاوت بنا کرد:

$$\exp(\pm i\pi x/a) = \cos(\pi x/a) \pm i \sin(\pi x/a)$$

در نتیجه، امواج ایستاده عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} \psi(+) &= \exp(i\pi x/a) + \exp(-i\pi x/a) = 2 \cos(\pi x/a) \\ \psi(-) &= \exp(i\pi x/a) - \exp(-i\pi x/a) = 2i \sin(\pi x/a) \end{aligned} \quad (5)$$

این امواج ایستاده برحسب اینکه با تعویض $-x$ به x تغییر علامت دهند یا نه، با $(-)$ یا $(+)$ مشخص شده‌اند. هر دو موج ایستاده از قسمتهای مساوی از امواج متحرک به راست و چپ تشکیل شده است.

منشأ گاف انرژی

دو موج ایستاده $\psi(+)$ و $\psi(-)$ ، الکترونها را در نواحی مختلف انباشته می‌کنند، و لذا مقادیر انرژی پتانسیل این دو موج، در میدان یونهای شبکه متفاوت‌اند. این امر منشأ گاف انرژی است. چگالی احتمال، ρ ، ذره، به صورت $\rho = \exp(-ikx) \exp(ikx) = 1$ داریم، برای موج متحرک خالص $\exp(ikx)$ ، $\rho = |\psi|^2 = \psi^* \psi$ است. چگالی بار ثابت است. چگالی بار برای ترکیبهای خطی امواج تخت ثابت نیست. موج ایستاده $\psi(+)$ در (۵) را در نظر می‌گیریم؛ برای این موج داریم

$$\rho(+)=|\psi(+)|^2 \propto \cos^2 n\pi x/a$$

این تابع، الکترونها (بار منفی) را بر روی یونهای مثبتی انباشته می‌کند، که مراکزشان در $x = 0, a, 2a, \dots$ در شکل ۳ واقع است و در آنجا انرژی پتانسیل پایینترین مقدار را داراست.

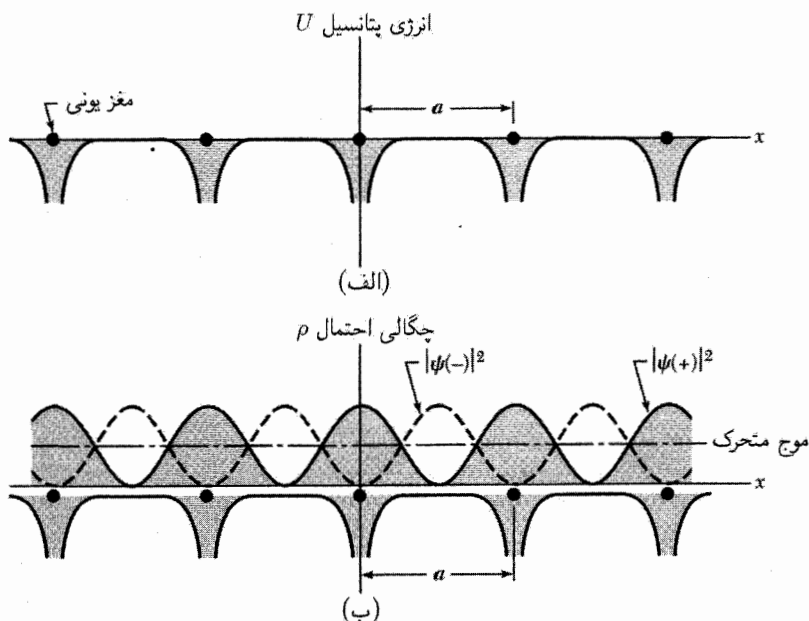
تغییر انرژی پتانسیل الکتروستاتیکی الکترون رسانش در میدان مغزهای یونی مثبت در شکل ۳ (الف) نشان داده شده است. مغزهای یونی حامل بار خالص مثبت‌اند، زیرا اتمها در فلزات یونیده‌اند و الکترونها ظرفیتی جدا شده‌اند تا نوار رسانش را تشکیل دهند. انرژی پتانسیل الکترون در میدان یون مثبت، منفی است، یعنی نیروی بین آنها جاذب است.

برای موج ایستاده دیگر $\psi(-)$ چگالی احتمال چنین است،

$$\rho(-)=|\psi(-)|^2 \propto \sin^2 \pi x/a$$

که الکترونها را دور از مغزهای یونی، متمرکز می‌کند. در شکل ۳ (ب) غلظت الکترونی امواج ایستاده $\psi(+)$ ، $\psi(-)$ ، و یک موج متحرک را نشان داده‌ایم.

در محاسبه مقادیر میانگین انرژی پتانسیل روی سه توزیع بار، درمی‌یابیم که انرژی پتانسیل $\rho(+)$ پایینتر از انرژی پتانسیل موج متحرک است، در حالی که انرژی پتانسیل $\rho(-)$ بالاتر از انرژی پتانسیل موج متحرک است. اگر انرژیهای $\rho(+)$ و $\rho(-)$ به اندازه E_g با هم اختلاف داشته باشند، یک گاف انرژی به پهنای E_g داریم. درست زیر این گاف انرژی، در نقاط A در شکل ۲، تابع موج به صورت $\psi(+)$ خواهد بود و درست بالای این گاف انرژی، در نقاط B تابع موج به شکل $\psi(-)$ خواهد بود.



شکل ۳. (الف) تغییرات انرژی پتانسیل الکترون رسانش در میدان مغزهای یونی شبکه خطی. (ب) توزیع چگالی احتمال ρ در شبکه برای $|\psi(-)|^2 \propto \sin^2 \pi x/a$ و برای موج متحرک. تابع موج $\psi(+)$ بار الکتریکی را بر روی مغز یونهای مثبت انباشته می‌کند، و بدین وسیله انرژی پتانسیل را در مقایسه با انرژی پتانسیل میانگین موج متحرک پایین می‌آورد. تابع موج $\psi(-)$ بار را در ناحیه بین یونها انباشته می‌کند و بدین وسیله انرژی پتانسیل را نسبت به انرژی پتانسیل موج متحرک افزایش می‌دهد. این شکل، کلیدی برای فهم منشأ گاف انرژی است.

بزرگی گاف انرژی

توابع موج در مرز منطقه $k = \pi/a$ عبارت‌اند از $\sqrt{2} \cos \pi x/a$ و $\sqrt{2} \sin \pi x/a$ ، که روی واحد طول بهنجار شده‌اند. فرض می‌کنیم انرژی پتانسیل الکترون در بلور در نقطه x برابر است با

$$U(x) = U \cos 2\pi x/a$$

اختلاف انرژی مرتبه اول بین دو حالت موج ایستاده عبارت است از

$$\begin{aligned} E_g &= \int_0^a dx U(x) [|\psi(+)|^2 - |\psi(-)|^2] \\ &= 2 \int_0^a dx U \cos(2\pi x/a) (\cos^2 \pi x/a - \sin^2 \pi x/a) = U \end{aligned} \quad (6)$$

می‌بینیم که گاف برابر است با مؤلفه فوریه پتانسیل بلور.

توابع بلوخ

ف. بلوخ این قضیه مهم را ثابت کرد که پاسخهای معادله شرودینگر برای پتانسیل دوره‌ای باید به این شکل خاص باشند:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (7)$$

که در آن $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ دارای دوره شبکه بلور است، یعنی $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{T})$. در اینجا \mathbf{T} بردار انتقال شبکه است. نتیجه (7) بیانی از قضیه بلوخ است که می‌گوید:

ویژه تابعهای معادله موج برای پتانسیل دوره‌ای به شکل حاصلضرب موج تخت $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ در تابع $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ با دوره شبکه بلور است.

تابع موج تا الکترون به شکل رابطه (7) تابع بلوخ نامیده می‌شود و، همان‌گونه که بعداً خواهیم دید، می‌توان آن را به صورت مجموع امواج متحرک تجزیه کرد. با جمع کردن توابع بلوخ می‌توان بسته‌های موج جایگزیده‌ای ایجاد کرد که نمایشگر الکترونهايي باشند که آزادانه در میدان پتانسیل مغزهای یونی منتشر می‌شوند.

در اینجا استدلال خاصی از قضیه بلوخ را ارائه می‌دهیم که برای ψ_k ی ناواگن معتبر است، یعنی برای وقتی که هیچ تابع موج دیگری با همان انرژی و بردار موج به صورت ψ_k وجود نداشته باشد. مورد عام بعداً بررسی می‌شود: N نقطه شبکه همانند را روی حلقه‌ای به طول Na در نظر می‌گیریم. انرژی پتانسیل برحسب a دوره‌ای و به‌گونه $U(x) = U(x + sa)$ است، که در آن s عددی درست است. از تقارن حلقه راهنمایی می‌جوئیم و در پی پاسخهای معادله موج به صورت زیر هستیم:

$$\psi(x + a) = C\psi(x) \quad (8)$$

که در آن C ثابت است. در این صورت با پی‌مودن یک دور کامل حلقه داریم

$$\psi(x + Na) = \psi(x) = C^N \psi(x)$$

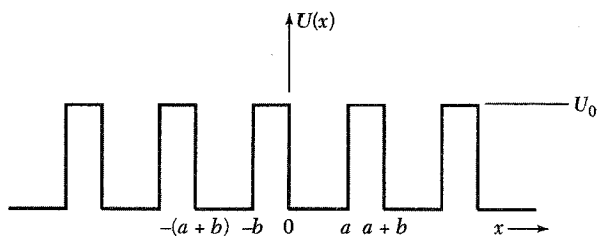
زیرا $\psi(x)$ باید تک‌مقدار باشد. چنین برمی‌آید که C باید یکی از N ریشه یک باشد، یا

$$C = \exp(i\chi\pi s/N); \quad s = 0, 1, 2, \dots, N-1 \quad (9)$$

می‌بینیم که رابطه

$$\psi(x) = u_k(x) \exp(i\chi\pi sx/Na) \quad (10)$$

معادله (8) را به شرطی برآورده می‌کند که $u_k(x)$ دارای دوره a باشد، به‌گونه‌ای که $u_k(x) = u_k(x + a)$. این همان نتیجه (7) بلوخ است.



شکل ۴. چاه پتانسیل مربعی دوره‌ای به صورتی که کرونیگ و پنی معرفی کردند.

مدل کرونیگ-پنی

آرایهٔ چاههای مربعی در شکل ۴ پتانسیل دوره‌ای است که برای آن می‌توان معادلهٔ موج را برحسب توابع مقدماتی حل کرد. معادلهٔ موج عبارت است از

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + U(x)\psi = \epsilon \psi \quad (11)$$

که در آن $U(x)$ انرژی پتانسیل و ϵ ویژه‌مقدار انرژی است.

در ناحیهٔ $0 < x < a$ که در آن $U = 0$ ، ویژه‌تابع به صورت یک ترکیب خطی از امواج تخت است،

$$\psi = Ae^{iKx} + Be^{-iKx} \quad (12)$$

این امواج تخت با انرژی

$$\epsilon = \hbar^2 K^2 / 2m \quad (13)$$

به راست و چپ حرکت می‌کنند. در ناحیهٔ $-b < x < 0$ درون سد پتانسیل، پاسخ به شکل زیر است

$$\psi = Ce^{Qx} + De^{-Qx} \quad (14)$$

و

$$U_0 - \epsilon = \hbar^2 Q^2 / 2m \quad (15)$$

در پی پاسخ کاملی به شکل رابطهٔ (۷) بلوخ هستیم. بنابراین پاسخ در $a < x < a+b$ باید به پاسخ

(۱۴) در ناحیهٔ $-b < x < 0$ توسط قضیهٔ بلوخ مربوط شود:

$$\psi(a < x < a+b) = \psi(-b < x < 0)e^{ik(a+b)} \quad (16)$$

این رابطه تعیین‌کنندهٔ بردار موج k است به صورت شاخصی برای پاسخ به‌کار می‌رود.

ثابت‌های A, B, C ، و D به‌گونه‌ای برگزیده می‌شوند که ψ و $d\psi/dx$ در $x = 0$ و $x = a$ پیوسته باشند: اینها شرایط مرزی متداول در مکانیک کوانتومی در مسئله‌های حاوی چاههای پتانسیل مربعی‌اند. در $x = 0$ و Q از رابطه (۱۴)،

$$A + B = C + D \quad (۱۷)$$

$$iK(A - B) = Q(C - D) \quad (۱۸)$$

در $x = a$ با به‌کار بردن رابطه (۱۶) برای $\psi(a)$ زیر سد برحسب $\psi(-b)$ داریم،

$$Ae^{iKa} + Be^{-iKa} = (Ce^{-Qb} + De^{Qb})e^{ik(a+b)} \quad (۱۹)$$

$$iK(Ae^{iKa} - Be^{-iKa}) = Q(Ce^{-Qb} - De^{Qb})e^{ik(a+b)} \quad (۲۰)$$

چهار معادله (۱۷) تا (۲۰) فقط وقتی دارای پاسخ‌اند که درمیان ضرایب A, B, C ، و D صفر باشد، یا

$$[(Q^2 - K^2)/2QK] \sinh Qb \sin Ka + \cosh Qb \cos Ka = \cos k(a+b) \quad (۲۱الف)$$

که به‌دست آوردن این معادله نسبتاً خسته‌کننده است.

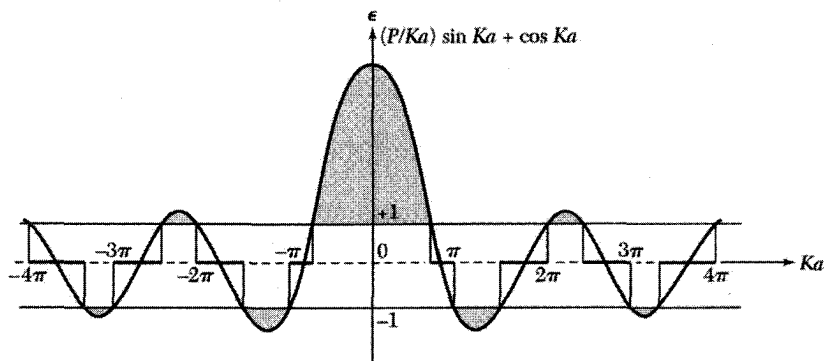
برای حد $b = 0$ و $U_0 = \infty$ ، به‌گونه‌ای که $Q^2 ba/2 = P$ یک کمیت متناهی باشد، پتانسیل تابع دلتای دوره‌ای نشان داده می‌شود که به نتیجه ساده‌تری می‌انجامد. در این حد، $Q \gg K$ و $Qb \ll 1$. آنگاه (۲۱ الف) به این شکل مختصر می‌شود،

$$(P/Ka) \sin Ka + \cos Ka = \cos ka \quad (۲۱ب)$$

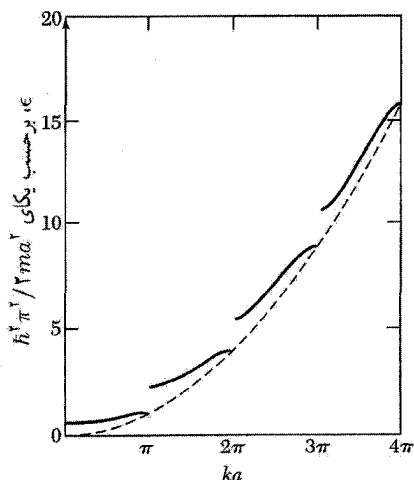
گستره‌هایی از K که این معادله برای آنها دارای پاسخ است در شکل ۵ برای حالت $P = 3\pi/2$ رسم شده‌اند. مقادیر متناظر انرژی در شکل ۶ رسم شده‌اند. به‌گفته‌های انرژی در مرزهای منطقه توجه کنید. شاخص مهم، بردار موج k مربوط به تابع بلوخ است، نه بردار موج K در رابطه (۱۲) که مطابق رابطه (۱۳) به‌انرژی مربوط می‌شود. بررسی این مسئله در فضای بردار موج بعداً در این فصل انجام می‌شود.

معادله موج الکترون در پتانسیل دوره‌ای

در شکل ۳، شکل تقریبی پاسخ مورد انتظار معادله شرودینگر را برای حالتی بررسی کردیم، که بردار موج در مرز منطقه، مثلاً در $k = \pm\pi/a$ ، باشد. حال، معادله موج را برای یک پتانسیل عمومی به‌ازای مقادیر عمومی k به تفصیل بررسی می‌کنیم. فرض می‌کنیم $v(x)$ انرژی پتانسیل الکترون در یک شبکه خطی با



شکل ۵. نمودار تابع $(P/Ka) \sin Ka + \cos Ka$ برای $P = 3\pi/2$. مقادیر مجاز انرژی ϵ با آن گستره‌هایی از موج متحرک یا پاسخهای بلوخ گونه برای معادله موج وجود نخواهد داشت، در نتیجه در طیف انرژی گافهای ممنوع تشکیل می‌شود.



شکل ۶. نمودار انرژی بر حسب عدد موج برای پتانسیل کرونیگ-پننی به‌ازای $P = 3\pi/2$. به گافهای انرژی در $ka = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots$ توجه کنید.

ثابت شبکه a باشد، می‌دانیم که انرژی پتانسیل تحت انتقال شبکه بلور ناورداست: $U(x) = U(x + a)$. تابعی را که تحت انتقال شبکه بلور ناوردا باشد، می‌توان به صورت رشته فوریه بر حسب بردارهای شبکه وارون G بسط داد. رشته فوریه را برای انرژی پتانسیل به شکل زیر می‌نویسیم

$$U(x) = \sum_G U_G e^{iGx} \quad (22)$$

مقادیر ضرایب U_G برای پتانسیلهای واقعی بلور با افزایش بزرگی G به سرعت کاهش می‌یابند. برای پتانسیل کولنی محض، u_G به شکل $1/G^2$ کاهش می‌یابد. می‌خواهیم انرژی پتانسیل $U(x)$ ، تابع حقیقی باشد:

$$U(x) = \sum_{G>0} U_G (e^{iGx} + e^{-iGx}) = 2 \sum_{G>0} U_G \cos Gx \quad (23)$$

برای سهولت فرض کرده‌ایم که بلور حول $x = 0$ متقارن است و $U_0 = 0$. معادله موج الکترون در بلور به صورت $\mathcal{H}\psi = \epsilon\psi$ است، که \mathcal{H} هامیلتونی و ϵ ویژه‌مقدار انرژی است. پاسخهای ψ را ویژه‌توابع یا اوربیتالها یا توابع بلوخ می‌نامند. شکل صریح معادله موج به صورت زیر است

$$\left(\frac{1}{2m} p^2 + U(x) \right) \psi(x) = \left(\frac{1}{2m} p^2 + \sum_G U_G e^{iGx} \right) \psi(x) = \epsilon \psi(x) \quad (24)$$

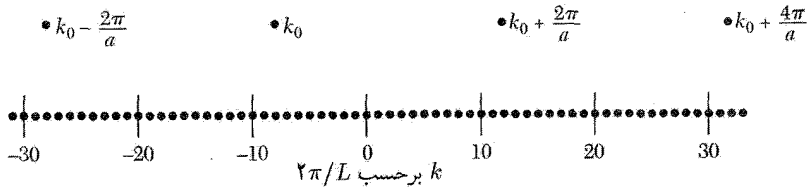
معادله (24) در تقریب یک الکترونی نوشته شده است، که در آن اوربیتال $\psi(x)$ مبین حرکت یک الکترون در پتانسیل مغزهای یونی و در پتانسیل میانگین الکترونی رسانش دیگر است. تابع موج $\psi(x)$ را می‌توان به شکل رشته فوریه بیان کرد که روی تمام بردار موجهایی جمع شده باشد، که از نظر شرایط مرزی مجازند. بنابراین

$$\psi = \sum_k C(k) e^{ikx} \quad (25)$$

که در آن k حقیقی است. شاخص k را به خوبی می‌توانستیم به صورت شاخص پایینی بر C ، به صورت C_k ، بنویسیم).

مجموعه مقادیر K به شکل $2\pi n/L$ است، زیرا این مقادیر شرایط مرزی دوره‌ای را روی طول L برآورده می‌کنند؛ در اینجا n هر عدد درستی، مثبت یا منفی، است. فرض نمی‌کنیم که $\psi(x)$ بر حسب انتقال بنیادی شبکه دوره‌ای باشد (عملاً هم این فرض درست نیست). قضیه بلوخ در رابطه (27) ویژگیهای انتقالی $\psi(x)$ را تعیین می‌کند.

همه بردار موجهای مجموعه $2\pi n/L$ در بسط فوریه یک تابع بلوخ وارد نمی‌شوند. در صورتی که یک بردار موج k در ψ به خصوصی وجود داشته باشد، سایر بردار موجهای در بسط فوریه به شکل $k + G$ خواهند بود، که در آن G هر بردار شبکه وارون است. این نتیجه را در ادامه در رابطه (29) اثبات می‌کنیم. تابع موج ψ را، که شامل مؤلفه فوریه k است، می‌توان با ψ_k یا به طور معادل ψ_{k+G} شاخص‌گذاری کرد، زیرا اگر k در رشته فوریه وارد شود $+G$ نیز وارد می‌شود. همان‌طور که در شکل 7 نشان داده شده



شکل ۷. نقاط پایینی نمایشگر مقادیر بردار موج $k = 2\pi n/L$ است که نسبت به شرایط مرزی اعمال شده بر تابع موج، روی حلقه‌ای به محیط L مرکب از 2π یاخته بسط، مجازند. این مقادیر مجاز تا $\pm\infty$ ادامه می‌یابند. نقاط بالایی اولین بردار موجهایی را نشان می‌دهند که می‌توانند در بسط فوریه تابع موج $\psi(x)$ وارد شوند. این نقاط از بردار موج خاص $k = k_0 = -\lambda(2\pi/L)$ آغاز شده‌اند. کوتاهترین بردار شبکه وارون برابر است با $2\pi/a = 2\pi(2\pi/L)$.

است، بردار موجهای $k + G$ ، که در آن G تمام مقادیر خود را اختیار می‌کند، زیرمجموعه محدودی است از بردارهای موج $2\pi n/L$.

معمولاً شاخص k ی تابع بلوخ را چنان برمی‌گزینیم که در منطقه اول بریلوئن واقع شود. اگر قراردادهای دیگر به کار روند، تذکر خواهیم داد. این وضعیت مانند مسئله فونونها در شبکه تک‌اتمی نیست، که در آن هیچ‌یک از مؤلفه‌های حرکت یونی در خارج منطقه اول وجود ندارد.

مسئله الکترون مانند مسئله پراش پرتو x است، زیرا میدان الکترومغناطیس مانند تابع موج الکترون نه تنها روی یونها بلکه در هر جایی داخل بلور وجود دارد.

برای حل معادله موج، معادله (۲۵) را در رابطه (۲۴) قرار می‌دهیم تا مجموعه‌ای از معادلات جبری خطی برای ضرایب فوریه حاصل شود. جمله انرژی جنبشی عبارت است از

$$\frac{1}{2m} p^2 \psi(x) = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right)^2 \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k k^2 C(k) e^{ikx}$$

و جمله انرژی پتانسیل برابر است با

$$\left(\sum_G U_G e^{iGx} \right) \psi(x) = \sum_G \sum_k U_G e^{iGx} C(k) e^{ikx}$$

معادله موج به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\sum_k \frac{\hbar^2}{2m} k^2 C(k) e^{ikx} + \sum_G \sum_k U_G C(k) e^{i(k+G)x} = \epsilon \sum_k C(k) e^{ikx} \quad (26)$$

ضریب هر مؤلفه فوریه در دو طرف معادله باید یکسان باشد. بنابراین معادله اصلی را خواهیم داشت:

$$\boxed{(\lambda_k - \epsilon)C(k) + \sum_G U_G C(k - G) = 0} \quad (27)$$

با نمادگذاری

$$\lambda_k = \hbar^2 k^2 / 2m \quad (28)$$

هر چند معادله (۲۷)، به دلیل آنکه مجموعه‌ای از معادلات جبری جای معادله دیفرانسیل معمولی (۲۴) را گرفته‌اند، ناآشناست، شکل مفیدی از معادله موج در شبکه دوره‌ای است. این مجموعه ناخوشایند و پیچیده به نظر می‌رسد، زیرا اصولاً تعداد بیشماری از $C(k-G)$ را باید تعیین کرد. در عمل اغلب تعداد اندکی، شاید دو یا چهار، بسنده خواهد بود. برای درک مزیت‌های عملی رهیافت جبری کمی تجربه لازم است.

بیان مجدد قضیه بلوخ

هرگاه C ها را از معادله (۲۷) تعیین کنیم، تابع موج (۲۵) به صورت زیر بیان می‌شود،

$$\psi_k(x) = \sum_G C(k-G) e^{i(k-G)x} \quad (29)$$

که می‌توان آن را این‌گونه مجدداً مرتب کرد:

$$\psi_k(x) = \left(\sum_G C(k-G) e^{-iGx} \right) e^{ikx} = e^{ikx} u_k(x),$$

با این تعریف که

$$u_k(x) \equiv \sum_G C(k-G) e^{-iGx}$$

از آنجا که $u_k(x)$ یک رشته فوریه روی بردارهای شبکه وارون است، تحت انتقال T شبکه بلور ناورداست، در نتیجه $u_k(x) = u_k(x+T)$. با محاسبه $u_k(x+T)$ این موضوع را مستقیماً ثابت می‌کنیم:

$$u_k(x+T) = \sum C(k-G) e^{-iG(x+T)} = e^{-iGT} \left[\sum C(k-G) e^{-iGx} \right] = e^{-iGT} u_k(x)$$

چون به کمک رابطه ۱۷ از فصل ۲، $\exp(-iGT) = 1$ ، نتیجه می‌شود که $u_k(x+T) = u_k(x)$ ، لذا دوره‌ای بودن u_k تصدیق می‌شود. این عمل اثبات دیگر و دقیق قضیه بلوخ است و حتی وقتی ψ_k واگن باشد معتبر است.

تکانه بلوری الکترون

بردار موج k که برای شاخص‌گذاری تابع بلوخ به‌کار می‌رود چه مفهومی دارد؟ این بردار دارای چندین ویژگی است:

• تحت یک انتقال شبکه بلور که r را به $r + T$ منتقل کند، داریم

$$\psi_k(r + T) = e^{ik \cdot T} e^{ik \cdot r} u_k(r + T) = e^{ik \cdot T} \psi_k(r) \quad (30)$$

زیرا $u_k(r + T) = u_k(r)$. بنابراین وقتی انتقال T شبکه بلور را انجام می‌دهیم، تابع بلوخ در عامل فاز $\exp(ik \cdot T)$ ضرب می‌شود.

• اگر پتانسیل شبکه صفر باشد، معادله اصلی (۲۷) به صورت $(\lambda_k - \epsilon)C(k) = 0$ درمی‌آید، در نتیجه، تمامی $C(k - G)$ ها بجز $C(k)$ صفر می‌شوند و بنابراین $u_k(r)$ ثابت است. درست به‌گونه الکترون آزاد، داریم $\psi_k(r) = e^{ik \cdot r}$. فرض می‌کنیم بینش انتخاب k ی «صحیح» را برای شاخص‌گذاری داشته‌ایم. همان‌طور که خواهیم دید برای بیشتر مقاصد، گزینشهای دیگر k که با بردار شبکه وارون اختلاف دارد، مناسب‌ترند.

• کمیت k در قوانین پایستگی حاکم بر فرایندهای برخورد الکترونها در بلورها وارد می‌شود. (قوانین پایستگی در واقع قواعد گزینشی برای گذارها هستند.) در نتیجه $\hbar k$ را تکانه بلوری الکترون می‌نامند. وقتی الکترون با بردار موج k در برخورد فونونی بردار موج q را جذب کند، قاعده گزینش به صورت $k + q = k' + G$ خواهد بود. در این فرایند الکترون از حالت k به حالت k' پراکنده می‌شود و G بردار شبکه وارون است. هرگونه شاخص‌گذاری اختیاری توابع بلوخ را می‌توان، بدون آنکه فیزیک این فرایند تغییر کند، در G مستتر دانست.

حل معادله اصلی

معادله اصلی (۲۷)،

$$(\lambda_k - \epsilon)C(k) + \sum_G U_G C(k - G) = 0 \quad (31)$$

نمایشگر مجموعه‌ای از معادلات خطی همزمان است که ضرایب $C(k - G)$ را به‌ازای همه بردارهای شبکه وارون G به هم مربوط می‌سازد. این یک مجموعه است، زیرا به تعداد ضرایب C معادله خواهیم داشت. این معادلات در صورتی سازگارند که درمیان ضرایب برابر صفر شود.

این معادلات را برای یک مسئله صریح می‌نویسیم. کوتاهترین G را با g مشخص می‌کنیم. فرض می‌کنیم که انرژی پتانسیل $U(x)$ فقط شامل یک مؤلفه فوری $U_g = U_{-g}$ باشد، که با U نشان داده می‌شود. آنگاه قسمتی از درمیان ضرایب به صورت زیر داده می‌شود:

$$\begin{array}{cccccc}
 \lambda_{k-2} - \epsilon & U & \circ & \circ & \circ & \\
 U & \lambda_{k-g} - \epsilon & U & \circ & \circ & \\
 \circ & U & \lambda_k - \epsilon & U & \circ & \\
 \circ & \circ & U & \lambda_{k+g} - \epsilon & U & \\
 \circ & \circ & \circ & U & \lambda_{k+2g} - \epsilon &
 \end{array} \quad (32)$$

برای مشاهده این مطلب، پنج معادله متوالی از مجموعه (۳۱) را بنویسید. اصولاً این دترمینان از نظر وسعت نامتناهی است، ولی غالباً کافی است قسمتی از آن را، که نشان داده‌ایم، مساوی صفر قرار دهیم. در یک k معلوم، بجز در موردی که نوارها روی هم می‌افتند، هر ریشه ϵ یا ϵ_k روی نوار انرژی متفاوتی قرار می‌گیرد. پاسخ دترمینان (۳۲) مجموعه‌ای از ویژه‌مقدارهای انرژی ϵ_{nk} را ارائه می‌دهد، در اینجا شاخص n برای مرتب کردن انرژیهاست و k بردار موجی است که C_k را مشخص می‌کند. غالباً k را در منطقه اول منظور می‌کنند تا امکان اشتباه در شاخص‌گذاری کاهش یابد. اگر k را به‌گونه‌ای اختیار می‌کردیم که به اندازه یک بردار شبکه وارون با مقدار اولیه‌اش تفاوت می‌داشت، همان مجموعه معادلات را با ترتیب دیگری، ولی با همان طیف انرژی، به دست می‌آوردیم.

مدل کرونیگ-پنی در فضای وارون

برای مثالی از استفاده معادله اصلی (۳۱) برای مسئله‌ای که دقیقاً قابل حل است، مدل کرونیگ-پنی پتانسیل تابع دلتای دوره‌ای را به کار می‌بریم:

$$U(x) = 2 \sum_{G>0} U_G \cos Gx = Aa \sum_s \delta(x - sa) \quad (33)$$

که در آن A ثابت و a فاصله شبکه‌ای است. جمع روی تمام مقادیر صحیح s و بین 0 و $\frac{1}{a}$ است، شرایط مرزی روی حلقه‌ای به طول واحد، یعنی روی تعداد $\frac{1}{a}$ اتم، دوره‌ای است. در نتیجه ضرایب فوریه پتانسیل عبارت‌اند از

$$\begin{aligned}
 U_G &= \int_0^1 dx U(x) \cos Gx = Aa \sum_s \int_0^1 dx \delta(x - sa) \cos Gx \\
 &= Aa \sum_s \cos Gsa = A
 \end{aligned} \quad (34)$$

همه U_G ، برای پتانسیل تابع دلتا برابرند.

معادله اصلی را با k به عنوان شاخص بلوخ می‌نویسیم. در نتیجه رابطه (۳۱) می‌شود:

$$(\lambda_k - \epsilon)C(k) + A \sum_n C(k - 2\pi n/a) = 0 \quad (35)$$

که در آن $\lambda_k \equiv \hbar^2 k^2 / 2m$ و جمع روی تمامی اعداد درست n است. می‌خواهیم رابطه (۳۵) را برای $\epsilon(k)$ حل کنیم.

تابع زیر را تعریف می‌کنیم

$$f(k) = \sum_n C(k - 2\pi n/a) \quad (36)$$

در نتیجه رابطه (۳۵) می‌شود

$$C(k) = -\frac{(2mA/\hbar^2)f(k)}{k^2 - (2m\epsilon/\hbar^2)} \quad (37)$$

از آنجا که جمع (۳۶) روی تمامی ضرایب C است، برای هر n داریم،

$$f(k) = f(k - 2\pi n/a) \quad (38)$$

این رابطه به ما اجازه می‌دهد بنویسیم

$$C(k - 2\pi n/a) = -(2mA/\hbar^2)f(k)[(k - 2\pi n/a)^2 - 2m\epsilon/\hbar^2]^{-1} \quad (39)$$

با استفاده از رابطه (۳۶) و حذف $f(k)$ از دو طرف، دو طرف را روی همه n جمع می‌زنیم تا رابطه زیر به دست آید،

$$(\hbar^2/2mA) = -\sum_n [(k - 2\pi n/a)^2 - (2m\epsilon/\hbar^2)]^{-1} \quad (40)$$

جمع‌زنی را می‌توان به کمک این رابطه استاندارد انجام داد:

$$\text{ctn}x = \sum_n \frac{1}{n\pi + x} \quad (41)$$

بعد از عملیات مثلثاتی که در آن از رابطه‌های اختلاف دو کتانژانت و حاصلضرب دو سینوس استفاده می‌شود، جمع‌زنی در رابطه (۴۰) می‌شود

$$\frac{a^2 \sin Ka}{2Ka(\cos ka - \cos Ka)} \quad (42)$$

که در آن مانند رابطه (۱۳) می‌نویسیم $K^2 = 2m\epsilon/\hbar^2$

نتیجه نهایی برای رابطه (۴۰) برابر است با

$$(mAa^2/2\hbar^2)(Ka)^{-1} \sin Ka + \cos Ka = \cos ka \quad (43)$$

که با نتیجه کرونیگ-پینی (۲۱ب) با p به جای $mAa^2/2\hbar^2$ سازگار است.

تقریب شبکه خالی

معمولاً ساختارهای نواری واقعی به صورت نمودارهای انرژی برحسب بردار موج در منطقه اول بریلوئن داده می‌شوند. وقتی بردارهای موج در خارج از اولین منطقه قرار گیرند، با تفریق بردار شبکه وارون مناسب، به اولین منطقه برمی‌گردند. چنین انتقالی همواره عملی است. این عمل برای تجسم مفید است. هرگاه انرژیهای نواری با تقریب نسبتاً خوبی با انرژیهای الکترون آزاد $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ برابر باشند، توصیه می‌شود که محاسبه با بردن انرژیهای الکترون آزاد به منطقه اول شروع شود. این شگرد، وقتی شخص با آن آشنا شود، کاملاً ساده است. در پی G ای هستیم که برای آن بردار k' در منطقه اول در رابطه زیر صدق کند.

$$k' + G = k$$

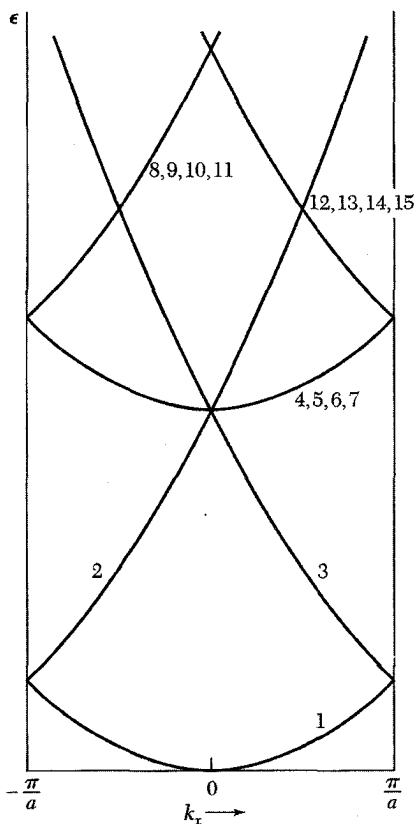
که در آن k نامحدود است و بردار موج واقعی الکترون آزاد در شبکه خالی است. (وقتی موج تخت توسط شبکه مدوله شد، دیگر تک بردار موج «واقعی» برای حالت ψ وجود ندارد.) اگر پریم را از k' به صورت علامت غیر ضروری حذف کنیم، انرژی الکترون آزاد را می‌توان همواره به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} \epsilon(k_x, k_y, k_z) &= (\hbar^2 / 2m)(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 \\ &= (\hbar^2 / 2m)[(k_x + G_x)^2 + (k_y + G_y)^2 + (k_z + G_z)^2] \end{aligned}$$

بردار k در اولین منطقه و بردار G مجاز است که کلیه نقاط شبکه وارون مناسب را اختیار کند. برای مثال نوارهای با انرژی پایین الکترون آزاد را برای شبکه مکعبی ساده در نظر می‌گیریم. فرض می‌کنیم می‌خواهیم انرژی را برحسب تابعی از k در جهت $[100]$ نمایش دهیم. برای سهولت، واحدها را به گونه‌ای برمی‌گزینیم که $\hbar^2 / 2m = 1$. در این تقریب شبکه خالی، انرژیهای چند نوار پایین $\epsilon(000)$ را در $k = 0$ و $\epsilon(k_a \cdot 0)$ در امتداد محور k_x در منطقه اول نشان می‌دهیم:

$\epsilon(k_x 0 0)$	$\epsilon(000)$	$Ga/2\pi$	نوار
k_x^2	۰	۰۰۰	۱
$(k_x \pm 2\pi/a)^2$	$(2\pi/a)^2$	۱۰۰, ۱۰۰	۲, ۳
$(k_x^2 + 2\pi/a)^2$	$(2\pi/a)^2$	۰۱۰, ۰۱۰, ۰۰۱, ۰۰۱	۴, ۵, ۶, ۷
$(k_x + 2\pi/a)^2 + (2\pi/a)^2$	$2(2\pi/a)^2$	۱۱۰, ۱۰۱, ۱۱۰, ۱۰۱	۸, ۹, ۱۰, ۱۱
$(k_x - 2\pi/a)^2 + (2\pi/a)^2$	$2(2\pi/a)^2$	۱۱۰, ۱۰۱, ۱۱۰, ۱۰۱	۱۲, ۱۳, ۱۴, ۱۵
$k_x^2 + 2(2\pi/a)^2$	$2(2\pi/a)^2$	۰۱۱, ۰۱۱, ۰۱۱, ۰۱۱	۱۶, ۱۷, ۱۸, ۱۹

این نوارهای الکترون آزاد در شکل ۸ رسم شده‌اند. ترسیم همین نوارها برای k موازی با جهت $[111]$ در فضای برداری موج تمرین خوبی است.



شکل ۸. نوارهای انرژی پایین الکترون آزاد در شبکه خالی sc که به منطقه اول بریلوئن انتقال یافته‌اند و برحسب $(k_x = 0)$ رسم شده‌اند. انرژی الکترون آزاد برابر با $\hbar^2(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 / 2m$ است، که \mathbf{G} ها در دومین ستون جدول ارائه شده‌اند. منحنیهای پر در منطقه اول بریلوئن، $-\pi/a \leq k_x \leq \pi/a$ ، قرار دارند. اگر نوارهای انرژی این‌گونه رسم شوند، می‌گوییم در نمایش منطقه‌ای تحویل یافته‌اند.

حل تقریبی در نزدیکی مرز منطقه

فرض می‌کنیم مؤلفه‌های فوریه U_G انرژی پتانسیل در مقایسه با انرژی جنبشی الکترون آزاد در مرز منطقه کوچک باشند. نخست یک بردار موج را درست در مرز منطقه $\frac{1}{4}G$ ، یعنی در π/a ، بررسی می‌کنیم. در اینجا

$$(k - G)^2 = \left(\frac{1}{4}G - G\right)^2 = \left(\frac{3}{4}G\right)^2; k^2 = \left(\frac{1}{4}G\right)^2$$

در نتیجه، در مرز منطقه انرژی جنبشی دو مؤلفه $k = \pm \frac{1}{4}G$ موج با هم برابرند.

اگر $C(1/2G)$ ضریب مهمی در اوربیتال (۲۹) در مرز منطقه باشد، $C(-1/2G)$ نیز ضریب مهمی خواهد بود. این نتیجه از بحث (۵) نیز حاصل می‌شود. ما فقط آن معادلاتی را در معادله اصلی نگه می‌داریم که شامل هر دو ضریب $C(1/2G)$ و $C(-1/2G)$ باشند، و از دیگر ضریبها چشم‌پوشی می‌کنیم.

یکی از معادلات (۳۱)، با در نظر گرفتن $k = \frac{1}{\hbar}G$ و $\lambda = \hbar^2 \left(\frac{1}{\hbar}G\right)^2 / 2m$ ، به صورت زیر درمی آید

$$(\lambda - \epsilon)C \left(\frac{1}{\hbar}G\right) + UC \left(-\frac{1}{\hbar}G\right) = 0 \quad (44)$$

معادله دیگر (۳۱) با $k = \frac{1}{\hbar}G$ به گونه زیر درمی آید

$$(\lambda - \epsilon)C \left(-\frac{1}{\hbar}G\right) + UC \left(\frac{1}{\hbar}G\right) = 0 \quad (45)$$

این دو معادله در صورتی برای این دو ضریب جواب غیر صفر دارند که انرژی ϵ شرایط زیر را برآورده کند

$$\begin{vmatrix} \lambda - \epsilon & U \\ U & \lambda - \epsilon \end{vmatrix} = 0 \quad (46)$$

که از آنجا

$$(\lambda - \epsilon)^2 = U^2; \quad \epsilon = \lambda \pm U = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\hbar}G\right)^2 \pm U \quad (47)$$

انرژی دارای دو ریشه است، یکی به اندازه U از انرژی جنبشی الکترون آزاد پایینتر و دیگری به اندازه U بالاتر است. بنابراین، انرژی پتانسیل $2U \cos Cx$ یک گاف انرژی به اندازه $2U$ در مرز منطقه ایجاد کرده است. نسبت C ها را می توان به کمک هر یک از معادلات (۴۴) یا (۴۵) پیدا کرد:

$$\frac{C \left(-\frac{1}{\hbar}G\right)}{C \left(\frac{1}{\hbar}G\right)} = \frac{\epsilon - \lambda}{U} = \pm 1 \quad (48)$$

که در مرحله آخر از معادله (۴۷) استفاده شده است. بنابراین بسط فوریه $\psi(x)$ در مرز منطقه دارای این دو پاسخ است:

$$\psi(x) = \exp(iGx/2) \pm \exp(-iGx/2)$$

این اوربیتالها با رابطه (۵) همانندند.

یکی از پاسخها تابع موج را پایین گاف انرژی و دیگری تابع موج را بالای گاف به دست می دهد. علامت U تعیین می کند که کدام جواب دارای انرژی پایینتر است.

اکنون اوربیتالهایی را پیدا می کنیم که بردار موج k آنها، در نزدیکی مرز منطقه، $\frac{1}{\hbar}G$ است. این بار همان تقریب دو مؤلفه ای را با تابع موجی به شکل زیر به کار می بریم

$$\psi(x) = C(k)e^{ikx} + C(k-G)e^{i(k-G)x} \quad (49)$$

همان‌گونه که از معادله اصلی (۳۱) برمی‌آید، جفت معادلات زیر را حل می‌کنیم

$$(\lambda_k - \epsilon)C(k) + UC(k - G) = 0$$

$$(\lambda_{k-G} - \epsilon)C(k - G) + UC(k) = 0$$

λ_k به صورت $\hbar^2 k^2 / 2m$ تعریف می‌شود. این معادلات در صورتی جواب دارند که ϵ در شرط زیر صدق کند

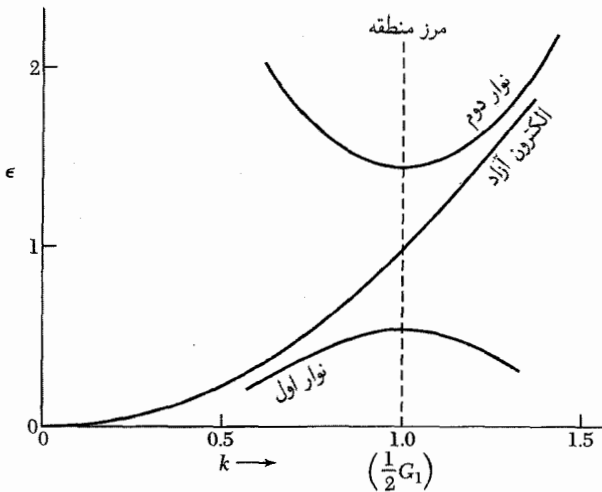
$$\begin{vmatrix} \lambda_k - \epsilon & U \\ U & \lambda_{k-G} - \epsilon \end{vmatrix} = 0$$

$$\epsilon^2 - \epsilon(\lambda_{k-G} + \lambda_k) + \lambda_{k-G}\lambda_k - U^2 = 0$$

انرژی دارای دو ریشه است:

$$\epsilon = \frac{1}{2}(\lambda_{k-G} + \lambda_k) \pm \left[\frac{1}{4}(\lambda_{k-G} - \lambda_k)^2 + U^2 \right]^{1/2} \quad (50)$$

و هر ریشه یک نوار انرژی را توصیف می‌کند که در شکل ۹ ترسیم شده‌اند. مناسب است که انرژی را



شکل ۹. پاسخهای (۵۰) در نمایش منطقه‌ای دوره‌ای، در ناحیه نزدیک به مرز منطقه اول بریلوئن. واحدها آنچنان‌اند که $\hbar^2/m = 1$ ، $G = 2$ ، $U = -0.45$ ، گاف انرژی در مرز منطقه برابر 0.90 است. مقدار U برای این شکل را عمداً بزرگ برگزیده‌ایم، این مقدار آن قدر بزرگ است که برای آن دیگر تقریب دوجمله‌ای دقیق نیست.

برحسب کمیت \tilde{K} ، در ناحیه $|U| \ll \hbar^2 G \tilde{K} / 2m$ ، بسط دهیم (علامت بالای K را مد می‌نامند)، \tilde{K} نمایشگر اختلاف بین بردار موج k و مرز منطقه است، یعنی $\tilde{K} \equiv k - \frac{1}{4}G$:

$$\begin{aligned} \epsilon_{\tilde{K}} &= (\hbar^2/2m) \left(\frac{1}{4}G^2 + \tilde{K}^2 \right) \pm [4\lambda(\hbar^2 \tilde{K}^2/2m) + U^2]^{1/2} \\ &\simeq (\hbar^2/2m) \left(\frac{1}{4}G^2 + \tilde{K}^2 \right) \pm U[1 + 2(\lambda/U^2)(\hbar^2 \tilde{K}^2/2m)], \quad (51) \end{aligned}$$

در اینجا مانند قبل داریم $(\frac{1}{4}G)^2 \lambda = (\hbar^2/2m)$. با نوشتن در ریشه معادله (۴۷) در مرز منطقه به صورت $\epsilon(\pm)$ ، می‌توان رابطه (۵۱) را به صورت زیر نوشت

$$\epsilon_{\tilde{K}}(\pm) = \epsilon(\pm) + \frac{\hbar^2 \tilde{K}^2}{2m} \left(1 \pm \frac{2\lambda}{U} \right) \quad (52)$$

در حالتی که بردار موج خیلی به مرز منطقه در $\frac{1}{4}G$ نزدیک باشد مقادیر فوق ریشه‌های انرژی اند. توجه کنید که انرژی تابع درجه دومی از بردار موج \tilde{K} است. برای U منفی پاسخ $(-)$ مربوط به نوار بالاتر و $(+)$ مربوط به نوار پایینتر است. C ها در شکل ۱۰ نمایش داده شده‌اند.

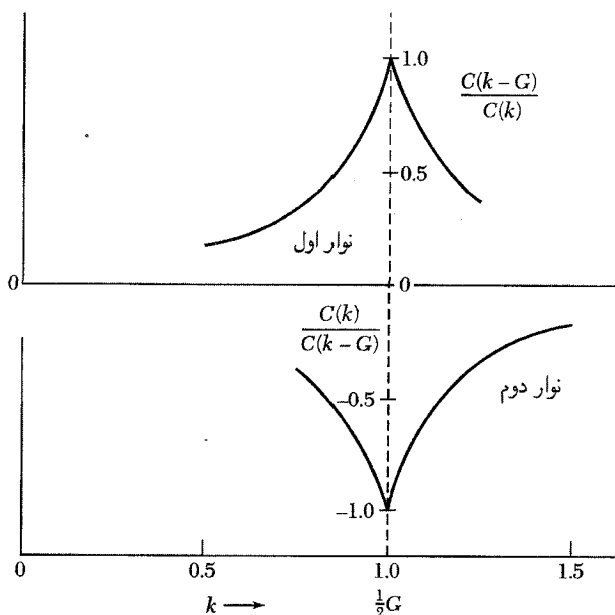
تعداد اوربیتالها در نوار

یک بلور خطی را که از تعداد زوجی یاخته بسپت، N ، با ثابت شبکه a بنا شده است، در نظر می‌گیریم. برای شمارش حالتها، شرایط مرزی دوره‌ای را برای طول بلور روی توابع موج اعمال می‌کنیم. مقادیر مجاز بردار موج k الکترون در منطقه اول بریلوئن با رابطه (۲) داده می‌شوند:

$$k = 0; \pm \frac{2\pi}{L}; \pm \frac{4\pi}{L}; \dots; \pm \frac{N\pi}{L} \quad (53)$$

رشته را در $\pi/a = N\pi/L$ قطع می‌کنیم، زیرا این نقطه مرز منطقه است. نقطه $-N\pi/L = -\pi/a$ را نباید به منزله یک نقطه مستقل به حساب آورد، زیرا این نقطه با بردار شبکه وارون به π/a مربوط می‌شود. تعداد کل نقاط درست برابر N ، یعنی تعداد یاخته‌های بسپت، است.

هر یاخته بسپت دقیقاً به اندازه مقدار مستقل k در هر نوار انرژی سهم دارد. این نتیجه را می‌توان به حالت سه بعدی نیز تعمیم داد. با در نظر گرفتن دو سمتگیری مستقل اسپین الکترون، $2N$ اوربیتال مستقل در هر نوار انرژی وجود دارد. اگر در هر یاخته بسپت یک اتم یک ظرفیتی وجود داشته باشد، نوار می‌تواند تا نیمه با الکترونها پر شود. در صورتی که هر اتم دو الکترون ظرفیتی خود را در نوار شرکت دهد، نوار می‌تواند کاملاً پر شود. همچنین اگر در هر یاخته بسپت دو اتم یک ظرفیتی وجود داشته باشند، نوار می‌تواند کاملاً پر شود.

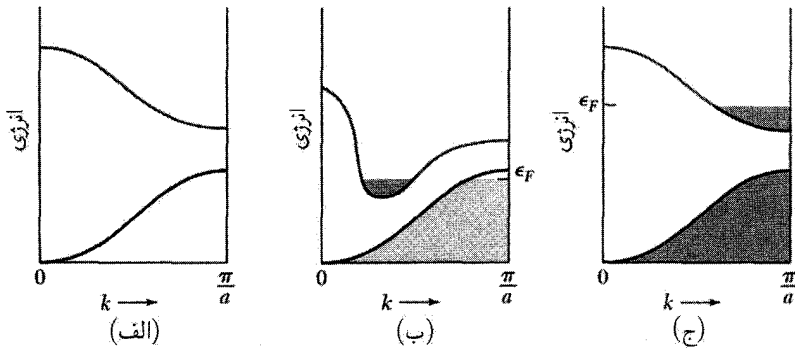


شکل ۱۰. نسبت ضرایب معادله $\psi(x) = C(k) \exp(ikx) + C(k - G) \exp[i(k - G)x]$ که در نزدیکی مرز منطقه اول بریلوفن محاسبه شده است. هنگامی که از مرز دور می‌شویم یکی از مؤلفه‌ها غلبه پیدا می‌کند.

فلزات و عایقها

اگر الکترونیهای ظرفیتی یک یا چند نوار را کاملاً پر کنند و نوارهای دیگر خالی بمانند، بلور عایق خواهد بود. میدان الکتریکی خارجی جریانی در عایق ایجاد نمی‌کند. (فرض می‌کنیم میدان الکتریکی آن قدر قوی نباشد که ساختار الکترونی را مختل کند.) به شرط آنکه یک نوار پر به اندازه یک گاف انرژی از نوار بعدی فاصله داشته باشد، اگر همه حالت‌های موجود پر باشند، هیچ راه پیوسته‌ای برای تغییر تکانه کل الکترونها وجود ندارد. با اعمال میدان هیچ چیز تغییر نمی‌کند. این حالت کاملاً با وضعیت الکترونیهای آزاد، که برای آنها k در میدان به‌طور یکنواخت زیاد می‌شود، مغایر است (فصل ۶).

بلور فقط در صورتی امکان دارد عایق باشد که تعداد الکترونیهای ظرفیتی در ریخته بسط بلور عدد درست زوجی باشد. (بعضی اوقات در مورد الکترونیهای واقع در پوسته‌های درونی، که به‌طور محکم مقیدند و نظریه نواری را نمی‌توان در مورد آنها به‌کار برد، باید استثنا قائل شد.) اگر تعداد الکترونیهای ظرفیتی به‌ازای هر ریخته بسط بلور زوج باشد، لازم است بررسی کنیم که آیا نوارهای انرژی همپوشانی دارند یا نه. اگر نوارها همپوشانی داشته باشند، به‌جای داشتن نوار پر، که عایق می‌دهد، می‌توانیم دو نوار نیمه‌پر داشته باشیم، که فلز می‌دهد (شکل ۱۱).



شکل ۱۱. حالت‌های اشغال شده و ساختارهای نواری برای (الف) عایق، (ب) فلز یا نیمه‌فلز، به دلیل همپوشانی نوارها، و (ج) فلز به دلیل غلظت الکترونها. در (ب) لازم نیست همپوشانی در یک جهت منطقه بریلوئن رخ دهد. اگر همپوشانی کوچک و برای تعداد کمی از حالتها باشد، از نیمه‌فلز سخن می‌گوییم.

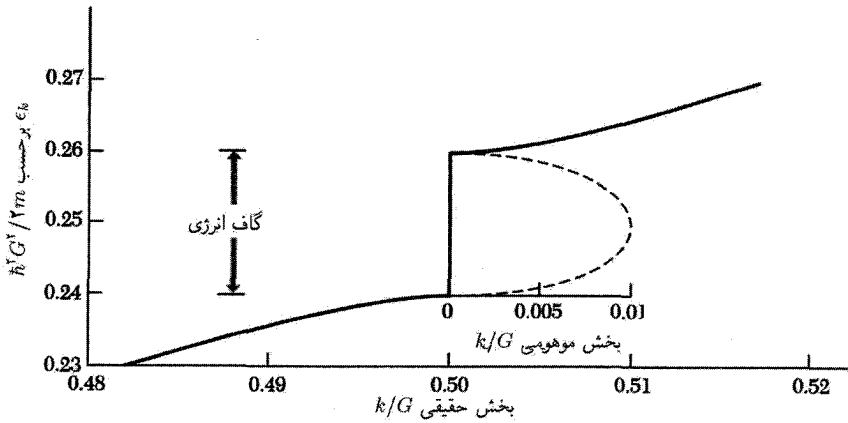
فلزات قلیایی و فلزات نجیب به‌ازای هر یاخته بسط یک الکترون ظرفیتی دارند، در نتیجه باید فلز باشند. فلزات قلیایی خاکی به‌ازای هر یاخته بسط دو الکترون ظرفیتی دارند، این فلزات امکان داشت عایق باشند، ولی نوارهای انرژی آنها همپوشانی دارند و فلزات نه چندان خوبی را ارائه می‌دهند. الماس، سیلیسیم، و ژرمانیم هر یک دو اتم چهار ظرفیتی در نتیجه هشت الکترون ظرفیتی به‌ازای هر یاخته بسط دارند؛ نوارها همپوشانی ندارند و بلورهای خالص آنها در صفر مطلق عایق‌اند.

چکیده

- پاسخهای معادله موج در یک شبکه دوره‌ای به شکل توابع بلوخ، یعنی $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ است، که در آن $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ در اثر انتقال شبکه بلور ناورداست.
- ناحیه‌هایی از انرژی وجود دارند که در آنها هیچ پاسخی به شکل تابع بلوخ برای معادله موج وجود ندارد (مسئله ۵). این انرژیها نواحی ممنوع را تشکیل می‌دهند که در آنها توابع موج در فضا میرا هستند، و همان‌گونه که در شکل ۱۲ نشان داده شده است، مقادیر \mathbf{k} مختلط‌اند. وجود عایقها از وجود نواحی ممنوع انرژی ناشی می‌شود.
- نوارهای انرژی را اغلب می‌توان به‌گونه تقریبی با یک یا دو موج تخت بیان کرد: برای مثال در نزدیکی مرز منطقه در $\frac{1}{4}G$ داریم،

$$\psi_{\mathbf{k}}(x) \cong C(k)e^{ikx} + C(k-G)e^{i(k-G)x}$$

تعداد اوربیتالها در نوار برابر است با $2N$ ، که N تعداد یاخته‌های بسط در نمونه است.



شکل ۱۲. در گاف انرژی، پاسخهایی برای معادله موج به ازای مقادیر مختلط بردار موج وجود دارند. در مرز منطقه اول بخش حقیقی بردار موج برابر $\frac{1}{2}G$ است. بخش موهومی k در گاف در تقریب دو موج، تخت برای $E_k = \frac{\hbar^2 G^2}{2m} \approx 0.25$ رسم شده است. در بلور نامتناهی بی کران بردار موج باید حقیقتی باشد، وگرنه دامنه بدون محدودیت افزایش خواهد یافت. ولی امکان دارد روی سطح یا در پیوندگاه پاسخهایی با بردار موج مختلط وجود داشته باشند.

مسائل

۱. شبکه مربعی، انرژیهای الکترون آزاد. (الف) نشان دهید که برای شبکه مربعی ساده (دوبعدی) انرژی جنبشی الکترون آزاد در یک گوشه منطقه اول بالاتر از انرژی الکترون در نقطه وسط یک ضلع جانبی منطقه است. (ب) این نسبت برای شبکه مکعبی ساده (سه بعدی) چقدر است؟ (ج) نتیجه (ب) چه تأثیری روی رسانندگی فلزات دوظرفیتی می تواند داشته باشد؟

۲. انرژیهای الکترون آزاد در منطقه تحویل یافته. نوارهای انرژی الکترون آزاد را برای شبکه بلوری fcc در تقریب شبکه خالی، ولی در نمایش منطقه ای تحویل یافته که در آن تمام k ها به منطقه اول بریلوئن انتقال می یابند، در نظر بگیرید انرژی همه نوارها را در جهت $[111]$ تا شش برابر انرژی پایینترین نوار در مرز منطقه، در $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ $k = (2\pi/a)$ ، به طور تقریبی رسم کنید. این انرژی را واحد انرژی فرض کنید. این مسئله نشان می دهد که چرا لازم نیست لبه های نوار الزاماً در مرکز منطقه قرار گیرند. وقتی پتانسیل بلور به حساب آید، تعدادی از واگنیها (تقاطع نوارها) برطرف می شود.

۳. مدل کرونیگ-پنی. (الف) انرژی پایینترین نوار انرژی را در $k = 0$ برای پتانسیل تابع به ازای $P \ll 1$ پیدا کنید. (ب) برای همین مسئله گاف نواری را در $k = \pi/a$ بیابید.

۴. انرژی پتانسیل در ساختار الماسی. (الف) نشان دهید که در ساختار الماسی مؤلفه فوریه U_G

پتانسیل بلورینی که یک الکترون مواجه می‌شود، به‌ازای $\mathbf{G} = 2\mathbf{A}$ ، برابر صفر است که در آن \mathbf{A} بردار پایه شبکه وارون نسبت به یاخته مکعبی قراردادی است. (ب) نشان دهید که در تقریب معمولی مرتبه اول برای پاسخهای معادله موج در شبکه دوره‌ای، گاف انرژی در صفحه مرز منطقه‌ای که بر انتهای بردار \mathbf{A} عمود است صفر می‌شود.

*۵. بردارهای موج مختلط واقع در گاف انرژی. عبارتی برای بخش موهومی بردار موج واقع در گاف انرژی در مرز منطقه اول بریلوئن، با تقریبی که به معادله (۴۶) منجر شد، پیدا کنید. نتیجه مربوط به $\text{Im}(k)$ را در مرکزگاف انرژی تعیین کنید و نشان دهید برای مقادیر کوچک $\text{Im}(k)$ این نتیجه به صورت زیر درمی‌آید.

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) [\text{Im}(k)]^2 \approx \frac{2mU^2}{\hbar^2 G^2}$$

این نتیجه، که در شکل ۱۲ نشان داده شده، در نظریه تونل‌زنی زبر از یک نوار به نوار دیگر در حضور میدان الکتریکی قوی از اهمیت برخوردار است.

۶. شبکه مربعی. یک شبکه مربعی را در دو بعد با پتانسیل بلور

$$U(x, y) = -4U \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{a}\right)$$

در نظر بگیرید. با به کار بردن معادله اصلی، گاف انرژی را در گوشه $(\pi/a, \pi/a)$ منطقه بریلوئن به‌طور تقریبی پیدا کنید. برای این منظور، حل معادله دترمینانی 2×2 کفایت می‌کند.

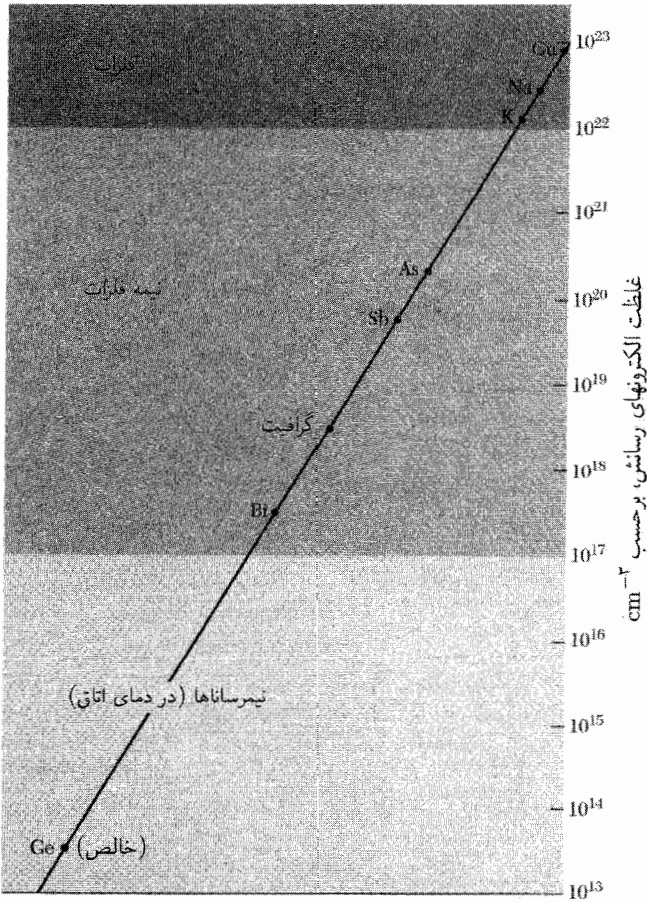


بلورهای نیمرسانا

غلظت حاملهای فلزات، نیمه فلزات و نیمرساناها در شکل ۱ نشان داده شده‌اند. نیمرساناها عموماً با مقاومت ویژه‌شان در دمای اتاق طبقه‌بندی می‌شوند، با مقادیری در گستره 10^{-2} تا $10^9 \text{ohm} \cdot \text{cm}$ ، و قویاً به دما بستگی دارند. اگر به گونه دلخواه عایق را چنان تعریف کنیم که دارای مقاومت ویژه بالاتر از $10^{14} \text{ohm} \cdot \text{cm}$ باشد، در صفر مطلق بلور خالص کامل اکثر نیمرساناها عایق خواهد بود.

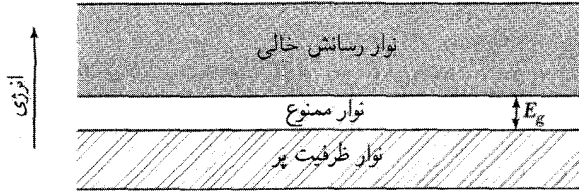
قطعاتی که براساس نیمرساناها کار می‌کنند، ترانزیستورها، کلیدها، دیودها، سلولهای فوتوولتایی، آشکارسازها، و ترمیستورها را شامل می‌شوند. اینها ممکن است به منزله عناصر تک‌مداری یا به گونه مؤلفه‌های مدارهای مجتمع به‌کار روند. در این فصل در مورد خواص فیزیکی عمده بلورهای نیمرسانا، به‌ویژه سیلیسیم، ژرمانیم، و گالیم آرسنید بحث خواهیم کرد.

بعضی از واژه‌ها و اصطلاحات مفید: نیمرساناهای مرکب با فرمول شیمیایی AB ، که در آن A یک عنصر سه‌ظرفیتی و B عنصری پنج‌ظرفیتی است، را ترکیبات III-V (سه-پنج) می‌نامند. مثالهایی از این نوع ترکیبات عبارت‌اند از ایندیم آنتیمونید و گالیم آرسنید. هرگاه A دوظرفیتی و B شش‌ظرفیتی باشد،

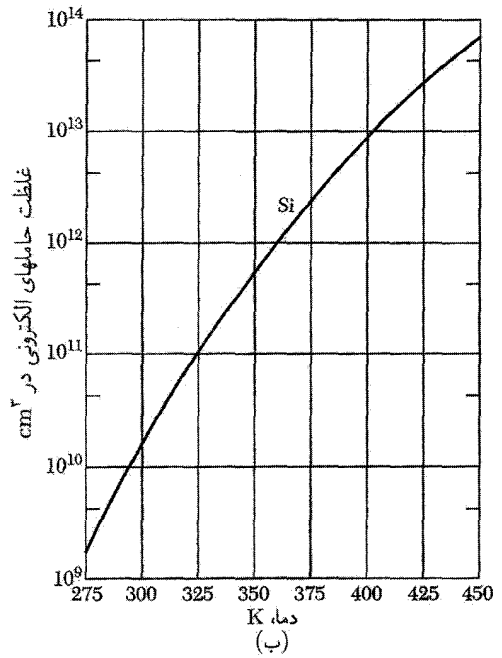
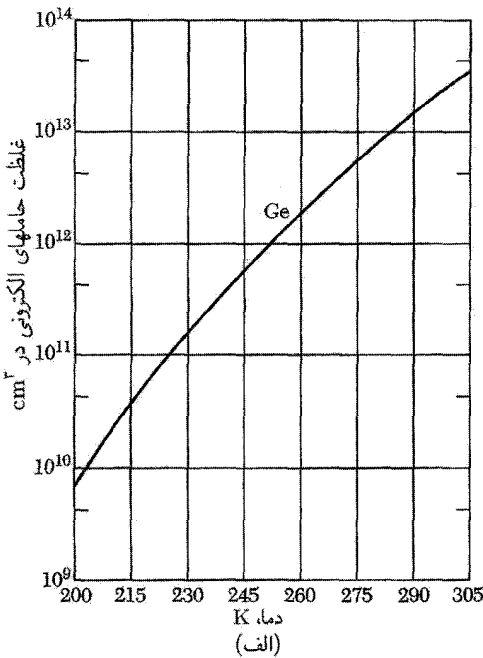


شکل ۱. غلظت‌های حاملها برای فلزات، نیمه‌فلزات، و نیمرساناها. گستره نیمرسانایی را می‌توان، با افزایش غلظت ناخالصی، به طرف بالا توسعه داد و این گستره را می‌توان به طرف پایین توسعه داد تا سرانجام با گستره عایقی به هم پیوندند. ترکیب را یک ترکیب II-VI می‌نامند. مثالهایی از این نوع ترکیب عبارت‌اند از روی سولفید و کادمیم سولفید. گاهی سیلیسیم و ژرمانیم را نیمرساناهای نوع الماس می‌نامند، زیرا دارای ساختار بلوری الماس‌اند. خود الماس بیشتر عایق است تا نیمرسانا. سیلیسیم کربید SiC ترکیب IV-IV است.

نیمرسانای بسیار خالص از خود رسانندگی ذاتی نشان می‌دهد که از رسانندگی ناخالصی در نمونه‌های با خلوص کمتر متمایز است. در گستره دمایی ذاتی ویژگیهای الکتریکی نیمرسانا در اثر ناخالصیهای بلور اساساً تغییر نمی‌کنند. طرح نواری الکترونی که به رسانندگی ذاتی منجر می‌شود، در شکل ۲ نشان داده شده است. نوار رسانش در صفر مطلق خالی است و به اندازه گاف انرژی E_g از نوار ظرفیت پر فاصله دارد. گاف نواری اختلاف انرژی بین پایتترین نقطه نوار رسانش و بالاترین نقطه نوار ظرفیت است. پایینترین



شکل ۲. طرح نواری برای رسانندگی ذاتی در نیمرسانا. در 0K رسانندگی صفر است، زیرا همه حالت‌های نواری ظرفیت پر و همه حالت‌های نواری رسانش خالی‌اند. با افزایش دما الکترون‌ها به‌طور گرمایی از نواری ظرفیت به نواری رسانش برانگیخته و در آنها متحرک می‌شوند. چنین حاملهایی را «ذاتی» می‌نامند.



شکل ۳. غلظت الکترون‌های ذاتی به‌صورت تابعی از دما برای (الف) ژرمانیم و (ب) سیلیسیم. در شرایط ذاتی، غلظت حفره‌ها با غلظت الکترون‌ها برابر است. در یک دمای مفروض غلظت ذاتی در Ge بیشتر از Si است، زیرا گاف انرژی در Ge (0.66eV) باریک‌تر از Si (1.1eV) است.

نقطه نواری رسانش را لبه نواری رسانش می‌نامند؛ بالاترین نقطه در نواری ظرفیت به لبه نواری ظرفیت موسوم است. با افزایش دما، الکترون‌ها به‌گونه گرمایی از نواری ظرفیت به نواری رسانش برانگیخته می‌شوند (شکل ۳). هم الکترون‌های نواری رسانش و هم اوربیتال‌های خالی یا حفره‌های به‌جامانده در نواری ظرفیت در رسانندگی الکتریکی شرکت می‌کنند.

گاف نواری

رسانندگی ذاتی و غلظت حاملهای ذاتی عمدتاً با $E_g/k_B T$ ، یعنی نسبت گاف نواری به دما، کنترل می‌شوند. وقتی این نسبت بزرگ باشد، غلظت حاملهای ذاتی و در نتیجه رسانندگی پایین خواهد بود. گافهای نواری نیمرسانای نوعی در جدول ۱ داده شده‌اند. بهترین مقادیرگاف نواری از طریق جذب اپتیکی به دست می‌آیند. در فرایند جذب مستقیم آستانه جذب اپتیکی پیوسته در بسامد ω_g ، گاف نواری $E_g = \hbar\omega_g$ در شکلهای ۴ (الف) و ۵ (الف) را تعیین می‌کند. با ایجاد یک الکترون و یک حفره، بلوریک فوتون جذب می‌کند. در فرایند جذب غیرمستقیم در شکلهای ۴ (ب) و ۵ (ب) کمینه گاف انرژی ساختار نواری مربوط به الکترونها و حفره‌هایی است که به اندازه بردار موج قابل ملاحظه k_c از یکدیگر فاصله دارند. در این حالت یک گذار فوتونی مستقیم با انرژی گاف کمینه نمی‌تواند لازم پایستگی بردار موج را برآورده کند، زیرا بردارهای موج فوتون در گستره انرژی موردنظر چشم پوشیدنی‌اند. ولی اگر فوتونی با طول موج K و بسامد Ω در این فرایند ایجاد شود، همان‌طور که قوانین پایستگی ایجاد می‌کنند، می‌توانیم داشته باشیم

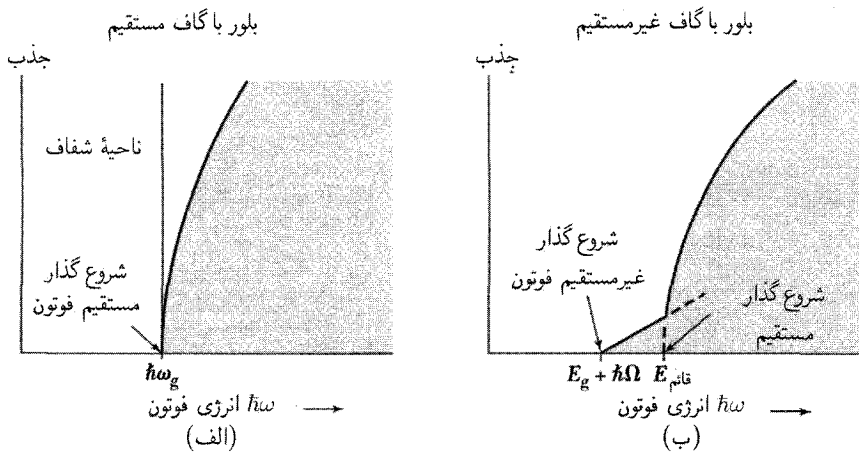
$$k(\text{فوتون}) = k_c + K \cong 0; \quad \hbar\omega = E_g + \hbar\Omega$$

انرژی فوتون، $\hbar\Omega$ ، عموماً خیلی کوچکتر از E_g است: از آنجا که اصولاً انرژی فوتونها، در مقایسه با گاف انرژی، کوچک است (تقریباً برابر 10^1 تا 10^3 eV) حتی یک فوتون با بردار موج بالا، چشمه‌ای است که

جدول ۱. گاف انرژی بین نوارهای رسانش و ظرفیت (گاف مستقیم d ؛ گاف غیرمستقیم i)

E_g, eV		گاف	بلور	E_g, eV		گاف	بلور
300K	0K			300K	0K		
—	۳٫۰	<i>i</i>	SiC(hex)	۵٫۴	<i>i</i>	الماس	
—	۰٫۳۳	<i>d</i>	Te	۱٫۱۱	۱٫۱۷	<i>i</i>	Si
—	—۰٫۳۰	<i>d</i>	HgTe*	۰٫۶۶	۰٫۷۴۴	<i>i</i>	Ge
۰٫۳۴-۰٫۳۷	۰٫۲۸۶	<i>d</i>	PbS	۰٫۰۰	۰٫۰۰	<i>d</i>	α Sn
۰٫۲۷	۰٫۱۶۵	<i>i</i>	PbSe	۰٫۱۷	۰٫۲۳	<i>d</i>	InSb
۰٫۲۹	۰٫۱۹۰	<i>i</i>	PbTe	۰٫۳۶	۰٫۴۳	<i>d</i>	InAs
۲٫۴۲	۲٫۵۸۲	<i>d</i>	CdS	۱٫۲۷	۱٫۴۲	<i>d</i>	InP
۱٫۷۴	۱٫۸۴۰	<i>d</i>	CdSe	۲٫۲۵	۲٫۳۲	<i>i</i>	GaP
۱٫۴۴	۱٫۶۰۷	<i>d</i>	CdTe	۱٫۴۳	۱٫۵۲	<i>d</i>	GaAs
۰٫۱۸	۰٫۳	<i>d</i>	SnTe	۰٫۶۸	۰٫۸۱	<i>d</i>	GaSb
—	۲٫۱۷۲	<i>d</i>	Cu ₂ O	۱٫۶	۱٫۶۵	<i>i</i>	AlSb

* HgTe نیمه‌فلز است؛ نوارها همپوشانی دارند.

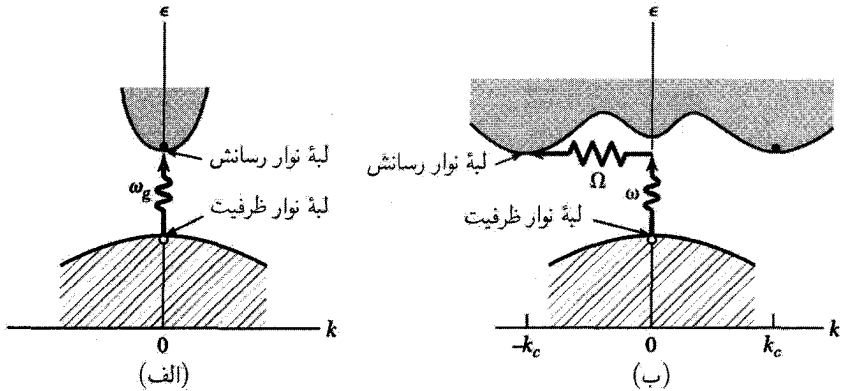


شکل ۴. جذب اپتیکی در عایقهای خالص در صفر مطلق. در (الف) آستانه، گاف انرژی را به صورت $E_g = \hbar\omega_g$ تعیین می‌کند. در (ب) جذب اپتیکی در نزدیکی آستانه ضعیفتر است: در $\hbar\omega = E_g + \hbar\Omega$ یک فوتون جذب می‌شود و سه ذره، یعنی یک الکترون آزاد، یک حفره آزاد، و یک فوتون با انرژی $\hbar\Omega$ ، ایجاد می‌شوند. در (ب) انرژی $E_{فتم}$ آستانه را برای ایجاد یک الکترون آزاد و یک حفره آزاد مشخص می‌کند، در این واکنش هیچ فوتونی درگیر نیست. چنین گذاری را قائم می‌نامند؛ این گذار شبیه‌گذار مستقیم در (الف) است. این نمودارها خطوط جذبی‌ای که گاهی درست در پایین آستانه قرار می‌گیرند، نشان نمی‌دهند. چنین خطوطی از ایجاد یک زوج الکترون-حفره مقید، که اکسیژن نام دارد، ناشی می‌شوند.

برای تکانه بلور به آسانی در دسترس است. هرگاه دما آن قدر بالا باشد که فوتون مورد نیاز قبلاً به‌طور گرمایی در بلور برانگیخته شده باشد، ممکن است یک فرایند جذب فوتون که در آن فوتون جذب شود نیز داشته باشیم. گاف نواری را می‌توان از بستگی رسانندگی به دما یا از بستگی غلظت حاملهای بار به دما در گستره ذاتی نیز نتیجه گرفت. غلظت حاملها از اندازه‌گیریهای ولتاژ هال (فصل ۶) به دست می‌آید که گاهی با اندازه‌گیریهای رسانندگی تکمیل می‌شود. اندازه‌گیریهای اپتیکی تعیین می‌کنند که آیا گاف مستقیم است یا غیرمستقیم. لبه‌های نوار در Ge و Si با گذارهای غیرمستقیم به هم مربوط می‌شوند؛ لبه‌های نوار در InSb و GaAs با گذار مستقیم به هم مربوط می‌شوند (شکل ۶). گاف در αSn مستقیم و دقیقاً برابر صفر است؛ HgTe و HgSe نیمه‌فلزند و گاف منفی دارند — نوارهای رسانش و ظرفیت همپوشانی دارند.

معادلات حرکت

معادله حرکت الکترون را در نوار انرژی به دست می‌آوریم. به حرکت یک بسته‌موج در میدان الکتریکی اعمال شده می‌نگریم. فرض می‌کنیم این بسته‌موج از توابع موج نزدیک به بردار موج خاص k ساخته شده باشد. سرعت گروه عبارت است از $v_g = d\omega/dk$. بسامد مربوط به یک تابع موج با انرژی ϵ به صورت



شکل ۵. در (الف) پایینترین نقطه نوار رسانش و بالاترین نقطه نوار ظرفیت به ازای یک مقدار k رخ می‌دهند. یک گذار اپتیکی مستقیم بدون هیچ‌گونه تغییر مهمی در k به‌طور قائم ترسیم شده است، زیرا بردار موج فونون جذب‌شده بسیار کوچک است. بسامد آستانه ω_g مربوط به جذب از طریق گذار مستقیم، گاف انرژی $E_g = \hbar\omega_g$ را تعیین می‌کند. گذار غیرمستقیم در (ب) هم یک فوتون و هم یک فونون را دربر دارد، زیرا لبه نوارهای رسانش و ظرفیت در فضای k از یکدیگر فاصله زیادی دارند. انرژی آستانه برای فرایند غیرمستقیم در (ب) از گاف نواری واقعی بزرگتر است. آستانه جذب برای گذار غیرمستقیم بین لبه‌های نواری در $\hbar\omega = E_g + \hbar\Omega$ رخ می‌دهد، که در آن Ω بسامد فونون گسیل‌یافته با بردار موج $K \cong -k_g$ است. در دمای بالاتر فونونها از قبل حضور دارند؛ اگر فونون همراه با یک فوتون جذب شود، انرژی آستانه برابر $\hbar\omega = E_g - \hbar\Omega$ خواهد بود. توجه: این شکل فقط گذارهای آستانه‌ای را نشان می‌دهد. گذارها عموماً بین همه نقاطی از دو نوار رخ می‌دهد که برای آنها بردار موجها و انرژی ممکن است پایسته باشد.

$\omega = \epsilon/\hbar$ است، و در نتیجه

$$v = \hbar^{-1} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) \quad \text{یا} \quad v_g = \hbar^{-1} d\epsilon/dk \quad (1)$$

آثار بلوری روی حرکت الکترون در رابطه پاشیدگی $\epsilon(\mathbf{k})$ نهفته است.

کار $\delta\epsilon$ که میدان الکتریکی E روی الکترون در بازه δt انجام می‌دهد، برابر است با

$$\delta\epsilon = -eE v_g \delta t \quad (2)$$

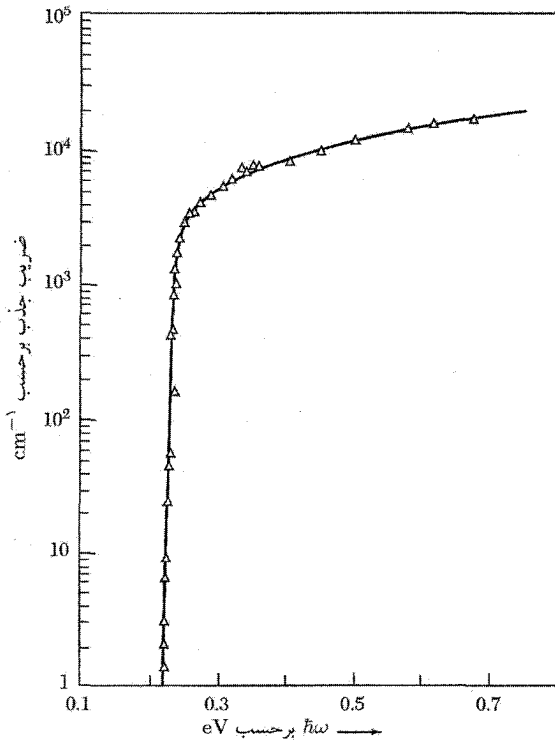
مشاهده می‌کنیم که با استفاده از رابطه (۱) خواهیم داشت

$$\delta\epsilon = (d\epsilon/dk) \delta k = \hbar v_g \delta k \quad (3)$$

از مقایسه رابطه (۲) با (۳) داریم

$$\delta k = -(eE/\hbar) \delta t \quad (4)$$

که از آنجا $\hbar dk/dt = -eE$



شکل ۶. جذب اپتیکی در ایندیم آنتیمونید، InSb. این گذار مستقیم است، زیرا لبه نوارهای ظرفیت و رسانش هر دو در مرکز منطقه بریلوئن، $k = 0$ ، قرار دارند. به آستانه نیز توجه کنید.

می‌توان (۴) را برحسب نیروی خارجی \mathbf{F} چنین نوشت

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dr} = \mathbf{F} \quad (5)$$

این یک رابطه مهم است: در بلور $\hbar d\mathbf{k}/dt$ برابر با نیروی خارجی وارد بر الکترون است. در فضای آزاد $d(m\mathbf{v})/dt$ برابر با این نیرو است. در اینجا قانون دوم حرکت نیوتون نقض نشده است: الکترون در بلور تحت اثر نیروهای ناشی از شبکه بلور و همچنین نیروهای مربوط به چشمه‌های خارجی قرار می‌گیرد. جمله نیرو در رابطه (۵) میدان الکتریکی و نیروی لورنتس وارد بر الکترون را در میدان مغناطیسی نیز تحت شرایط عادی، یعنی در شرایطی که میدان مغناطیسی آن قدر قوی نباشد که ساختار نواری فروریزد، شامل می‌شود. بنابراین معادله حرکت الکترونی با سرعت گروه \mathbf{v} در میدان مغناطیسی ثابت \mathbf{B} عبارت است از

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}; \quad (\text{CGS}) \quad \boxed{\text{(SI)} \quad \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B}} \quad (6)$$

که طرف راست آن نیروی لورنتس وارد بر الکترون است. با استفاده از رابطه $\mathbf{v} = \hbar^{-1} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon$ برای سرعت گروه، آهنگ تغییر بردار موج چنین است:

$$\text{(CGS)} \quad \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{e}{\hbar^2 c} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon \times \mathbf{B}; \quad \boxed{\text{(SI)} \quad \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{e}{\hbar^2} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon \times \mathbf{B}} \quad (7)$$

که در اینجا هر دو طرف معادله در مختصات فضای \mathbf{k} نوشته شده‌اند. از حاصلضرب برداری رابطه (۷) در می‌یابیم که الکترون در میدان مغناطیسی در فضای \mathbf{k} در جهت عمود بر جهت شیب انرژی ϵ حرکت می‌کند، در نتیجه الکترون روی سطحی با انرژی ثابت حرکت می‌کند. مقدار تصویر \mathbf{k} روی \mathbf{B} طی حرکت ثابت می‌ماند. حرکت در فضای \mathbf{k} بر روی صفحه‌ای عمود بر جهت \mathbf{B} انجام می‌شود و مدار را مقطع این صفحه با یک سطح انرژی ثابت تعریف می‌کند.

به دست آوردن فیزیکی $\hbar \mathbf{k} = \mathbf{F}$

ویژه تابع بلوخ، $\psi_{\mathbf{k}}$ ، مربوط به ویژه مقدار انرژی $\epsilon_{\mathbf{k}}$ و بردار موج \mathbf{k} را در نظر می‌گیریم:

$$\psi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{G}} C(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \exp[i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}] \quad (8)$$

مقدار مورد انتظار تکانه الکترون در حالت بلوخ \mathbf{k} با استفاده از $\sum |C(\mathbf{k} + \mathbf{G})|^2 = 1$ عبارت است از

$$\mathbf{P}_{el} = \langle \mathbf{k} | -i\hbar \nabla | \mathbf{k} \rangle = \sum_{\mathbf{G}} \hbar(\mathbf{k} + \mathbf{G}) |C(\mathbf{k} + \mathbf{G})|^2 = \hbar(\mathbf{k} + \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{G} |C(\mathbf{k} + \mathbf{G})|^2) \quad (9)$$

انتقال تکانه بین الکترون و شبکه را به هنگام تغییر حالت الکترون از \mathbf{k} به $\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}$ در اثر اعمال نیروی خارجی بررسی می‌کنیم. بلور عایقی را تصویر می‌کنیم که به استثنای تک الکترونی در حالت \mathbf{k} از نواری که فقط شامل این الکترون است به گونه الکتروستاتیکی خنثی باشد.

فرض می‌کنیم نیروی خارجی ضعیف در یک بازه زمانی طوری اعمال شود که ضربه کل وارد شده به تمام دستگاه بلور برابر $\mathbf{J} = \int \mathbf{F} dt$ باشد. اگر این الکترون رسانش آزاد بود ($m^* = m$)، تکانه کلی که ضربه به دستگاه بلور می‌داد به صورت تغییر تکانه الکترون رسانش پدیدار می‌شد:

$$\mathbf{J} = \Delta \mathbf{p}_{کل} = \Delta \mathbf{p}_{el} = \hbar \Delta \mathbf{k} \quad (10)$$

بلور خنثی هیچ برهم‌کنش خالصی، خواه به طور مستقیم و خواه به طور غیرمستقیم از طریق الکترون آزاد، با میدان الکتریکی ندارد.

اگر الکترون رسانش با پتانسیل دوره‌ای شبکه بلور برهم‌کنش کند، باید داشته باشیم

$$\mathbf{J} = \Delta \mathbf{p}_{کل} = \Delta \mathbf{p}_{شبكة} + \Delta \mathbf{p}_{el} \quad (11)$$

با استفاده از نتیجه (۹) مربوط به \mathbf{p}_{el} داریم

$$\Delta \mathbf{p}_{el} = \hbar \Delta \mathbf{k} + \sum_{\mathbf{G}} \hbar \mathbf{G} [(\nabla_{\mathbf{k}} |C(\mathbf{k} + \mathbf{G})|^2) \cdot \Delta \mathbf{k}] \quad (12)$$

تغییر شبکه $\Delta \mathbf{p}$ در تکانه شبکه را، که از تغییر حالت الکترون ناشی می‌شود، می‌توان با بررسی فیزیکی مقدماتی به دست آورد. الکترونی که شبکه بازتاب می‌دهد به آن تکانه منتقل می‌کند. اگر الکترون فرودی، که دارای مؤلفه موج تختی با تکانه $\hbar \mathbf{k}$ است، با تکانه‌ای برابر $\hbar(\mathbf{k} + \mathbf{G})$ بازتاب یابد، همان‌طوری که پابستگی تکانه ایجاد می‌کند، شبکه تکانه $-\hbar \mathbf{G}$ به دست می‌آورد. وقتی حالت $\psi_{\mathbf{k}}$ به حالت $\psi_{\mathbf{k}+\Delta \mathbf{k}}$ تبدیل شود، انتقال تکانه به شبکه برابر است با

$$\Delta \mathbf{p}_{شبكة} = -\hbar \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{G} [(\nabla_{\mathbf{k}} |C(\mathbf{k} + \mathbf{G})|^2) \cdot \Delta \mathbf{k}] \quad (13)$$

زیرا، در حین تغییر حالت $\Delta \mathbf{k}$ ، بخشی برابر

$$\nabla_{\mathbf{k}} |C(\mathbf{k} + \mathbf{G})|^2 \cdot \Delta \mathbf{k} \quad (14)$$

از تک‌تک مؤلفه‌های حالت اولیه بازتاب می‌یابد.

بنابراین تغییر اندازه حرکت کل برابر است با

$$\Delta \mathbf{p}_{el} + \Delta \mathbf{p}_{شبكة} = \mathbf{J} = \hbar \Delta \mathbf{k} \quad (15)$$

که دقیقاً مانند الکترونهاى آزاد، معادله (۱۰)، است. بنابراین با استفاده از تعریف \mathbf{J} ، داریم

$$\hbar d\mathbf{k}/dt = \mathbf{F} \quad (16)$$

که با روشی متفاوت در رابطه (۵) به دست آمد. به دست آوردن دقیق معادله (۱۶) به روشی کاملاً متفاوت در پیوست ۵ ارائه شده است.

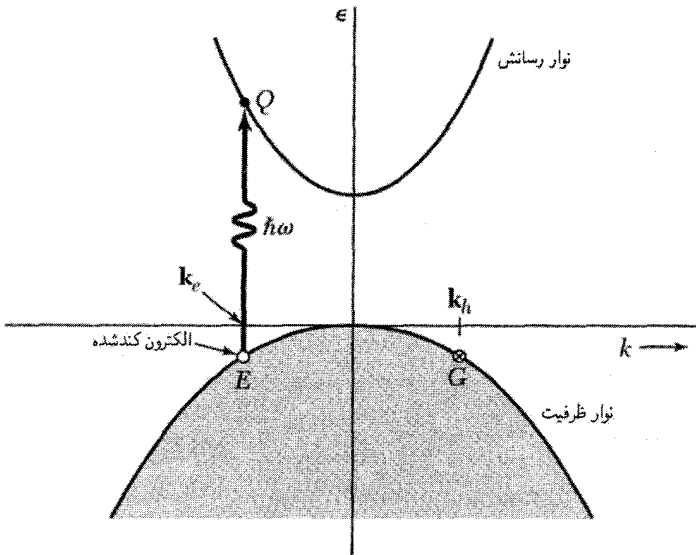
حفره‌ها

ویژگیهای اوربیتالهای خالی در نواری که در نبود این اوربیتالها پر می‌بود، در فیزیک نیمرساناها و در الکترونیک حالت جامد اهمیت دارند. اوربیتال خالی در نوار را عموماً حفره می‌نامند، و بدون حفره‌ها ترانزیستورها وجود نداشتند. حفره در میدانهای الکتریکی و مغناطیسی اعمال شده چنان عمل می‌کند که گویی دارای بار مثبت $+e$ است. دلیل این موضوع در پنج مرحله که متعاقباً درون این مستطیلهای نوشته شده‌اند، شرح داده شده است.

۱.

$$k_h = -k_e \quad (17)$$

بردار موج کل الکترونها در نوار پر صفر است: $\sum k = 0$ که در آن جمع روی تمام حالتها در منطقه بریلون است. این نتیجه از تقارن هندسی منطقه بریلون ناشی می‌شود: هر نوع شبکه بنیادی عمل وارون‌سازی $\Gamma \rightarrow -\Gamma$ حول هر نقطه شبکه دارای تقارن است؛ در نتیجه منطقه بریلون شبکه نیز دارای تقارن وارون‌سازی است. اگر نوار پر باشد همه زوج اوربیتالها k و $-k$ پرو بردار موج کل صفر خواهد بود. اگر اوربیتالی با بردار موج k_e یک الکترون از دست داده باشد، بردار موج کل دستگاه برابر $-k_e$ خواهد بود. این بردار موج به حفره نسبت داده می‌شود. این نتیجه شگفت‌انگیز است: اوربیتال k_e این الکترون را از دست می‌دهد و موقعیت حفره، مانند شکل ۷، معمولاً به‌طور ترسیمی چنان نشان داده می‌شود که گویی در k_e قرار دارد. ولی بردار موج واقعی حفره، k_h ، برابر $-k_e$ است که اگر حفره در E باشد برابر با بردار موج در نقطه G است. بردار موج $-k_e$ از قواعد گزینش برای جذب فوتون پیروی می‌کند.



شکل ۷. جذب فوتونی با انرژی $\hbar\omega$ و بردار موج ناچیز، یک الکترون را از E در نوار ظرفیت پر به Q در نوار رسانش می‌برد. اگر k_e بردار موج الکترون در E باشد، بردار موج الکترون در Q نیز همین مقدار است. بردار موج کل نوار ظرفیت پس از جذب برابر $-k_e$ است، و در صورتی که نوار ظرفیت را به این صورت توصیف کنیم که با یک حفره اشغال شده است، این همان بردار موجی است که باید به حفره نسبت دهیم. بنابراین $k_h = -k_e$ بردار موج حفره همانند بردار موج الکترونی است که در G باقی می‌ماند. برای تمامی دستگاه، بردار موج کل پس از جذب فوتون برابر است با $k_e + k_h = 0$ ، بنابراین بردار موج کل با جذب فوتون و ایجاد یک الکترون و حفره آزاد تغییر نمی‌کند.

حفره توصیف دیگری از نواری است که یک الکترون از دست داده باشد، یا می‌گوییم حفره دارای بردار موج $-k_e$ است یا آنکه نواری که یک الکترون از دست داده باشد دارای بردار موج کل $-k_e$ است.

۲.

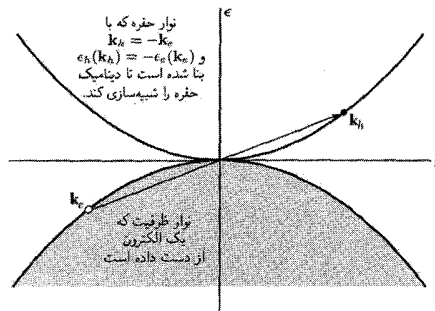
$$\epsilon_h(k_h) = -\epsilon_e(k_e) \quad (18)$$

در اینجا صفر انرژی نوار ظرفیت در قله نوار است. هرچه الکترون از دست داده شده مربوط به قسمت پایینتر نوار باشد، انرژی دستگاه بالاتر خواهد بود. علامت انرژی حفره با علامت انرژی الکترون از دست داده شده مخالف است، زیرا برای کندن الکترون از اوربیتال پایینی باید کار بیشتری انجام داد تا از اوربیتال بالایی. بنابراین اگر نوار متقارن باشد^۱ داریم $\epsilon_e(k_e) = \epsilon_e(-k_e) = -\epsilon_h(-k_e) = -\epsilon_h(k_h)$ برای نمایش ویژگیهای حفره در شکل ۸ یک طرح نواری رسم کرده‌ایم. این نوار حفره نمایش مفیدی است، زیرا رو به بالاست.

۳.

$$v_h = v_e \quad (19)$$

سرعت حفره با سرعت الکترون از دست داده شده برابر است. در شکل ۸ مشاهده می‌کنیم که $v_h(k_h) = v_e(k_e)$ ، بنابراین $\nabla \epsilon_h(k_h) = \nabla \epsilon_e(k_e)$



شکل ۸. نیمه بالایی این شکل نوار حفره‌ای را نشان می‌دهد که رفتار دینامیکی حفره را شبیه‌سازی می‌کند. این نوار از وارون‌سازی نوار ظرفیت نسبت به مبدأ به دست می‌آید. بردار موج و انرژی حفره با بردار موج و انرژی اوربیتال الکترونی خالی در نوار ظرفیت برابر ولی علامت آنها مخالف یکدیگر است. وضعیت الکترون کنده شده از نوار ظرفیت در k_e را نشان نداده‌ایم.

۱. اگر از برهم‌کنش اسپین-مدار چشم‌پوشی شود، نوارها تحت وارون‌سازی $k \rightarrow -k$ همواره متقارن‌اند. حتی با وجود برهم‌کنش اسپین-مدار، در صورتی که در ساختار بلور عمل وارون‌سازی مجاز باشد، نوارها همیشه متقارن خواهند بود. در نبود مرکز تقارن ولی در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار، اگر زیرنوارهایی که جهت اسپین‌شان معکوس می‌شود با هم مقایسه کنیم، نوارها متقارن خواهند بود: $\epsilon(k, \uparrow) = \epsilon(-k, \downarrow)$. فصل ۹ کتاب QTS را ببینید.

۴.

$$m_h = -m_e \quad (۲۰)$$

بعداً نشان می‌دهیم که جرم مؤثر با انحنای $d^2\epsilon/dk^2$ نسبت عکس دارد و این انحنا برای نوار حفرة از نظر علامت مخالف با انحنای مربوط به الکترون در نوار ظرفیت است. در نزدیکی قله نوار ظرفیت m_e منفی است، در نتیجه m_h مثبت است.

۵.

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}_h}{dt} = e(\mathbf{E} + \frac{1}{c}\mathbf{v}_h \times \mathbf{B}) \quad (۲۱)$$

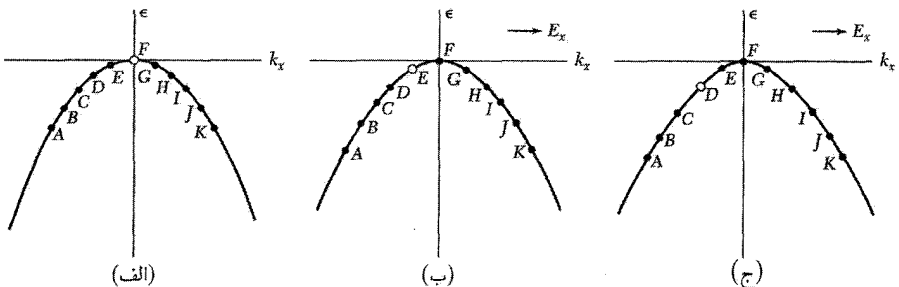
این معادله از معادله حرکت

$$(CGS) \quad \hbar \frac{d\mathbf{k}_e}{dt} = -e(\mathbf{E} + \frac{1}{c}\mathbf{v}_e \times \mathbf{B}) \quad (۲۲)$$

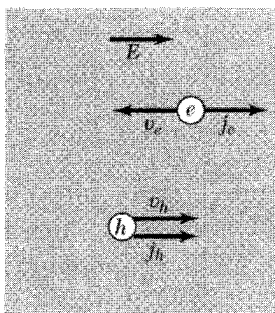
با قراردادن $-\mathbf{k}_h$ به جای \mathbf{k}_e و \mathbf{v}_h به جای \mathbf{v}_e به دست می‌آید، که در مورد الکترون از دست داده شده صادق است. معادله حرکت حفرة مانند معادله حرکت ذره با بار مثبت e است. این بار مثبت با جریان الکتریکی حاصل از نوار ظرفیت، شکل ۹، سازگار است: جریان به وسیله الکترون زوج نشده در اوربیتال G حمل می‌شود:

$$\mathbf{j} = (-e)\mathbf{v}(G) = (-e)[-v(E)] = e\mathbf{v}(E) \quad (۲۳)$$

که دقیقاً جریان بار مثبتی است که با سرعت منسوب به الکترون از دست داده شده در E حرکت می‌کند. این جریان در شکل ۱۰ نشان داده شده است.



شکل ۹. (الف) در $t = 0$ همه حالتها بجز F در قله نوار پر شده‌اند؛ سرعت v_x در F برابر صفر است، زیرا $de/dk_x = 0$. (ب) میدان الکتریکی E_x در جهت $+x$ اعمال شده است. نیروی وارد بر الکترونها در جهت $-k_x$ است و تمام الکترونها به اتفاق گذارهایی را در جهت $-k_x$ انجام می‌دهند و حفرة را به حالت E حرکت می‌دهند. (ج) پس از یک بازه زمانی دیگر الکترونها در فضای k پیشروی می‌کنند و اکنون حفرة در D است.



شکل ۱۰. حرکت الکترونها در نوار رسانش و حفره‌ها در نوار ظرفیت در میدان الکتریکی E . سرعت راش حفره‌ها و الکترونها در جهت‌های مخالف است. ولی جریانهای الکتریکی آنها در یک جهت یعنی در جهت میدان الکتریکی است.

جرم مؤثر

وقتی به رابطه انرژی-بردار موج الکترونهاى آزاد، $\epsilon = (\hbar^2/2m)k^2$ ، بنگریم، مشاهده می‌کنیم که ضریب k^2 انحناى ϵ را برحسب k تعیین می‌کند. با توجه به این رابطه، می‌توان گفت که جرم وارونه $1/m$ انحنا را تعیین می‌کند. همان‌طور که از پاسخهای معادله موج در نزدیکی مرز منطقه در فصل ۷ برمی‌آید، برای الکترونهاى واقع در یک نوار ممکن است ناحیه‌هایی در نزدیکی گاف نواری در مرز منطقه وجود داشته باشند که در آنها انحنا به‌طور غیرعادی زیاد باشد. اگر گاف انرژی در مقایسه با انرژی الکترون آزاد، λ ، در مرز کوچک باشد، انحنا با ضریب λ/E_g افزایش می‌یابد.

در نیمرساناها پهنای نوار، که مانند انرژی الکترون آزاد است، از مرتبه 2eV است، در حالی که گاف نواری از مرتبه 2eV تا 10eV است. بنابراین جرم وارون با ضریبی برابر 10° تا 10° افزایش می‌یابد، و جرم مؤثر به 10° تا 10° جرم الکترون آزاد کاهش می‌یابد. این مقادیر در نزدیکی گاف نواری صادق‌اند؛ وقتی از گاف دور می‌شویم انتظار می‌رود که انحناها و جرمها به انحناها و جرمهای الکترونهاى آزاد نزدیک شوند. در خلاصه‌کردن پاسخهای فصل ۷ برای U مثبت، انرژی الکترون را در نزدیکی لبه پایینی نوار دوم می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\epsilon(K) = \epsilon_c / (\hbar^2 + 2m_e)K^2; \quad m_e/m = 1/[(2\lambda/U) - 1] \quad (24)$$

در اینجا بردار موج K از مرز منطقه اندازه‌گیری شده است، و m_e نمایشگر جرم مؤثر الکترون در نزدیکی لبه نوار دوم است. انرژی الکترون در نزدیکی قله نوار اول برابر است با

$$\epsilon(K) = \epsilon_v - (\hbar^2/2m_h)K^2; \quad m_h/m = 1/[(2\lambda/U) + 1] \quad (25)$$

انحنا و، بنابراین، جرم در نزدیکی قله نوار اول منفی خواهد بود، ولی برای اینکه نماد m_h برای جرم حفره مقدار مثبتی باشد در (۲۵) علامت منها وارد کرده‌ایم—(۲۰) را ببینید.

اگر جرم مؤثر حاملی از جرم الکترون آزاد کوچکتر باشد، نه وزن بلور کمتر می‌شود و نه قانون دوم نیوتون، برای بلور به صورت یک کل، یونها به اضافه حاملها، نقض می‌شود. نکته مهم این است که در میدان الکتریکی یا مغناطیسی الکترون در بتانسیل دوره‌ای نسبت به شبکه چنان شتابدار می‌شود که گویی جرم آن برابر با جرم مؤثری است که اکنون تعریف می‌کنیم.

از نتیجه (۱) در مورد سرعت گروه مشتق می‌گیریم تا رابطه زیر حاصل شود

$$\frac{dv_g}{dt} = \hbar^{-1} \frac{d^2 \epsilon}{dk dt} = \hbar^{-1} \left(\frac{d^2 \epsilon}{dk^2} \frac{dk}{dt} \right) \quad (26)$$

از رابطه (۵) می‌دانیم که $dk/dt = F/\hbar$ ، که از آنجا

$$F = \frac{\hbar^2}{d^2 \epsilon / dk^2} \frac{dv_g}{dt}; \quad \text{یا} \quad \frac{dv_g}{dt} = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \epsilon}{dk^2} \right) F \quad (27)$$

اگر $\hbar^2 / (d^2 \epsilon / dk^2)$ را به صورت جرم بشناسیم، در این صورت رابطه (۲۷) شکل قانون دوم نیوتون را به خود می‌گیرد. جرم مؤثر m^* را با رابطه زیر تعریف می‌کنیم

$$\boxed{\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \epsilon}{dk^2}} \quad (28)$$

این رابطه را می‌توان به آسانی تعمیم داد تا در مورد سطح انرژی ناهمسانگرد الکترون نیز صادق باشد، مانند الکترونهای Si یا Ge. مؤلفه‌های تانسور جرم مؤثر وارون را به صورت زیر تعریف می‌کنیم

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{\mu\nu} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \epsilon_k}{dk_\mu dk_\nu}; \quad \frac{dv_\mu}{dt} = \left(\frac{1}{m^*} \right)_{\mu\nu} F_\nu \quad (29)$$

که در آن μ و ν مختصات دکارتی‌اند.

تعبیر فیزیکی جرم مؤثر

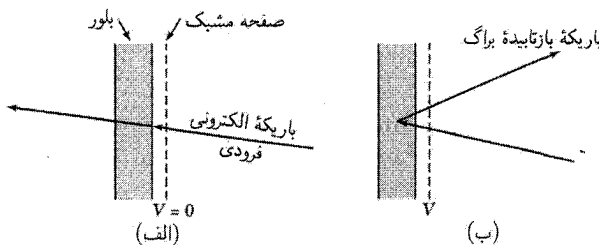
هنگامی که الکترون به جرم m در بلوری قرار داده می‌شود، چگونه ممکن است به میدانهای اعمال شده چنان پاسخ دهد که گویی جرمش m^* است؟ مفید است که درباره فرایند بازتاب براگ امواج الکترونی در شبکه فکر کنیم. تقریب برهم‌کنش ضعیف را، که در فصل ۷ بررسی شد، در نظر بگیرید. در نزدیکی ته نوار پایینی، مدار با موج تخت $\exp(ikx)$ به تکانه $\hbar k$ به طور کاملاً مناسبی نمایش داده می‌شود؛ مؤلفه موج

در این ناحیه $m \simeq m^*$. وقتی k زیاد می‌شود، افزایش مؤلفه بازتابیده $\exp[i(k - G)x]$ نشانگر انتقال تکانه از شبکه به الکترون است.

در نزدیکی مرز، مؤلفه بازتابیده کاملاً بزرگ است؛ در مرز، دامنه این مؤلفه با دامنه رو به جلو برابر می‌شود. در این نقطه ویژه تابعها به جای امواج رونده امواج ایستاده‌اند. در اینجا مؤلفه تکانه $\hbar(-\frac{1}{4}G)$ مؤلفه تکانه $\hbar(\frac{G}{4})$ را حذف می‌کند.

جرم مؤثر تک‌الکترونی در نوار انرژی ممکن است مثبت یا منفی باشد: حالت‌های مربوط به جرم مؤثر مثبت در نزدیکی ته نوار رخ می‌دهد، زیرا جرم مؤثر مثبت بدان معناست که نوار دارای انحناى رو به بالاست. حالت‌های مربوط به جرم مؤثر منفی در نزدیکی قله نوار رخ می‌دهند. منظور از جرم مؤثر منفی آن است که در رفتن از حالت k به حالت $k + \Delta k$ ، انتقال تکانه از الکترون به شبکه از انتقال تکانه از نیروی اعمال‌شده به الکترون بزرگتر است. با اینکه با اعمال میدان الکتريکی k به اندازه Δk افزایش می‌یابد، نزدیک‌شدن به بازتاب براگ می‌تواند در تکانه رو به جلوی الکترون کاهش کلی ایجاد کند؛ اگر این امر رخ دهد، جرم مؤثر منفی خواهد بود (شکل ۱۱).

وقتی در نوار دوم پیش می‌رویم و از مرز دور می‌شویم، دامنه $\exp[i(k - G)x]$ به سرعت کاهش می‌یابد و m^* مقدار مثبت کوچکی را به خود می‌گیرد. در اینجا افزایش سرعت الکترون در اثر یک ضربه خارجی معین بزرگتر از افزایش سرعتی است که الکترون آزاد در اثر این ضربه کسب می‌کند. شبکه این اختلاف را از طریق پس‌زدگی حاصل از کاهش دامنه $\exp[i(k - G)x]$ جبران می‌کند.



شکل ۱۱. توجیه جرم‌های مؤثر منفی که در نزدیکی، ولی زیر مرز منطقه بریلون رخ می‌دهند. در (الف) باریکه الکترونی فرودی روی بلور نازک اندکی کمتر از آن است که بتواند شرط بازتاب براگ را برآورده کند و باریکه از بلور عبور می‌کند. اعمال یک ولتاژ کوچک در دو سر صفحه مشبک، مانند (ب) می‌تواند باعث برآورده شدن شرط براگ شود و آنگاه باریکه الکترونی از مجموعه مناسبی از صفحات بلور بازتابیده خواهد شد.

اگر انرژی در نوار فقط به طور جزئی به k بستگی داشته باشد، وقتی $d^2\epsilon/dk^2$ خیلی کوچک است، جرم مؤثر خیلی بزرگ خواهد بود. یعنی $m^*/m \gg 1$. تقریب بستگی قوی که در فصل ۹ بحث می‌کنیم بینش سریعی در مورد تشکیل نوارهای باریک ارائه می‌دهد. اگر توابع موج متمرکز در اتمهای همسایه خیلی کم همپوشانی داشته باشند، آنگاه انتگرال همپوشانی کم می‌شود؛ لذا پهنای نوار باریک و جرم مؤثر زیاد خواهد بود. همپوشانی توابع موج متمرکز در اتمهای همسایه برای الکترونها درونی یا الکترونها مغزهای یونی کم است. برای مثال الکترونها f فلزات کمیاب خاکی به اندازه بسیار کمی همپوشانی دارند.

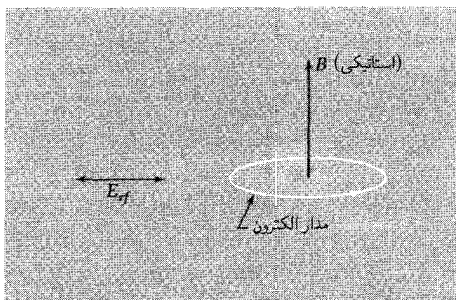
جرمهای مؤثر در نیمرساناها

در بسیاری از نیمرساناها تعیین جرمهای مؤثر حاملها در نوارهای ظرفیت و رسانش در نزدیکی لبه‌های نوار به کمک تشدید سیکلوترونی امکان پذیر بوده است. تعیین سطح انرژی، معادل با تعیین تانسور جرم مؤثر (۲۹) است. تشدید سیکلوترونی در نیمرسانا با تابش امواج سانتیمتری یا میلیمتری در غلظت کم حاملها انجام می‌شود.

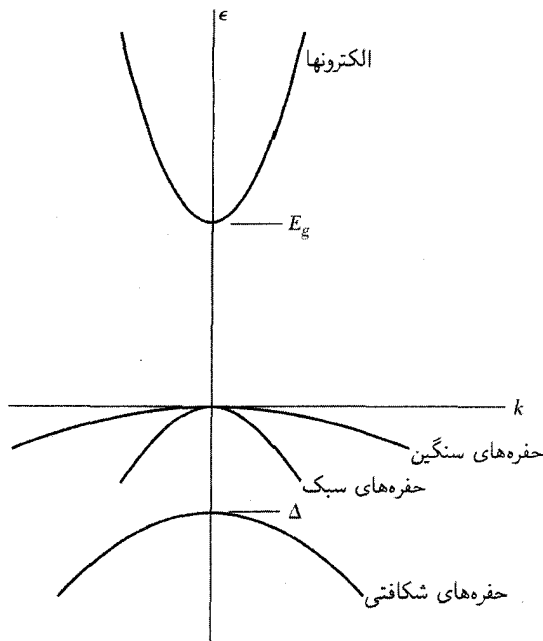
حاملهای جریان در مدارهای مارپیچی حول محور میدان مغناطیسی استاتیکی شتابدار می‌شوند. بسامد دوران زاویه‌ای ω_c برابر است با

$$\text{(CGS)} \quad \omega_c = \frac{eB}{m^*c}, \quad \text{(SI)} \quad \omega_c = \frac{eB}{m^*} \quad (30)$$

که در آن m^* جرم مؤثر سیکلوترونی مناسب است. جذب تشدید انرژی از میدان الکتریکی E_f عمود بر میدان مغناطیسی استاتیکی (شکل ۱۲) هنگامی رخ می‌دهد که بسامد E_f برابر با بسامد سیکلوترونی باشد. در میدان مغناطیسی حفره‌ها و الکترونها در جهت‌های مخالف دوران می‌کنند.



شکل ۱۲. آرایش میدانها در آزمایش تشدید سیکلوترونی در نیمرسانا. جهت گردش الکترونها و حفره‌ها مخالف یکدیگر است.



شکل ۱۳. شکل ساده‌شده ساختار لبه نوار در نیمرسانای با گاف مستقیم.

آزمایش را برای $m^*/m = 0.1$ در نظر می‌گیریم. در $f_c = 24 \text{ GHz}$ ، یا $\omega_c = 1.5 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ ، در حالت تشدید داریم $B = 860 \text{ G}$. زمان واهلش برخورد τ ، پهنای خط را تعیین می‌کند، و برای به دست آوردن تشدید متمایز لازم است که $\omega_c \tau \geq 1$ باشد. مسافت آزاد میانگین باید آن قدر بزرگ باشد که حامل متوسط بتواند بین برخوردها یک رادیان حول یک دایره طی کند. این در بایستها با کاربرد بلورهای با خلوص بالا در دمای هلیوم مایع و استفاده از تابش با سامد و میدانهای مغناطیسی بالاتر فراهم می‌شوند. در نیمرساناهای با گاف مستقیمی که لبه‌های نوار در مرکز منطقه بریلوئن واقع‌اند، نوارها ساختار نشان‌داده‌شده در شکل ۱۳ را دارند. لبه نوار رسانش کروی و دارای جرم مؤثر m_e است

$$\epsilon_c = E_g + \hbar^2 k^2 / 2m_e \quad (31)$$

این انرژی نسبت به لبه نوار ظرفیت نوشته شده است. نوارهای ظرفیت در نزدیکی این لبه مشخصاً سه‌تایه‌اند: نوار حفره‌های سنگین 1hh و حفره‌های سبک 2lh ، که در مرکز واگن‌اند، و یک نوار 3soh که

جدول ۲. جرم مؤثر الکترونها و حفره‌ها در نیمرساناهای با گاف مستقیم

بلور	الکترون m_e/m	حفره سنگین m_{hh}/m	حفره سبک m_{lh}/m	حفره شکافتی m_{soh}/m	اسپین-مدار Δ, eV
InSb	۰٫۱۵	۰٫۳۹	۰٫۲۱	(۰٫۱۱)	۰٫۸۲
InAs	۰٫۲۶	۰٫۴۱	۰٫۲۵	۰٫۰۸	۰٫۴۳
InP	۰٫۷۳	۰٫۴	(۰٫۷۸)	(۰٫۱۵)	۰٫۱۱
GaSb	۰٫۴۷	۰٫۳	۰٫۰۶	(۰٫۱۴)	۰٫۸۰
GaAs	۰٫۰۶۶	۰٫۵	۰٫۸۲	۰٫۱۷	۰٫۳۴
Cu _۲ O	۰٫۹۹	—	۰٫۵۸	۰٫۶۹	۰٫۱۳

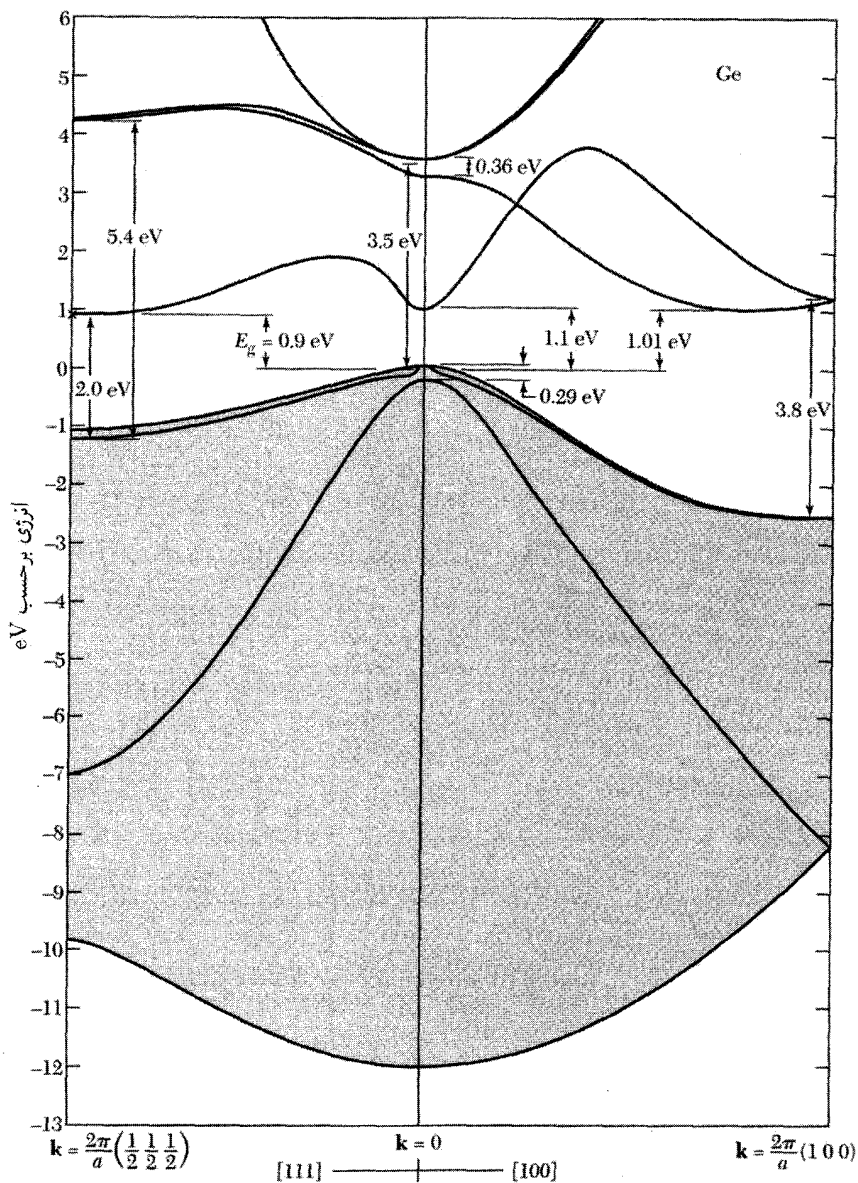
در اثر شکافتگی اسپین مدار Δ از دو نوار دیگر جدا می‌شود:

$$\begin{aligned} \epsilon_v(hh) &\cong -\hbar^2 k^2 / 2m_{hh}; & \epsilon_v(lh) &\cong -\hbar^2 k^2 / 2m_{lh}; \\ \epsilon_v(soh) &\cong -\Delta - \hbar^2 k^2 / 2m_{soh} \end{aligned} \quad (۳۲)$$

مقادیر پارامترهای جرم در جدول ۲ داده شده‌اند. شکل‌های (۳۲) صرفاً تقریبی‌اند، زیرا در نزدیکی $k = 0$ نوار حفره‌های سنگین و سبک کروی نیستند. به بحث زیر در مورد Si و Ge مراجعه کنید. نظریه اختلال لبه‌های نوار مسئله ۸ فصل ۹ نشانه آن است که جرم مؤثر الکترون برای یک بلور با گاف مستقیم باید تقریباً با گاف نوار متناسب باشد. با استفاده از جدول‌های ۱ و ۲ مقادیر ثابت $(eV)^{-1}$ ۰٫۵۱، ۰٫۶۰، ۰٫۶۳، $m_e/(mE_g) =$ را، به ترتیب، برای رشته InSb، InAs، و Inp به دست می‌آوریم که با نشانه فوق مطابقت دارد.

سیلیسیم و ژرمانیم

نوارهای رسانش و ظرفیت ژرمانیم در شکل ۱۴ مبتنی بر ترکیبی از نتایج نظری و تجربی است. لبه نوار ظرفیت در هر دو بلور Si و Ge در $k = 0$ است و از حالت‌های $p_{۱/۲}$ و $p_{۳/۲}$ اتمهای آزاد به دست می‌آید. این امر را به سادگی می‌توان با استفاده از تقریب بستگی قوی (فصل ۹) در مورد توابع موج مشاهده کرد. همان‌گونه که در اتم داریم تراز $p_{۳/۲}$ دارای واگنی چهارتایه است؛ این چهار حالت به مقادیر $\pm \frac{3}{2}$ و $m_J = \pm \frac{1}{2}$ مربوط‌اند. تراز $p_{۱/۲}$ با $\pm \frac{1}{2}$ ، $m_J =$ به طور دوگانه واگن است. حالت‌های $p_{۳/۲}$ از نظر انرژی از حالت‌های $p_{۱/۲}$ بالاترند؛ اختلاف انرژی Δ مقیاسی از برهم‌کنش اسپین-مدار است.



شکل ۱۴. ساختار نواری محاسبه شده برای ژرمانیم. خصلتهای عمومی با آزمایش سازگاری خوبی دارند. چهار نوار با رنگ خاکستری نشان داده شده‌اند. ساختار ریز لبه نوار ظرفیت از شکافتگی اسپین-مدار ناشی می‌شود. گاف انرژی غیرمستقیم است؛ لبه نوار رسانش در نقطه $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) (2\pi/a)$ قرار دارد. سطوح انرژی ثابت حول این نقطه بیضوی‌اند.

لبه‌های نوار ظرفیت ساده نیستند. حفره‌هایی که در نزدیکی لبهٔ نوار قرار دارند با دو جرم مؤثر سبک و سنگین مشخص می‌شوند. این حفره‌ها از دو نواری به‌وجود می‌آیند، که از تراز $p_{3/2}$ اتم ناشی می‌شوند. همچنین یک نوار از تراز $p_{1/2}$ تشکیل می‌شود که از تراز $p_{3/2}$ از طریق برهم‌کنش اسپین-مدار ناشی می‌شود. سطوح انرژی کروی نیستند، ولی پیچ‌وتاب دارند (QTS ، صفحهٔ ۲۷۱)

$$\epsilon(\mathbf{k}) = Ak^2 \pm [B^2 k_x^4 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2)]^{1/2} \quad (33)$$

گرایش علامت، دو جرم را متمایز می‌کند. برای نوار شکافتی $\epsilon(k) = -\Delta + Ak^2$. نتایج آزمایشها، برحسب واحد $\hbar^2/2m$ ، عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} \text{Si: } & A = -4.29; \quad |B| = 0.68; \quad |C| = 4.87; \quad \Delta = 0.44 \text{ eV} \\ \text{Ge: } & A = -13.38; \quad |B| = 8.48; \quad |C| = 13.15; \quad \Delta = 0.29 \text{ eV} \end{aligned}$$

به‌طور تقریبی، جرم حفره‌های سبک و سنگین در ژرمانیم $0.43m$ و $0.34m$ ، در سیلیسیم $0.16m$ و $0.52m$ ، و در الماس $0.7m$ و $2.12m$ است.

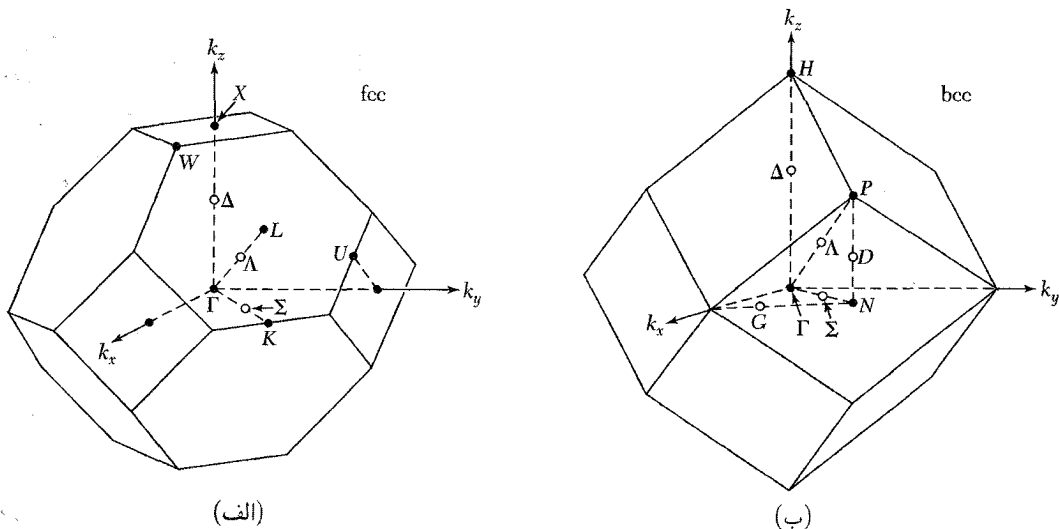
لبه‌های نوار رسانش در Ge در نقاط معادل L از منطقهٔ بریلوئن واقع‌اند، شکل ۱۵ (الف). هر لبهٔ نوار دارای یک سطح انرژی کره‌وار است که در جهت محور $\langle 111 \rangle$ بلور جهت‌گیری شده و دارای جرم طولی $m_l = 1.59m$ و جرم عرضی $m_t = 0.82m$ است. در میدان مغناطیسی استاتیکی که با محور طولی کره‌وار زاویهٔ θ بسازد، جرم مؤثر سیکلوترونی m_c برابر است با

$$\frac{1}{m_c^2} = \frac{\cos^2 \theta}{m_t^2} + \frac{\sin^2 \theta}{m_l m_t} \quad (34)$$

نتایج مربوط به Ge در شکل ۱۶ نشان داده شده‌اند.

همان‌طور که در شکل ۱۷ (الف) نشان داده شده است، لبه‌های نوار رسانش در سیلیسیم کره‌وارهایی‌اند که در جهت‌های معادل $\langle 100 \rangle$ در منطقهٔ بریلوئن جهت‌گیری شده‌اند و پارامترهای جرمی‌شان $m_l = 0.92m$ و $m_t = 0.19m$ است. لبه‌های نوار در امتداد خطوط Δ در منطقهٔ شکل ۱۵ (الف) و با فاصلهٔ کمی از نقاط X در داخل منطقه قرار می‌گیرند.

در GaAs داریم $A = -6.98$ ، $B = -4.5$ ، $|C| = 6.2$ ، و $\Delta = 0.34 \text{ eV}$. ساختار نواری در شکل ۱۷ (ب) نشان داده شده است. GaAs دارای یک گاف مستقیم با جرم الکترون رسانشی همسانگرد $0.67m$ است.



شکل ۱۵. شاخصهای استاندارد نقاط و محورهای تقارن در مرز منطقهٔ شبکه‌های fcc و bcc. مرکز منطقه‌ها در Γ است. در (الف) نقطهٔ مرزی واقع در $(100)(2\pi/a)$ و L نقطهٔ مرزی واقع در $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})(2\pi/a)$ است؛ خط Δ ، Γ ، و X را به یکدیگر وصل می‌کند. در (ب) نمادهای متناظر عبارت‌اند از H ، P ، و Δ .

غلظت حامله‌های ذاتی

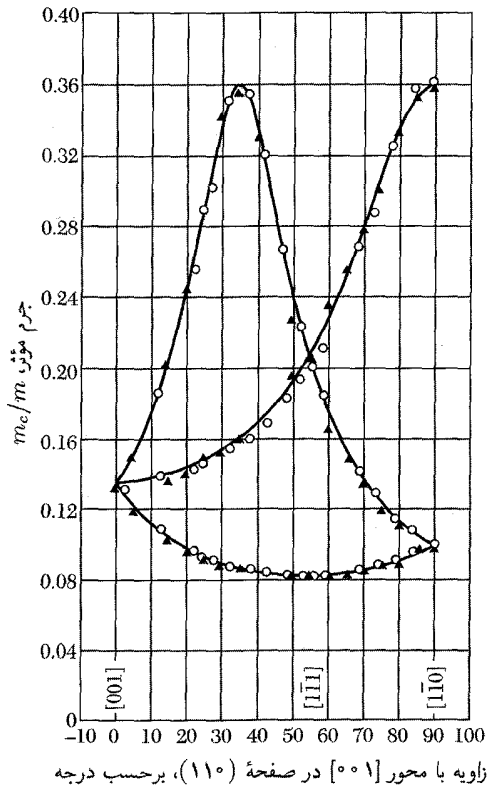
می‌خواهیم غلظت حامله‌های ذاتی را به‌گونهٔ تابعی از دما، برحسب گاف نوار به‌دست آوریم. محاسبات را برای لبه‌های نوار سهمی ساده انجام می‌دهیم. نخست تعداد الکترونهای برانگیخته‌شده به نوار رسانش را در دمای T برحسب پتانسیل شیمیایی μ محاسبه می‌کنیم. در فیزیک نیمرسانا، μ تراز فرمی نامیده می‌شود. در دماهای موردنظر برای نوار رسانش نیمرسانا می‌توان فرض کرد $\epsilon - \mu \gg k_B T$ و تابع توزیع فرمی-دیراک به‌صورت زیر خلاصه می‌شود

$$f_e \simeq \exp[(\mu - \epsilon)/k_B T] \tag{۳۵}$$

در این تقریب که برای $f_e \ll 1$ معتبر است، این تابع احتمال اشغال اوربیتال الکترون رسانش را نشان می‌دهد. انرژی الکترون در نوار رسانش برابر است با

$$\epsilon_k = E_c + \hbar^2 k^2 / 2m_e \tag{۳۶}$$

که در آن، همان‌گونه که در شکل ۱۸ نشان داده شده است، E_c انرژی در لبهٔ نوار رسانش است. در اینجا m_e



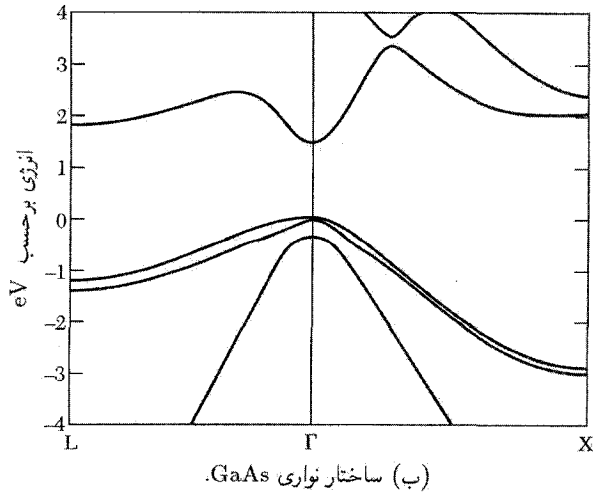
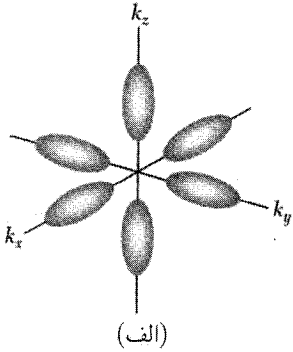
شکل ۱۶. جرم مؤثر سیکلوترونی الکترونها در ژرمانیم در $۴K$ وقتی جهت‌های میدان مغناطیسی در صفحه (110) واقع‌اند. در Ge چهار کره‌وار جرم مستقل وجود دارد که در امتداد هر محور $[111]$ قرار دارد، ولی اگر در صفحه (110) مشاهده کنیم دو کره‌وار همواره معادل به نظر می‌رسند.

جرم مؤثر الکترون است. بنابراین با استفاده از رابطه (۲) فصل ۶ چگالی حالتها در ϵ به صورت زیر است

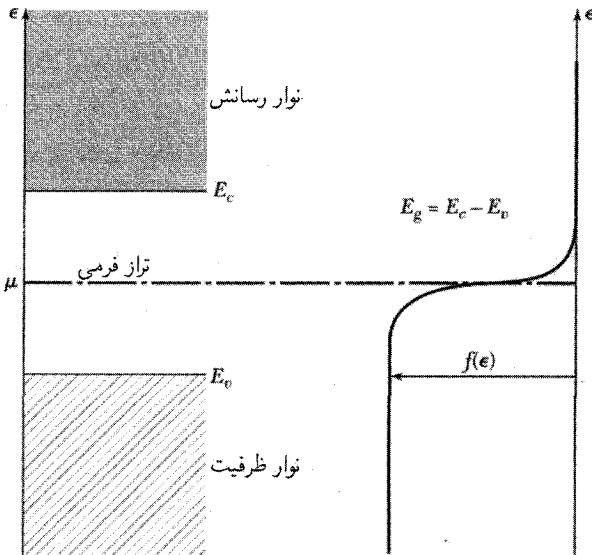
$$D_e(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} (\epsilon - E_c)^{1/2} \quad (۳۷)$$

غلظت الکترونها در نوار رسانش چنین است

$$n = \int_{E_c}^{\infty} D_e(\epsilon) f_e(\epsilon) d\epsilon = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \exp(\mu/k_B T) \times \int_{E_c}^{\infty} (\epsilon - E_c)^{1/2} \exp(-\epsilon/k_B T) d\epsilon \quad (۳۸)$$



شکل ۱۷. (الف) بیضویهای انرژی ثابت برای الکترونهاي سیلیسیم که برای $m_l/m_t = 5$ ترسیم شده‌اند. (ب) ساختار نواری GaAs.



شکل ۱۸. مقیاس انرژی برای محاسبات آماری. تابع توزیع فرمی، برای دمای $k_B T \ll E_g$ ، در چنین مقیاسی نشان داده می‌شود. تراز فرمی به گونه‌ای در نظر گرفته شده است که به خوبی در میان گاف نواری جای می‌گیرد، درست مثل حالت نیمرسانای ذاتی. اگر $\epsilon = \mu$ آنگاه $f = \frac{1}{2}$.

که پس از انتگرال‌گیری نتیجه زیر حاصل می‌شود

$$n = 2 \left(\frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp[(\mu - E_c)/k_B T] \quad (39)$$

مسئله با معلوم بودن μ برای n حل می‌شود. محاسبه غلظت p حفره‌ها در حالت تعادل مفید است. تابع توزیع f_h حفره‌ها با رابطه $f_h = 1 - f_e$ به تابع توزیع الکترون‌ها مربوط می‌شود، زیرا حفره به منزله غیاب الکترون است. به شرط آنکه $(\mu - \epsilon) \gg k_B T$ ، داریم

$$f_h = 1 - \frac{1}{\exp[(\epsilon - \mu)/k_B T] + 1} = \frac{1}{\exp[(\mu - \epsilon)/k_B T] + 1} \\ \cong \exp[(\epsilon - \mu)/k_B T] \quad (40)$$

اگر حفره‌ها در نزدیکی قله نوار ظرفیت مانند ذراتی که به جرم مؤثر m_h رفتار کنند، چگالی حالت‌های حفره‌ای با رابطه زیر بیان می‌شود

$$D_h(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_h}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E_v - \epsilon)^{1/2} \quad (41)$$

که در آن E_v انرژی در لبه نوار ظرفیت است. همان‌طور که برای به‌دست آوردن رابطه (۳۸) عمل کردیم رابطه زیر را نیز می‌توان برای غلظت p حفره‌های موجود در نوار ظرفیت نتیجه گرفت

$$p = \int_{-E_c}^{E_c} D_h(\epsilon) f_h(\epsilon) d\epsilon = 2 \left(\frac{m_h k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp[(E_c - \mu)/k_B T] \quad (42)$$

با ضرب کردن عبارتهای مربوط به p و n در یکدیگر رابطه تعادلی زیر را با انرژی گاف $E_g = E_c - E_v$ همان‌گونه که در شکل ۱۸ نشان داده شده، به‌دست می‌آوریم،

$$np = 4 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m_c m_h)^{3/2} \exp(-E_g/k_B T) \quad (43)$$

این نتیجه مفید به تراز فرمی μ بستگی ندارد. در 300K مقدار np برای ساختارهای نواری واقعی Ge، Si و GaAs، به ترتیب، برابر است با $2.10 \times 10^{19} \text{cm}^{-6}$ ، $2.89 \times 10^{26} \text{cm}^{-6}$ و $6.55 \times 10^{12} \text{cm}^{-6}$. در به‌دست آوردن این رابطه در هیچ‌جا فرض نکرده‌ایم که ماده نیمرسانا ذاتی باشد؛ این نتیجه برای یونش ناخالصی نیز صادق است. تنها فرضی که کرده‌ایم این است که فاصله تراز فرمی از لبه هر دو نوار باید در مقایسه با $k_B T$ بزرگ باشد.

با یک استدلال ساده مبتنی بر نظریه جنبشی می‌توان نشان داد که چرا در یک دمای معلوم حاصلضرب np ثابت است. فرض کنید جمعیت تعادل الکترون‌ها و حفره‌ها از طریق تابش فوتونی جسم سیاه در دمای

$B(T)np$ برقرار شود. فوتونها، زوجهای الکترون-حفره را با آهنگ $A(T)$ تولید می‌کنند، در حالی که $B(T)np$ آهنگ واکنش باز ترکیب، فوتون $e + h =$ است. در این صورت

$$dn/dt = A(T) - B(T)np = dp/dt \quad (44)$$

در تعادل $dn/dt = 0$ و $dp/dt = 0$ ، بنابراین $np = A(T)/B(T)$. از آنجا که در یک دمای معلوم حاصلضرب غلظت الکترونها و حفره‌ها برابر با ثابتی مستقل از غلظت ناخالصی است، با افزودن قسمت کوچکی از یک ناخالصی مناسب، مثلاً برای افزایش n باید p را کاهش داد. این نتیجه در عمل مهم است — با افزایش کنترل‌شده ناخالصیهای مناسب می‌توان غلظت کل $n + p$ حاملها را در بلور ناخالص کاهش داد. این کاهش گاهی بسیار زیاد است. چنین کاهش را جبران می‌نماید. در نیمرسانای ذاتی تعداد الکترونها برابر با تعداد حفره‌هاست، زیرا با برانگیختگی گرمایی یک الکترون، یک حفره در نوار ظرفیت باقی می‌ماند. بنابراین با استفاده از (۴۳)، با گذاشتن شاخص پایین i برای مشخص کردن حالت ذاتی، و استفاده از $E_g = E_c - E_v$ داریم

$$n_i = p_i = 2 \left(\frac{k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} \exp(-E_g/2k_B T) \quad (45)$$

غلظت حاملهای ذاتی به‌طور نمایی به $E_g/2k_B T$ بستگی دارد، که در آن E_g گاف انرژی است. با مساوی قراردادن روابط (۳۹) و (۴۲) و برای تراز فرمی که از بالای نوار ظرفیت اندازه‌گیری شود داریم،

$$\exp(2\mu/k_B T) = (m_h/m_e)^{3/2} \exp(E_g/k_B T) \quad (46)$$

$$\mu = \frac{1}{2} E_g + \frac{3}{4} k_B T \ln(m_h/m_e) \quad (47)$$

اگر $m_h = m_e$ ، $\mu = \frac{1}{2} E_g$ و تراز فرمی وسط گاف ممنوع قرار خواهد گرفت.

تحرك ذاتی

تحرك عبارت است از بزرگی سرعت رانش به‌ازای یکای میدان الکتریکی:

$$\mu = \frac{|v|}{E} \quad (48)$$

با اینکه سرعت رانش الکترونها و حفره‌ها در یک میدان معلوم مخالف یکدیگرند، بنابر تعریف، تحرك هم برای الکترونها مثبت است و هم برای حفره‌ها. با نوشتن μ_e یا μ_h برای تحرك الکترون یا حفره می‌توان از آمیختگی نمادهای μ برای پتانسیل شیمیایی و تحرك اجتناب کرد. رسانندگی الکتریکی برابر است با مجموع سهم الکترونها و حفره‌ها:

$$\sigma = (ne\mu_e + pe\mu_h) \quad (49)$$

جدول ۳. تحرک حاملها در دمای اتاق، برحسب $\text{cm}^2/\text{V-s}$

بلور	الکترونها	حفرهها	بلور	الکترونها	حفرهها
الماس	۱۸۰۰	۱۲۰۰	GaAs	۸۰۰۰	۳۰۰
Si	۱۳۵۰	۴۸۰	GaSb	۵۰۰۰	۱۰۰۰
Ge	۳۶۰۰	۱۸۰۰	PbS	۵۵۰	۶۰۰
		۴۵۰	PbSe	۱۰۲۰	۹۳۰
InSb	۸۰۰	۴۵۰	PbTe	۲۵۰۰	۱۰۰۰
InP	۳۰۰۰۰	۱۰۰	AgCl	۵۰	—
InAs	۴۵۰۰		T		
AlAs	۲۸۰	—	KBr(۱۰۰K)	۱۰۰	—
AlSb	۹۰۰	۴۰۰	SiC	۱۰۰	۱۰-۲۰

که در آن n و p غلظت الکترونها و حفرههاست. در فصل ۶ دیدیم که سرعت رانش بار q برابر است با

$$v = q\tau E/m$$

بنابراین

$$\mu_e = e\tau_e/m_e; \quad \mu_h = e\tau_h/m_h \quad (۵۰)$$

که در آن τ زمان برخورد است.

تحرکها با یک قانون توانی متعادل به دما بستگی دارند. در ناحیه ذاتی وابستگی نمایی $\exp(-E_g/2k_B T)$ غلظت حاملها، معادله (۴۵)، بر وابستگی رسانندگی به دما غلبه می‌کند.

مقادیر تجربی تحرک در دمای اتاق در جدول ۳ ارائه شده‌اند. تحرک برحسب واحدهای SI و برحسب $\text{m}^2/\text{V-s}$ بیان می‌شود که $۱۰^{-۴}$ برابر واحد عملی تحرک است. در اغلب مواد، مقادیر ذکرشده با پراکندگی حاملها توسط فونونهای گرمایی محدود می‌شوند. تحرکهای حفره نوعاً کمتر از تحرکهای الکترون‌اند، و این به دلیل وقوع واکنی نواری در لبه نواری در مرکز منطقه است، و بدین وسیله فرایندهای پراکندگی بین نواری را، که تحرک را به طور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌دهند، ممکن می‌سازند.

در برخی بلورها، به ویژه در بلورهای یونی، حفرهها عملاً بی‌تحرک‌اند و فقط با جهشی که به گونه گرمایی فعال می‌شود از یک یون به یون دیگر می‌روند. علت اصلی این «خود-به‌دام‌افتادگی» و پیچیدگی شبکه است که به اثر یان-تلا حالت‌های واگن مربوط می‌شود. واکنی اوربیتالی لازم برای خود-به‌دام‌افتادگی در حفرهها خیلی فراوانتر از الکترون‌هاست.

بلورهایی که در لبه‌های نوارشان گافهای انرژی کوچک دارند، معمولاً تحرک الکترونی بسیار زیادی از خود نشان می‌دهند. گافهای کوچک منجر به جرمهای مؤثر کوچک می‌شوند، که تحرکهای بالا را ممکن

می‌سازند. بالاترین تحرک مشاهده شده در نیمرسانای حجیم برابر با $V_s = 10^6 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ است که به PbTe در 4K مربوط می‌شود، که گاف آن برابر 1.9eV است.

رسانندگی ناخالصی

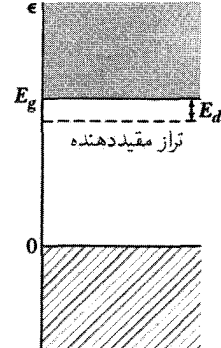
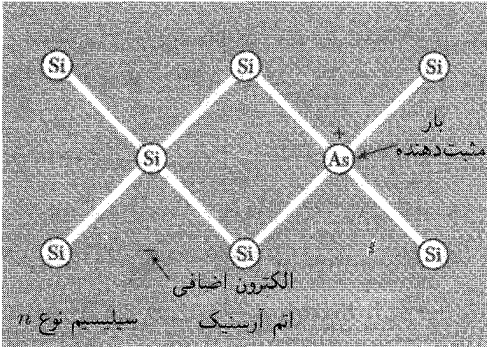
بعضی از ناخالصیها و نااکاملیها ویژگیهای الکتریکی نیمرسانا را به شدت تغییر می‌دهند. افزودن بور به سیلیسیم به نسبت ۱ اتم بور به 10^5 اتم سیلیسیم، رسانندگی سیلیسیم خالص را در دمای اتاق با ضریبی برابر 10^3 افزایش می‌دهد. در نیمرساناهای مرکب، کاستی عنصرسنجی یک جزء متشکله به منزله ناخالصی عمل می‌کند؛ چنین نیمرساناهایی را نیمرساناهای کاستی دار می‌نامند. افزودن عمدی ناخالصی به نیمرسانا را آلیش می‌گویند.

تأثیر ناخالصی در سیلیسیم و ژرمانیم را بررسی می‌کنیم. این عناصر با ساختار الماسی متبلور می‌شوند. هر اتم چهار پیوند کووالان، یک پیوند با هر یک از اتمهای همسایه اول، تشکیل می‌دهد. این امر به ظرفیت شیمیایی چهار این عناصر مربوط می‌شود. اگر در شبکه یک اتم ناخالصی با ظرفیت ۵، مانند فسفر، آرسنیک، یا آنتیمن، را در جای یک اتم قرار دهیم، پس از اینکه چهار پیوند کووالانسی با همسایه‌های اول به وجود آمد، یعنی، پس از اینکه اتم ناخالصی با کوچکترین اغتشاش ممکن در ساختار بلور جا داده شد، یک الکترون ظرفیت از اتم ناخالصی باقی می‌ماند. اتمهای ناخالصی که می‌توانند یک الکترون از دست دهند را دهنده‌ها می‌نامند.

حالتهای دهنده. ساختار شکل ۱۹ دارای یک بار مثبت روی اتم ناخالصی است (که یک الکترون از دست داده است). بررسیهای ثابت شبکه، تأیید کرده‌اند که ناخالصیهای پنج ظرفیتی در شبکه جانشین اتمهای عادی می‌شوند، و در مکانهای میانی قرار نمی‌گیرند. از آنجا که این الکترونها در بلور باقی می‌مانند، بلور به طور کلی خنثی می‌ماند.

الکترون اضافی در پتانسیل کولنی $e/\epsilon r$ یون ناخالصی حرکت می‌کند، که ϵ در بلور کووالانسی، ثابت دی‌الکتریک استاتیکی محیط است. ضریب $1/\epsilon$ کاهش نیروی کولنی بین بارها را، که از قطبیدگی الکترونی محیط ناشی می‌شود، به حساب می‌آورد. این طرز عمل در مورد مدارهایی معتبر است که در مقایسه با فاصله بین اتمها بزرگ‌اند، و نیز برای حرکت‌های آهسته الکترون، به گونه‌ای که بسامد مداری آن در مقایسه با بسامد ω_0 مربوط به گاف انرژی پایین باشد. الکترون دهنده As ، P ، Sb ، یا Ge در Si به خوبی این شرایط را برآورده می‌کند.

انرژی یونش ناخالصی دهنده را تخمین می‌زنیم. نظریه بور را درباره اتم هیدروژن می‌توان به آسانی طوری تغییر داد که هم ثابت دی‌الکتریک محیط و هم جرم مؤثر الکترون در پتانسیل دوره‌ای بلور را دربرگیرد: انرژی یونش هیدروژن اتمی در CGS به صورت $-e^2 m / 2 \hbar^2$ و در SI به شکل $-e^4 m / 2 (4\pi\epsilon_0 \hbar)^2$ است.



شکل ۱۹. بارهای اتم ناخالصی آرسنیک در سیلیسیم. آرسنیک دارای پنج الکترون ظرفیت است، ولی سیلیسیم فقط چهار الکترون ظرفیت دارد. بنابراین چهار الکترون آرسنیک پیوندهای کووالانسی مشابه با پیوندهای سیلیسیم می‌دهند، و الکترون پنجم برای رسانش در دسترس قرار می‌گیرد. اتم آرسنیک را دهنده می‌نامند، زیرا وقتی یونیده می‌شود یک الکترون خود را به نوار رسانش می‌بخشد.

در نیمرسانا با ثابت دی‌الکتریک ϵ ، برای به دست آوردن انرژی یونش دهنده، e^2 را با e^2/ϵ و m را با جرم مؤثر m_e تعویض می‌کنیم

$$(CGS) \quad E_d = \frac{e^4 m_e}{2\epsilon^2 \hbar^2} = \left(\frac{13.76 m_e}{e^2 m} \right) eV; \quad (SI) \quad E_d = \frac{e^4 m_e}{2(4\pi\epsilon\epsilon_0 \hbar)^2} \quad (51)$$

شعاع بور مربوط به حالت پایه هیدروژن در CGS برابر با \hbar^2/m_e^2 و در SI برابر با $4\pi\epsilon_0 \hbar^2/m_e^2$ است. بنابراین شعاع بور دهنده عبارت است از

$$(CGS) \quad a_d = \frac{\epsilon \hbar^2}{m_e e^2} = \left(\frac{0.53 \epsilon}{m_e/m} \right) \text{\AA}; \quad (SI) \quad a_d = \frac{4\pi\epsilon\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \quad (52)$$

کاربرد نظریه حالت ناخالصی در مورد ژرمانیم و سیلیسیم به دلیل ناهمسانگرد بودن جرم مؤثر الکترونیهای رسانش مشکل است. ولی ثابت دی‌الکتریک مهمترین اثر را روی انرژی دهنده دارد، زیرا به صورت مربع ظاهر می‌شود. در حالی که جرم مؤثر فقط به صورت توان اول وارد می‌شود. برای به دست آوردن تأثیر کلی ترازهای ناخالصی جرم مؤثر الکترون را در ژرمانیم $m \approx 0.1 m_e$ و در سیلیسیم $m \approx 0.2 m_e$ اختیار می‌کنیم. ثابت دی‌الکتریک استاتیکی در جدول ۴ داده شده است. انرژی یونش

جدول ۴. ثابت دی‌الکتریک نسبی استاتیکی نیمرساناها

بلور	ϵ	بلور	ϵ
الماس	۵٫۵	GaSb	۱۵٫۶۹
Si	۱۱٫۷	GaAs	۱۳٫۱۳
Ge	۱۵٫۸	AlAs	۱۰٫۱
InSb	۱۷٫۸۸	AlSb	۱۰٫۳
InAs	۱۴٫۵۵	SiC	۱۰٫۲
InP	۱۲٫۳۷	Cu _۲ O	۷٫۱

جدول ۵ انرژیهای یونش دهنده، E_d ، برای ناخالصیهای پنج‌ظرفیتی در ژرمانیم و سیلیسیم، برحسب meV

	Sb	As	P	
	۳۹٫۰	۴۹٫۰	۴۵	Si
	۹٫۶	۱۲٫۷	۱۲٫۰	Ge

اتم هیدروژن آزاد برابر با $۱۳٫۶\text{eV}$ است. براساس مدل ما، انرژی یونش دهنده E_d برای ژرمانیم برابر است با ۵meV ، که نسبت به اتم هیدروژن با ضریب $۴ \times ۱۰^{-۴} = m_e/m\epsilon^2$ کاهش یافته است. نتیجه مربوط به سیلیسیم برابر با ۲۰meV است. محاسباتی که با استفاده از تانسور جرم صحیح ناهمسانگرد انجام شده‌اند، برای ژرمانیم $۹٫۰۵\text{meV}$ و برای سیلیسیم مقدار $۲۹٫۸\text{meV}$ را پیش‌بینی می‌کنند. مقادیر مشاهده‌شده برای انرژیهای یونش دهنده در Si و Ge در جدول ۵ داده شده‌اند. دهنده‌ها در GaAs دارای $E_d \approx ۶\text{meV}$ اند.

شعاع مدار اول بور با ضریب $\epsilon m/m_e$ بر $۰٫۵۳\text{\AA}$ مربوط به اتم هیدروژن آزاد فزونی می‌یابد. شعاع مربوطه در ژرمانیم برابر ۸۰\AA ($۰٫۵۳$) و در سیلیسیم برابر ۳۰\AA ($۰٫۵۳$) است. این شعاعها بزرگ‌اند، در نتیجه مدارهای دهنده در غلظتهای نسبتاً پایین، در مقایسه با تعداد اتمهای میزبان، همپوشانی می‌کنند. با همپوشانی اوربیتالی قابل‌ملاحظه، یک «نوار ناخالصی» ناشی از حالت‌های دهنده تشکیل می‌شود: بحث گذار فلز-عایق را در فصل ۱۴ ببینید.

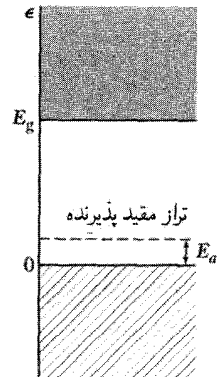
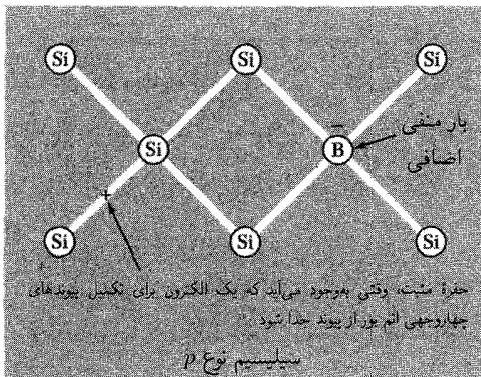
نیمرسانا می‌تواند در نوار ناخالصی توسط جهش الکترونها از یک دهنده به دهنده دیگر رسانش را انجام دهد. اگر تعدادی اتمهای پذیرنده نیز وجود داشته باشند، فرایند رسانش نوار ناخالصی در غلظتهای

پایین دهنده شروع می‌شود، در نتیجه برخی از دهنده‌ها همواره یونیده‌اند. برای اینکه دو الکترون نباید یک جایگاه را در خلال تراورد اشغال کنند، برای الکترون دهنده آسانتر است که به یک دهنده یونیده (اشغال نشده) جهش کند تا به اتم دهنده اشغال شده.

حالت‌های پذیرنده. در ژرمانیم یا سیلیسیم، درست همان‌گونه که الکترون به یک ناخالصی پنج ظرفیتی مقید است، حفره نیز می‌تواند به یک ناخالصی سه ظرفیتی مقید شود (شکل ۲۰). ناخالصیهای سه ظرفیتی مانند B, Al, Ga, و In را پذیرنده می‌نامند، زیرا این ناخالصیها می‌توانند الکترونها را از نوار ظرفیت پذیرند و حفره‌هایی را در این نوار برجای گذارند.

وقتی پذیرنده‌ای یونیده شود، حفره‌ای آزاد می‌شود. انجام این امر مستلزم دادن انرژی است. در نمودار معمولی نوار انرژی، الکترون با کسب انرژی بالا می‌رود، در حالی که حفره با کسب انرژی پایین می‌رود. انرژی یونش تجربی پذیرنده‌ها در ژرمانیم و سیلیسیم در جدول ۶ ارائه شده است. مدل بور به طور کیفی برای حفره‌ها نیز درست مانند الکترونها، صادق است. ولی واگنی در بالای نوار ظرفیت مسئله جرم مؤثر را پیچیده می‌کند.

این جدولها نشان می‌دهند که انرژی یونش پذیرنده‌ها و دهنده‌ها در Si با kBT در دمای اتاق (26meV) قابل مقایسه است، در نتیجه در دمای اتاق یونش گرمایی دهنده‌ها و پذیرنده‌ها در رسانندگی الکتریکی سیلیسیم مهم است. اگر اتمهای دهنده بسیار بیشتر از اتمهای پذیرنده باشند، یونش گرمایی



شکل ۲۰. بور فقط دارای سه الکترون ظرفیت است، لذا می‌تواند فقط با گرفتن یک الکترون از پیوند Si-Si و به جای گذاشتن یک حفره در نوار ظرفیت سیلیسیم پیوندهای چهاروجهی خود را تکمیل کند. در این صورت حفره مثبت برای رسانش در دسترس قرار می‌گیرد. از آنجا که وقتی اتم بور یونیده می‌شود یک الکترون از نوار ظرفیت می‌پذیرد، آن را پذیرنده می‌نامند. حفره در صفر کلون مقید است.

جدول ۶. انرژی یونش پذیرنده‌ها، E_a ، مربوط به ناخالصیهای سه ظرفیتی در ژرمانیم و سیلیسیم برحسب meV

In	Ga	Al	B	
۱۵۷٫۰	۶۵٫۰	۵۷٫۰	۴۵٫۰	Si
۱۱٫۲	۱۰٫۸	۱۰٫۲	۱۰٫۴	Ge

دهنده‌ها الکترونیایی را در نوار رسانش رها خواهد کرد. آنگاه الکترونها (بارهای منفی) رسانندگی نمونه را کنترل خواهند کرد، و ماده را نوع n می‌نامند.

اگر پذیرنده‌ها غلبه کنند، حفره‌هایی در نوار ظرفیت رها می‌شوند و حفره‌ها (بارهای مثبت) رسانندگی را کنترل خواهند کرد: این ماده از نوع p است. علامت ولتاژ هال (رابطه (۵۳) فصل ۶) یک محک تقریبی برای نوع n یا p است. محک آزمایشگاهی دیگر عبارت از علامت پتانسیل ترموالکتریکی است که در ادامه بحث خواهد شد.

در رژیم ذاتی تعداد حفره‌ها و الکترونها به هم برابرند. در 300K ، غلظت الکترونهای ذاتی، n_i ، برای ژرمانیم برابر با $1.7 \times 10^{13} \text{cm}^{-3}$ و در سیلیسیم برابر با $1.09 \times 10^9 \text{cm}^{-3}$ است؛ مقاومت ویژه الکتریکی ماده ذاتی برای ژرمانیم 43ohm-cm و برای سیلیسیم $2.6 \times 10^5 \text{ohm-cm}$ است.

ژرمانیم دارای $1.0^{22} \times 4.42$ اتم در سانتی‌متر مکعب است. میزان خالص‌سازی Ge بیش از هر عنصر دیگری حاصل شده است. غلظت ناخالصیهای متداول که از نظر الکتریکی فعال اند - ناخالصیهای کم دهنده و پذیرنده - به زیر یک اتم ناخالصی در 10^{11} اتم Ge کاهش یافته است (شکل ۲۱).

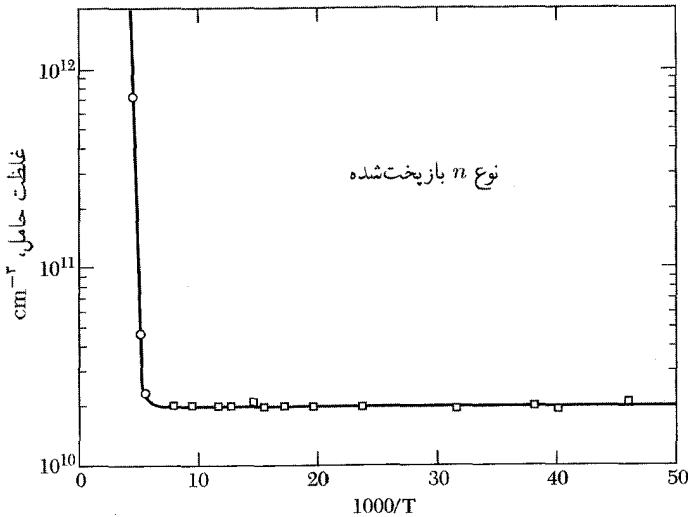
برای مثال، غلظت P را در Ge می‌توان به زیر 10^{10}cm^{-3} کاهش داد. ناخالصیهای (O, H), (C, Si) وجود دارند که غلظت آنها در Ge معمولاً نمی‌تواند به کمتر از $10^{14} - 10^{12} \text{cm}^{-3}$ کاهش یابد، ولی این ناخالصیها در اندازه‌گیریهای الکتریکی تأثیری ندارند و بنابراین آشکارسازی آنها مشکل است.

یونش گرمایی دهنده‌ها و پذیرنده‌ها

محاسبه غلظت تعادل الکترونهای رسانش حاصل از دهنده‌های یونیده همانند محاسبه استاندارد یونش گرمایی اتمهای هیدروژن در مکانیک آماری است (صفحه ۳۶۹ از کتاب TP). اگر هیچ پذیرنده‌ای وجود نداشته باشد، در حد دمای پایین $k_B T \ll E_d$ نتیجه عبارت است از

$$n \simeq (n_0 N_d)^{1/2} \exp(-E_d/2k_B T) \quad (53)$$

که $n_0 \equiv 2(m_e k_B T / 2\pi \hbar^2)^{3/2}$ است؛ در اینجا N_d غلظت دهنده‌هاست. برای به دست آوردن رابطه (۵۳)، قوانین تعادل شیمیایی را در مورد نسبت غلظتهای $[e][N_d^+]/[N_d]$ به کار می‌بریم و آنگاه قرار



شکل ۲۱. وابستگی غلظت حاملهای آزاد به دما در Ge فوق العاده خالص. اندازه‌گیریهای ضریب هال نشان می‌دهند که غلظت کل ناخالصیهایی که از نظر الکتریکی فعال اند برابر $2 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ است. شروع سریع برانگیختگی ذاتی در مقادیر پایین $1/T$ بدیهی است. بین 20°K و 40°K غلظت حاملها با تقریب خوبی ثابت است.

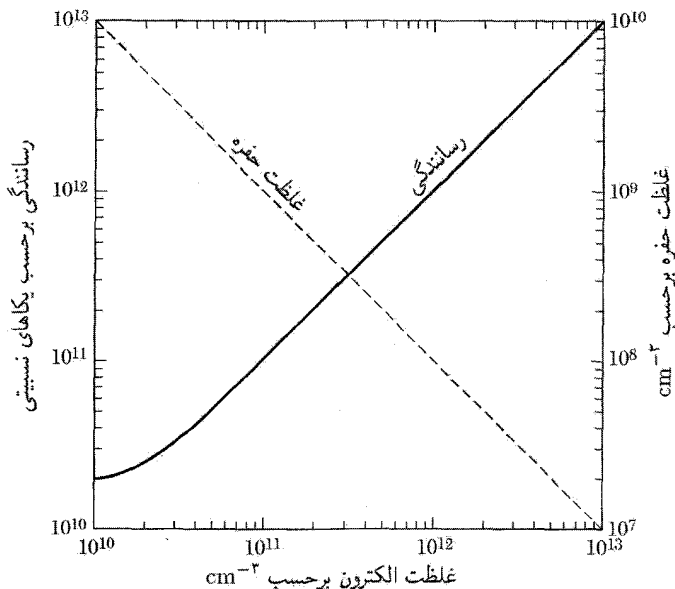
می‌دهیم $[N_d^+] = [e] = n$. با این فرض که هیچ اتم دهنده‌ای وجود نداشته باشد، نتایج همانندی برای پذیرنده‌ها وجود خواهد داشت.

در صورتی که تراکمهای پذیرنده و دهنده قابل مقایسه باشند، مسئله کاملاً پیچیده می‌شود و معادلات با روشهای عددی حل می‌شوند. ولی قانون اثر جرم (۴۳) ایجاب می‌کند که در دمای معلوم حاصلضرب np ثابت باشد. افزایشی در دهنده‌ها غلظت الکترونها را افزایش و غلظت حفره‌ها را کاهش می‌دهد؛ در این حال مجموع $n + p$ افزایش خواهد یافت. اگر تحرکها برابر باشند، رسانندگی مانند $n + p$ افزایش می‌یابد (شکل ۲۲).

آثار ترموالکتریکی

نیمرسانایی را در نظر بگیرید که در دمای ثابتی نگهداری می‌شود و در این حال میدان الکتریکی چگالی جریان الکتریکی j_q را از آن عبور می‌دهد. اگر این جریان را فقط الکترونها حمل کنند، شار بار برابر است با

$$j_q = n(-e)(-\mu_e)E = ne\mu_e E \quad (54)$$



شکل ۲۲. رسانندگی الکتریکی و غلظت حفره‌ها، p ، که به صورت تابعی از غلظت الکترونها، n ، برای نیمرسانا در دمایی محاسبه شده‌اند که $np = 10^{20} \text{ cm}^{-6}$ رسانندگی حول $n = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ مقارن است. نمونه برای $n > 10^{10}$ از نوع n و برای $n < 10^{10}$ از نوع p است. برای تحرکها، $\mu_e = \mu_h$ اختیار شده است.

که در آن μ_e تحرک الکترون است. انرژی متوسطی که الکترون ترابری می‌کند، نسبت به تراز فرمی μ برابر است با

$$(E_c - \mu) + \frac{3}{4}k_B T$$

که در آن E_c انرژی در لبه نوار رسانش است. چون رساناهای گوناگون در تماس با یکدیگرند دارای تراز فرمی‌اند. این انرژی را تراز فرمی تلقی می‌کنیم؛ شار انرژی که شار بار را همراهی می‌کند برابر است با

$$jU = n(E_c - \mu + \frac{3}{4}k_B T)(-\mu_e)E \quad (55)$$

ضریب پلنتیه Π که با رابطه $jU = \Pi j_q$ تعریف می‌شود؛ عبارت است از انرژی حمل شده به‌ازای واحد بار. برای الکترونها این ضریب برابر

$$\Pi_e = - \left(E_c - \mu + \frac{3}{4}k_B T \right) / e \quad (56)$$

و منفی است، زیرا شار انرژی در جهت مخالف شار بار است. برای حفره‌ها

$$j_q = pe\mu_h E; \quad j_U = p \left(\mu - E_v + \frac{3}{4} k_B T \right) \mu_h E \quad (57)$$

که در آن E_v ، انرژی در لبه نوار ظرفیت است. بنابراین

$$\Pi_h = \left(\mu - E_v + \frac{3}{4} k_B T \right) / e \quad (58)$$

و مثبت است. معادلات (۵۶) و (۵۸) نتیجه نظریه ساده سرعت رانشی‌اند؛ بررسی مبتنی بر معادله ترابرد بولتزمن همین نتایج را با اختلافهای عددی جزئی ارائه می‌دهد.^۱

توان ترموالکتریکی مطلق Q با استفاده از میدان الکتریکی، که گرادیان دما در مدار باز ایجاد می‌کند، تعریف می‌شود

$$E = Q \text{grad} T \quad (59)$$

ضریب پلتیه Π با رابطه زیر به توان ترموالکتریکی مربوط می‌شود:

$$\Pi = QT \quad (60)$$

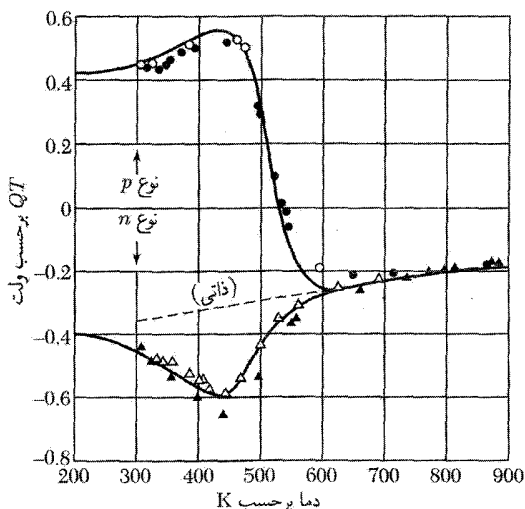
این رابطه مشهور کلونین در ترمودینامیک برگشت‌ناپذیر است. اندازه‌گیری علامت ولتاژ در دو سر یک نمونه نیمرسانا، که یک انتهایش گرم شده، راه تقریبی و آسانی است که بگوییم نمونه از نوع n است یا p (شکل ۲۳).

نیمه‌فلزها

در نیمه‌فلزها لبه نوار رسانش، از نظر انرژی، به اندازه‌ای بسیار جزئی پایینتر از لبه نوار ظرفیت است. همپوشانی کوچک نوارهای رسانش و ظرفیت باعث می‌شود که حفره‌هایی با غلظت کم در نوار ظرفیت و الکترونهایی با غلظت کم در نوار رسانش ایجاد شوند (جدول ۷). سه نیمه‌فلز آرسنیک، آنتیمون، و بیسموت در گروه V جدول دوره‌ای قرار دارند.

انتهای آنها در شبکه بلور به صورت زوج قرار می‌گیرند و به‌ازای هر یاخته بسیط دو یون و ده الکترون ظرفیت وجود دارد. تعداد زوج الکترونهای ظرفیت باعث می‌شوند که این عناصر عایق باشند. عناصر نیمه‌فلز را نیز می‌توان مانند نیمرساناها با ناخالصیهای مناسبی آلاید تا بتوان تعداد نسبی حفره‌ها و الکترونها را تغییر داد. غلظتهایشان را نیز می‌توان با استفاده از فشار تغییر داد، زیرا همپوشانی لبه‌های نوار با فشار تغییر می‌کند.

۱. بحث ساده‌ای از نظریه ترابرد بولتزمن در پیوست و ارائه شده است.



شکل ۲۳. ضریب پلتنه سیلیسیم n و p به صورت تابعی از دما. نمونه در بالای $K 600^\circ$ به گونه نیم رسانای ذاتی رفتار می‌کند. منحنیها محاسبه و نقطه‌ها اندازه‌گیری شده‌اند.

جدول ۷. غلظت الکترونها و حفره‌ها در نیمه‌فلزها

نیمه‌فلز	n_e بر حسب cm^{-3}	n_h بر حسب cm^{-3}
آرسنیک	$(2.12 \pm 0.01) \times 10^{20}$	$(2.12 \pm 0.01) \times 10^{20}$
آنتیموان	$(5.54 \pm 0.05) \times 10^{19}$	$(5.49 \pm 0.03) \times 10^{19}$
بیسموت	2.88×10^{17}	3.00×10^{17}
گرافیت	2.72×10^{18}	2.04×10^{18}

ابر شبکه‌ها

یک بلور چندلایه‌ای را، که از لایه‌های نازک با ترکیبات متفاوت و به صورت یک در میان تشکیل شده است، در نظر بگیرید. لایه‌های همدوس را در مقیاس ضخامت نانومتری می‌توان با روش برآرایی باریکه مولکولی یا رسوب‌گذاری بخار فلز-آلی رسوب‌گذاری کرد، در نتیجه ساختار ابر شبکه‌ای در مقیاس بزرگ ساخته می‌شود. دستگاه‌های با لایه‌های یک در میان از GaAlAs و GaAs تا 5° دوره یا بیشتر با فاصله شبکه‌ای A تقریباً 5nm (5°\AA) مورد بررسی قرار گرفته‌اند. پتانسیل بلوری ابردوره‌ای از ساختار ابردوره‌ای ناشی می‌شود و روی الکترونها و حفره‌های رسانشی اثر می‌کند تا مناطق بریلوئن جدید (کوچک)

و نوارهای انرژی کوچک برهم نهاده بر ساختارهای نواری لایه‌های تشکیل دهنده را ایجاد کند. در اینجا حرکت الکترون را در ابرشبکه و در حضور میدان الکتریکی اعمالی بررسی می‌کنیم.

نوسانگر بلوخ

یک الکترون بدون برخورد را در شبکه دوره‌ای در یک بعد با حرکت عمود بر صفحات ابرشبکه در نظر بگیرید. معادله حرکت در میدان الکتریکی ثابت موازی با k عبارت است از $\hbar dk/dt = -eE$ یا، برای حرکت در پهنای منطقه بریلوئن با بردار شبکه وارون $G = 2\pi/A$ داریم $\hbar G = \hbar 2\pi/A = eET$ ، که در آن T دوره حرکت است. بسامد بلوخ حرکت برابر است با $\omega_B = 2\pi/T = eEA/\hbar$ الکترون از $k = 0$ به سوی مرز منطقه شتاب می‌گیرد؛ با استفاده از استدلال فصل ۲، وقتی الکترون به $k = \pi/A$ می‌رسد دوباره در مرز منطقه در نقطه مشابه به $-\pi/A$ ظاهر می‌شود (همانند فرایند واگرد). حرکت الکترون را در دستگاه یک مدل در فضای حقیقی بررسی می‌کنیم. فرض می‌کنیم الکترون در یک نوار انرژی ساده با پهنای ϵ_0 قرار دارد:

$$\epsilon = \epsilon_0 (1 - \cos kA) \quad (61)$$

سرعت در فضای k (فضای تکانه) عبارت است از

$$v = \hbar^{-1} d\epsilon/dk = (A\epsilon_0/\hbar) \sin kA \quad (62)$$

و موقعیت الکترون در فضای حقیقی، با شرط اولیه $z = 0$ در $t = 0$ چنین بیان می‌شود

$$\begin{aligned} z &= \int v dt = \int \hbar^{-1} d\epsilon v(k) (dt/dk) = (A\epsilon_0/\hbar) \int dk (-\hbar/eE) \sin kA \\ &= (-\epsilon_0/eE)(\cos kA - 1) = (-\epsilon_0/eE)(\cos(-eEA t/\hbar) - 1) \end{aligned} \quad (63)$$

این نتیجه تأیید می‌کند که بسامد نوسان بلوخ در فضای حقیقی برابر با $\omega_B = eEA/\hbar$ است. حرکت در شبکه دوره‌ای با حرکت در فضای آزاد، که برای آن شتاب ثابت است، کاملاً متفاوت است.

تونل زنی زرنر

تاکنون اثر پتانسیل الکتروستاتیکی $-eEz$ (یا $-eEnA$) را روی نوار انرژی در نظر گرفته‌ایم؛ این پتانسیل تمامی نوار را خم می‌سازد. نوارهای بالاتر نیز به‌طور مشابه خم می‌شود و امکان عبور بین ترازهای نردبانی نوارهای مختلف را به‌وجود می‌آورد. برهم‌کنش بین ترازهای نوارهای گوناگون در نقاط هم انرژی، این امکان را برای الکترون در یک نوار در n فراهم می‌سازد تا به نوار دیگر در n' برود. این تونل زنی بین نواری القای میدانی مثالی از شکست زرنر است، که اغلب در یک تک‌پیوند مانند دیود زرنر رخ می‌دهد.

چکیده

- حرکت بسته موج متمرکز در بردار موج \mathbf{k} با $\mathbf{F} = \hbar d\mathbf{k}/dt$ توصیف می‌شود، که در آن \mathbf{F} نیروی اعمال شده است. حرکت در فضای حقیقی از سرعت گروه $\mathbf{v}_g = \hbar^{-1} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k})$ به دست می‌آید.
- هر چه گاف انرژی کوچکتر باشد، جرم مؤثر $|m^*|$ در نزدیکی گاف کمتر خواهد بود.
- بلوری با یک حفره دارای یک حالت خالی الکترونی در نواری است که اگر این حالت وجود نداشت پر بود. ویژگیهای این حفره همان ویژگیهای $N - 1$ الکترون در این نوار است.

(الف) اگر الکترونی از حالت با بردار موج \mathbf{k}_e از دست برود، در این صورت بردار موج حفره برابر است با $\mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e$.

(ب) آهنگ تغییر \mathbf{k}_h در میدان اعمال شده ایجاب می‌کند که حفره بار مثبت به نسبت داده شود: $e_h = e = -e_e$.

(ج) اگر v_e سرعت الکترونی باشد که در حالت \mathbf{k}_e قرار می‌گیرد، در این صورت سرعتی که باید به حفره با بردار موج $\mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e$ نسبت داده شود چنین است: $v_h = v_e$.

(د) انرژی حفره برای نوار پر نسبت به صفر مثبت و برابر است با $\epsilon_h(\mathbf{k}_h) = -\epsilon(\mathbf{k}_e)$.

(ه) در یک نقطه از نوار انرژی، جرم مؤثر حفره با جرم مؤثر الکترون مختلف علامت است: $m_h = -m_e$.

مسائل

۱. مدارهای ناخالصی. ایندیم آنتیمونید دارای $E_g = 0.23 \text{ eV}$ ، ثابت دی‌الکتریک $\epsilon = 18$ ، و جرم مؤثر الکترون $m = 0.15 m_e$ است. (الف) انرژی یونش دهنده و (ب) شعاع مدار حالت پایه را محاسبه کنید. (ج) کمینه غلظت دهنده‌ها باید چقدر باشد تا اینکه همپوشانی قابل ملاحظه‌ای بین مدارهای اتمهای ناخالصی مجاور رخ دهد؟ این همپوشانی معمولاً به ایجاد نوار ناخالصی منجر می‌شود، یعنی نواری از ترازهای انرژی که احتمال می‌رود از طریق سازوکاری جهشی که در آن الکترونها از یک جایگاه ناخالصی به یک جایگاه ناخالصی یونیده همسایه حرکت کنند، رسانندگی را ممکن سازد.

۲. یونش دهنده‌ها. در یک نیمرسانای به خصوص 10^{13} دهنده در سانتیمتر مکعب با انرژی یونش E_d برابر با 1 meV و جرم مؤثر $m = 0.1 m_e$ وجود دارند. (الف) غلظت الکترونهای رسانش را در 4 K برآورد کنید.

(ب) مقدار ضریب هال چقدر است؟ فرض کنید هیچ اتم پذیرنده‌ای وجود ندارد و $E_g \gg k_B T$.

۳. اثر هال با دو نوع حامل. با فرض غلظتهای n و p ، زمانهای واهلش τ_e و τ_h ، و جرمهای m_h و m_e نشان دهید که در تقریب سرعت رانش، ضریب هال برابر است با

$$R_H = \frac{1}{ec} \cdot \frac{p - nb^2}{(p + nb)^2} \quad (\text{CGS})$$

که در آن $b = \mu_e / \mu_h$ نسبت تحرکهاست. در به دست آوردن این رابطه از جملات مرتبه B^2 چشم‌پوشی کنید. در SI، c را حذف می‌کنیم. راهنمایی: در حضور میدان الکتریکی طولی، میدان الکتریکی عرضی را چنان بیابید که جریان عرضی از بین برود. محاسبات ممکن است خسته‌کننده به نظر برسد، ولی نتیجه آن به زحمتش می‌آرزد. رابطه (۶۴) فصل ۴ را برای هر دو نوع حامل به کار برید؛ از $(\omega_c \tau)^2$ در مقایسه با $\omega_c \tau$ چشم‌پوشی کنید.

۴. تشدید سیکلوترونی برای سطح انرژی کره‌وار. سطح انرژی

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \hbar^2 \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{2m_t} + \frac{k_z^2}{2m_l} \right)$$

را در نظر بگیرید، که در آن پارامتر جرم عرضی و m_l پارامتر جرم طولی است. سطحی که روی آن $\epsilon(\mathbf{k})$ ثابت باشد کره‌وار است. معادله حرکت (۶) را با $\mathbf{v} = \hbar^{-1} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon$ به کار برید و نشان دهید که وقتی میدان مغناطیسی استاتیکی B در صفحه xy قرار دارد، $c = eB / (m_l m_t)^{1/2} \omega_c$. این نتیجه وقتی $\theta = \pi/2$ با (۳۴) توافق دارد. این نتیجه در CGS است، برای به دست آوردن آن در SI، c را حذف کنید. ۵. مغناطومقاومت با دو نوع حامل. مسئله ۹ فصل ۶ نشان می‌دهد که تقریب سرعت رانش در مورد حرکت حاملهای بار در میدانهای الکتریکی و مغناطیسی منجر به مغناطومقاومت عرضی نمی‌شود. وقتی با دو نوع حامل سروکار داریم نتیجه متفاوت است. رسانایی را در نظر بگیرید که غلظت الکترونهاي آن، به جرم مؤثر m_e و زمان واهلش τ_e ، برابر n ؛ و غلظت حفره‌های آن، به جرم m_h و زمان واهلش τ_h ، برابر p باشد. در مورد حد میدانهای مغناطیسی بسیار قوی، $\omega_c \tau \gg 1$ ، بحث کنید. (الف) در این حد نشان دهید که $\sigma_{yx} = (n - p)ec/B$. (ب) نشان دهید که میدان هال با رابطه زیر داده می‌شود

$$E_y = -(n - p) \left(\frac{n}{Q_e} + \frac{p}{Q_h} \right)^{-1} E_x$$

که در آن $Q \equiv \omega_c \tau$. اگر $n = p$ باشد این میدان صفر می‌شود. (ج) نشان دهید که رسانندگی مؤثر در جهت x برابر است با

$$\sigma_{\text{eff}} = \frac{ec}{B} \left[\left(\frac{n}{Q_e} + \frac{p}{Q_h} \right) + (n - p)^2 \left(\frac{n}{Q_e} + \frac{p}{Q_h} \right)^{-1} \right]$$

اگر $n = p$ ، $\sigma \propto B^{-2}$. در صورتی که $n \neq p$ در میدانهای قوی اشباع می‌شود، یعنی وقتی $B \rightarrow \infty$ ، به سوی حدی مستقل از B میل می‌کند.

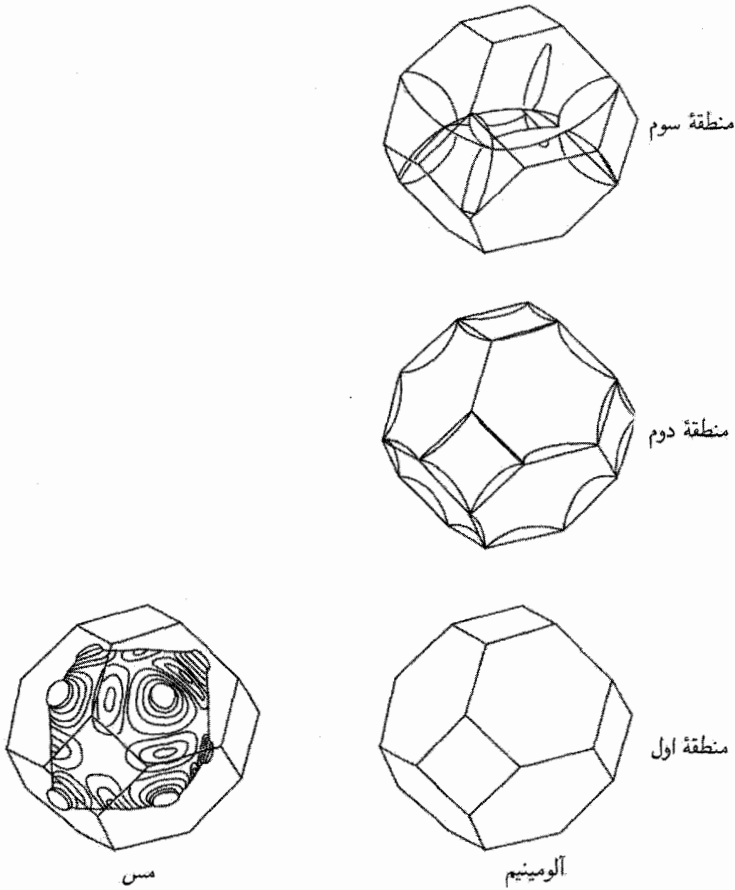
سطوح فرمی و فلزات

کمتر کسی فلز را به صورت «جامدی با سطح فرمی» تعریف می‌کند. با وجود این، چنین تعریفی ممکن است پرمعناترین تعریفی باشد که امروزه می‌توان برای فلز ارائه داد. این تعریف، پیشرفتی ژرف در درک چگونگی رفتار فلزات نشان می‌دهد. مفهوم سطح فرمی، که توسط فیزیک کوانتومی گسترش یافته است، توجیه دقیق ویژگیهای فیزیکی اصلی فلزات را میسازد.

آ. ر. مکینتاش^۱

سطح فرمی عبارت است از سطح انرژی ثابت $\epsilon_F \in F$ در فضای k . سطح فرمی، اوربیتالهای پرشده را از اوربیتالهای پرشده در صفر مطلق جدا می‌سازد. حجم و شکل سطح فرمی ویژگیهای الکتریکی فلز را تعیین می‌کنند، زیرا جریان از تغییرات اشغال‌شدگی حالت‌های نزدیک به سطح فرمی ناشی می‌شود.

شکل سطح فرمی ممکن است در طرح منطقه‌ای تحویل‌یافته، که در ادامه معرفی می‌کنیم، بسیار



شکل ۱. سطوح فرمی الکترون آزاد برای فلزات fcc که به ازای هر یاخته بسیط یک الکترون ظرفیت (Cu) و سه الکترون ظرفیت (Al) دارند. سطح فرمی‌ای که برای مس نشان داده شده به صورت کره‌ای است که به گونه‌ای مطابق با نتایج تجربی تغییر شکل یافته است. منطقه دوم آلومینیم تقریباً تا نیمه پر از الکترون است.

پیچیده باشد، با این حال وقتی به گونه‌ای بازسازی شود که نزدیک سطح کره قرار گیرد، تعبیر ساده‌ای پیدا می‌کند. در شکل ۱ سطوح فرمی الکترون آزاد را برای دو فلز که ساختار بلوری مکعبی مرکز سطحی دارند نمایش می‌دهیم: مس با یک الکترون ظرفیتی و آلومینیم با سه الکترون ظرفیتی. سطوح فرمی الکترون آزاد از کره‌هایی به شعاع k_F ، که با غلظت الکترونها ظرفیتی تعیین می‌شود، گسترش می‌یابند. سطح فرمی مس توسط برهم‌کنش با شبکه تغییر شکل داده است. چگونه از یک کره این سطوح را بسازیم؟ ساختن این سطوح مستلزم طرح‌های منطقه‌ای تحویل‌یافته و دوره‌ای است.

طرح منطقه‌ای تحویل یافته

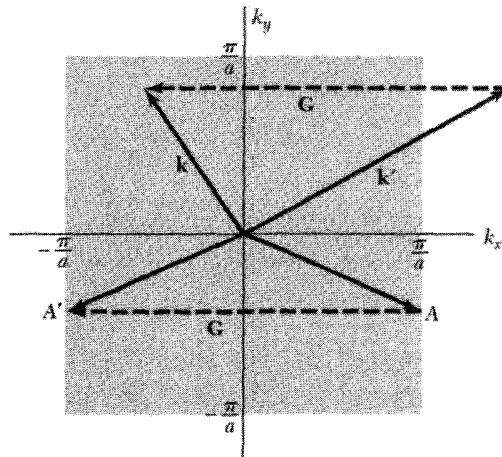
همواره می‌توان شاخص بردار موج k ی هر تابع بلوخ را طوری برگزید که در منطقه اول بریلوئن قرار گیرد. این شگرد به نگاشت نوار در طرح منطقه‌ای تحویل یافته معروف است.

اگر با یک تابع بلوخ به صورت $\psi_{k'}(\mathbf{r}) = e^{ik' \cdot \mathbf{r}} u_{k'}(\mathbf{r})$ رویه‌رو شویم، که برای آن k' ، مانند شکل ۲، خارج منطقه اول قرار داشته باشد، همواره می‌توانیم بردار شبکه وارون مناسب \mathbf{G} را چنان بیابیم که $k = k' + \mathbf{G}$ قرار گیرد. در این صورت داریم

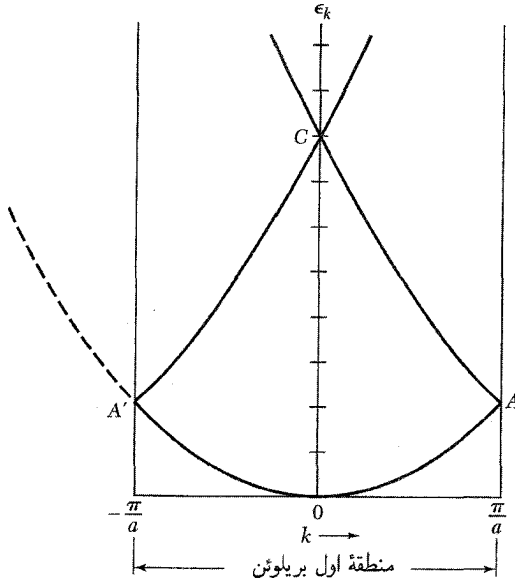
$$\begin{aligned} \psi_{k'}(\mathbf{r}) &= e^{ik' \cdot \mathbf{r}} u_{k'}(\mathbf{r}) = e^{ik \cdot \mathbf{r}} (e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} u_{k'}(\mathbf{r})) \\ &= e^{ik \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (۱)$$

که در آن $e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} u_{k'}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ و $u_{k'}(\mathbf{r})$ هر دو در شبکه بلور دوره‌ای اند. بنابراین $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ نیز دوره‌ای است. در نتیجه $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ به شکل تابع بلوخ است.

کارکردن در طرح منطقه‌ای تحویل یافته، حتی برای الکترونهای آزاد نیز، به‌گونه‌ای که در شکل ۳ نشان داده شده مفید است. هر انرژی $\epsilon_{k'}$ مربوط به k' خارج از منطقه اول برابر است با $\epsilon_{\mathbf{k}}$ در منطقه اول که در آن $k = k' + \mathbf{G}$. بنابراین، برای هر نوار، تنها لازم است که انرژی را در منطقه اول بریلوئن محاسبه



شکل ۲. منطقه اول بریلوئن یک شبکه مربعی به ضلع a . بردار موج k' را می‌توان با تشکیل $k' + \mathbf{G}$ به درون منطقه اول منتقل کرد. بردار موج در نقطه A ، روی مرز منطقه، به‌وسیله \mathbf{G} به نقطه A' ، روی مرز مقابل همین منطقه، منتقل می‌شود. آیا هر دوی A و A' را در منطقه اول به‌شمار می‌آوریم؟ با توجه به آنکه این دو نقطه با بردار شبکه وارون به هم متصل می‌شوند، آن دو یک نقطه، در این منطقه به حساب می‌آیند.



شکل ۳. رابطه انرژی-بردار موج $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ برای الکترونهاي آزاد در طرح منطقه‌اي تحويل يافته رسم شده است. اين ترسيم غالباً تصور مفيدی از ظاهر کلی ساختار نواری ارائه می‌دهد. اگر شاخه AC به اندازه $2\pi/a$ جابه‌جا شود، منحنی معمولی الکترون آزاد برای k ی منفي را می‌دهد که منحنی خط‌چین نمایش داده است. شاخه $A'C$ ، اگر به اندازه $2\pi/a$ جابه‌جا شود، منحنی معمولی برای k ی مثبت را می‌دهد. پتانسیل بلور $U(x)$ گافهای نواری را در لبه‌های منطقه (مانند A و A') و در مرکز منطقه (مانند C) به وجود می‌آورد. در طرح منطقه‌اي گسترده، نقطه C در لبه‌های منطقه دوم قرار می‌گیرد. بهنای کلی در خصلتهای کلی ساختار نواری را اغلب به درستی با چنین نوارهای الکترون آزادی در طرح منطقه‌اي تحويل يافته نشان می‌دهند.

کنیم. هر نوار انرژی عبارت است از یک تک شاخه از سطح ϵ_k برحسب k . در طرح منطقه‌اي تحويل يافته ممکن است به‌ازای یک مقدار بردار موج، انرژیهای متفاوتی به‌دست آوریم. هر انرژی متفاوت، یک نوار متفاوت را مشخص می‌کند. دو نوار در شکل ۳ نشان داده شده‌اند.

دو تابع موج با k ی یکسان ولی با انرژیهای متفاوت از یکدیگر مستقل‌اند: این توابع موج از ترکیبهای متفاوتی از مؤلفه‌های موج تخت $\exp[i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}]$ در بسط (رابطه (۲۹) فصل ۷) ساخته می‌شوند. از آنجا که برای نوارهای متفاوت مقادیر ضرایب $C(\mathbf{k} + \mathbf{G})$ متفاوت‌اند، باید نمادی، مثلاً n ، را به C ها اضافه کنیم تا به‌عنوان شاخص نوار عمل کند: $C_n(\mathbf{k} + \mathbf{G})$. بنابراین تابع بلوخ را برای حالتی با بردار موج \mathbf{k} در نوار n می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\psi_{n,\mathbf{k}} = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \exp[i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}]$$

طرح منطقه‌ای دوره‌ای

یک منطقه بریلوتن مفروض را می‌توانیم به‌طور دوره‌ای در سراسر فضای بردار موج تکرار کنیم. برای تکرار یک منطقه، آن را به‌اندازه بردار شبکه وارون انتقال می‌دهیم. اگر بتوانیم نواری را از دیگر منطقه‌ها به منطقه اول انتقال دهیم، پس می‌توانیم نواری را در منطقه اول به هر منطقه دیگر منتقل کنیم. در این طرح انرژی ϵ_k ی نوار، یک تابع دوره‌ای در شبکه وارون است:

$$\epsilon_k = \epsilon_{k+G} \quad (2)$$

در اینجا ϵ_{k+G} به همان نوار انرژی ϵ_k مربوط می‌شود.

دست‌آورد این ترسیم به طرح منطقه‌ای دوره‌ای معروف است. ویژگی دوره‌ای بودن انرژی را به‌سادگی از معادله اصلی (۲۷) فصل ۷ نیز می‌توان نتیجه گرفت.

برای مثال یک نوار انرژی شبکه مکعبی ساده را در نظر بگیرید که بعداً در رابطه (۱۳) در تقریب بستگی قوی محاسبه می‌شود:

$$\epsilon_k = -\alpha - 2\gamma(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \quad (3)$$

که در آن α و γ ثابت‌اند. یک بردار شبکه وارون شبکه sc بردار $G = (2\pi/a)\hat{x}$ است؛ اگر این بردار را به k بیفزاییم، تنها تغییر در رابطه (۳) عبارت است از

$$\cos k_x a \rightarrow \cos(k_x + 2\pi/a)a = \cos(k_x a + 2\pi)$$

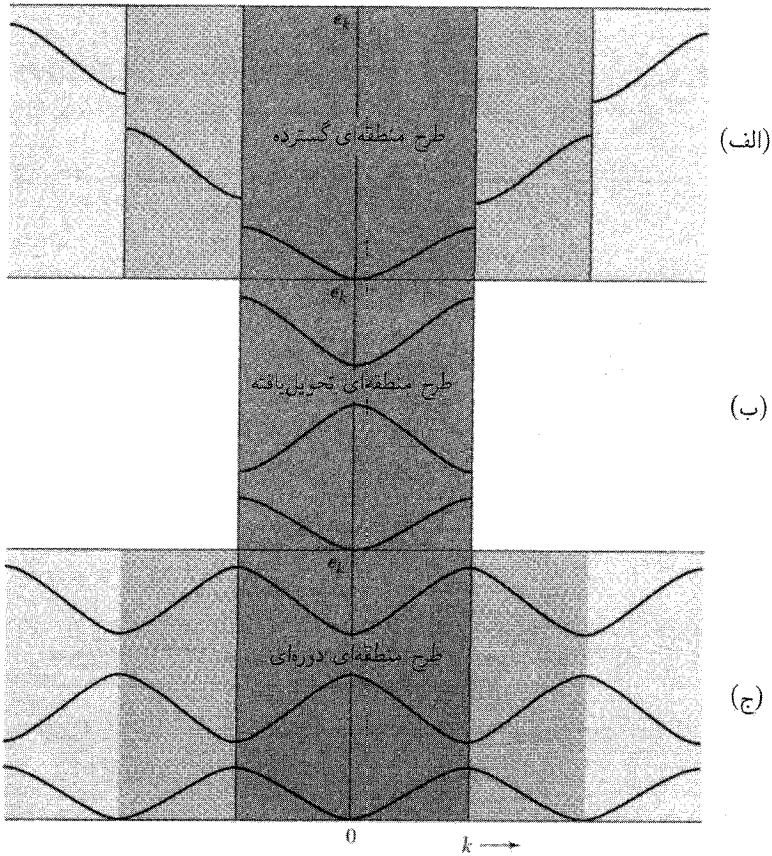
ولی این عبارت متحداً با $\cos k_x a$ برابر است. وقتی بردار موج به‌اندازه بردار شبکه وارون افزایش یابد انرژی تغییری نمی‌کند، در نتیجه انرژی، یک تابع دوره‌ای از بردار موج است.

سه نوع طرح منطقه‌ای مفیدند (شکل ۴):

- طرح منطقه‌ای گسترده که در آن نوارهای مختلف در منطقه‌های مختلف فضای بردار موج رسم شده‌اند.
- طرح منطقه‌ای تحویل‌یافته که در آن تمام نوارها در منطقه اول بریلوتن رسم می‌شوند.
- طرح منطقه‌ای دوره‌ای که در آن هر نوار در هر منطقه رسم می‌شود.

ترسیم سطوح فرمی

در شکل ۵ شبکه مربعی را بررسی می‌کنیم. معادله مرزهای منطقه عبارت است از $2k \cdot G + G^2 = 0$ و در صورتی برآورده می‌شود که k به صفحات عمودمنصف ختم شود. منطقه اول بریلوتن سطحی است که



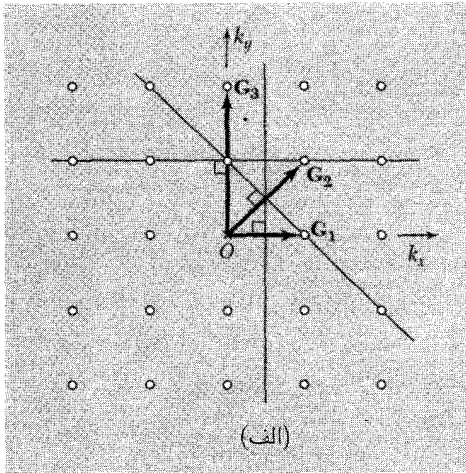
شکل ۴. سه نوار انرژی شبکه خطی که در طرح‌های منطقه‌ای (الف) گسترده (بریلوئنی)، (ب) تحویل‌یافته، و (ج) دوره‌ای ترسیم شده‌اند.

بر عمود منصف‌های G_1 و سه بردار دیگر شبکه وارون، که از نظر تقارنی با G_1 در شکل ۵ (الف) معادل‌اند، محاط می‌شود. این چهار بردار شبکه وارون عبارت‌اند از $\pm(2\pi/a)\hat{k}_x$ و $\pm(2\pi/a)\hat{k}_y$.

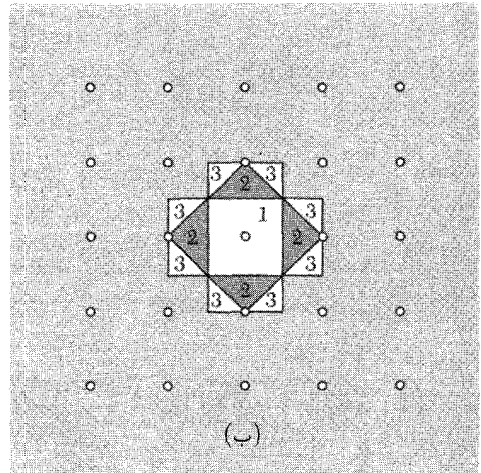
منطقه دوم به کمک G_2 و سه برداری که از نظر تقارنی با آن معادل‌اند رسم می‌شود، منطقه سوم نیز به طور مشابه به دست می‌آید. تکه‌های منطقه‌های دوم و سوم در شکل ۵ (ب) رسم شده‌اند.

برای تعیین مرزهای بعضی از منطقه‌ها باید مجموعه‌ای از چند بردار غیر معادل شبکه وارون را در نظر گرفت. برای مثال مرزهای بخش 3_a در منطقه سوم از عمود منصف‌های سه بردار G ، یعنی $(2\pi/a)\hat{k}_x$ ؛ $(4\pi/a)\hat{k}_y$ ؛ و $(2\pi/a)(\hat{k}_x + \hat{k}_y)$ تشکیل می‌شوند.

سطح فرمی الکترون آزاد برای غلظت الکترونی اختیاری در شکل ۶ نشان داده شده است. مناسب

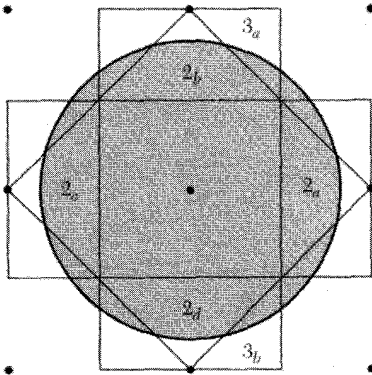


(الف)



(ب)

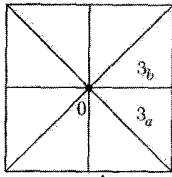
شکل ۵. ترسیم سه منطقه نخست بریلوئن شبکه مربعی در فضای k . کوتاهترین سه بردار شبکه وارون با G_1 ، G_2 و G_3 نشان داده شده‌اند. خطوط رسم شده عمود منصفهای این G ها هستند. (ب) با ترسیم تمام خطهایی که از نظر تقارنی به سه خط بند (الف) معادل اند، ناحیه‌هایی در فضای k به دست می‌آوریم که سه منطقه بریلوئن اول را تشکیل می‌دهند. شماره‌ها مشخص می‌کنند که هر ناحیه به چه منطقه‌ای تعلق دارد؛ در اینجا شماره‌ها برحسب طول بردار G ای که در ترسیم مرز بیرونی ناحیه شرکت دارد، مرتب شده‌اند.



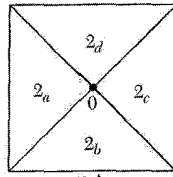
شکل ۶. منطقه‌های بریلوئن شبکه مربعی در دو بعد. دایره نشان داده شده یک سطح انرژی ثابت برای الکترونهای آزاد است: این دایره به‌ازای مقدار به‌خصوصی از غلظت الکترونی همان سطح فرمی خواهد بود. مساحت کل ناحیه پر در فضای k ، تنها به غلظت الکترونی بستگی دارد و مستقل از برهم‌کنش الکترونها با شبکه است. شکل سطح فرمی به برهم‌کنش شبکه بستگی دارد، و در شبکه واقعی به‌صورت کاملاً دایره‌ای نیست. شاخصهای درون بخشهای منطقه‌های دوم و سوم به شکل ۷ مربوط‌اند.

نیست که بخشهایی از سطح فرمی متعلق به یک منطقه از یکدیگر جدا ظاهر شوند. این جدایی را می‌توان با تبدیل به طرح منطقه‌ای تحویل‌یافته اصلاح کرد.

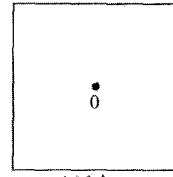
مثلی که شاخص 2_a دارد، در نظر می‌گیریم و آن را به‌اندازه بردار شبکه $\mathbf{k}_x = -(\frac{2\pi}{a})\mathbf{k}_x$ حرکت می‌دهیم تا در سطح منطقه اول بریلوئن پدیدار شود (شکل ۷). بردارهای شبکه وارون دیگر



منطقه سوم

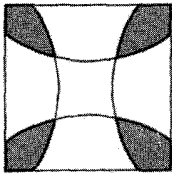


منطقه دوم

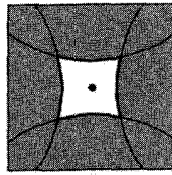


منطقه اول

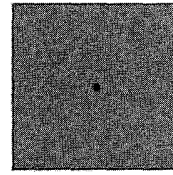
شکل ۷. نگاهت منطقه‌های اول، دوم، و سوم در طرح منطقه‌ای تحویل‌یافته. بخشهای منطقه دوم در شکل ۶ توسط انتقال به اندازه بردار شبکه وارون مناسبی کنار هم آورده شده‌اند و مربع تشکیل داده‌اند. برای هر بخش از منطقه G متفاوتی مورد نیاز است.



منطقه سوم



منطقه دوم



منطقه اول

شکل ۸. سطح فرمی الکترون آزاد شکل ۶ به‌گونه‌ای که در طرح منطقه‌ای تحویل‌یافته دیده می‌شود. ناحیه‌های سایه‌دار نمایشگر حالت‌های الکترونی اشغال شده‌اند. بخشهایی از سطح فرمی در منطقه‌های دوم، سوم، و چهارم قرار می‌گیرند. منطقه چهارم نشان داده نشده است. تمامی منطقه اول اشغال شده است.

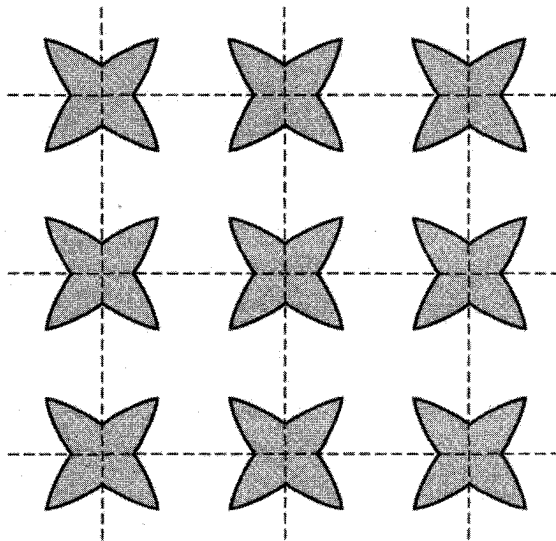
مثلثهای $2a$ ، $2c$ ، و $2d$ را به بخشهای دیگر منطقه اول انتقال می‌دهند و نگاهت منطقه دوم را به طرح منطقه‌ای تحویل‌یافته کامل می‌کنند. حال، همان‌گونه که در شکل ۸ نشان داده شده است، بخشهایی از سطح فرمی که در منطقه دوم قرار می‌گیرند، به هم متصل می‌شوند.

منطقه سوم نیز در شکل ۸ درون مربعی گردآوری شده است، ولی بخشهای سطح فرمی باز هم به یکدیگر متصل نشده‌اند. اگر این منطقه را در طرح منطقه‌ای دوره‌ای بنگریم (شکل ۹)، مشاهده می‌کنیم که سطح فرمی به صورت شبکه‌ای از گلهای چهارپر است.

الکترونهای تقریباً آزاد

چگونه از سطحهای فرمی الکترونهای آزاد به سطحهای فرمی الکترونهای تقریباً آزاد می‌رسیم؟ با استفاده از چهار واقعیت زیر می‌توانیم به سهولت سطوح فرمی را به‌طور تقریبی رسم کنیم:

- برهم‌کنش الکترون با پتانسیل دوره‌ای بلور، گانهای انرژی را در مرزهای منطقه به‌وجود می‌آورد.
- سطح فرمی تقریباً همواره مرزهای منطقه را به‌طور عمودی قطع می‌کند.
- پتانسیل بلور گوشه‌های تیز سطح فرمی را گرد می‌کند.



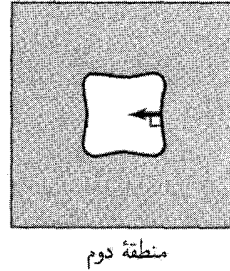
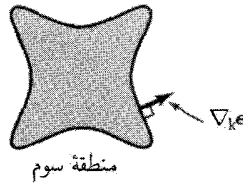
شکل ۹. سطح فرمی در منطقه سوم در طرح منطقه‌ای دوره‌ای. این شکل با تکرار منطقه سوم شکل ۸ رسم شده است.

• حجم کل محاط‌شده توسط سطح فرمی تنها به غلظت الکترونها بستگی دارد و از جزئیات برهم‌کنش شبکه مستقل است.

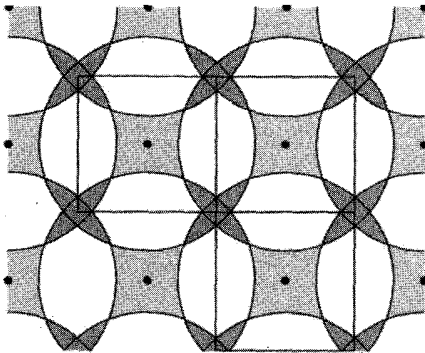
بدون محاسبه نمی‌توانیم اظهار نظر کمی کنیم، ولی به‌طور کیفی انتظار داریم که سطح‌های فرمی در منطقه‌های دوم و سوم شکل ۸ به‌گونه‌ای تغییر یابند که در شکل ۱۰ نشان داده شده است.

برداشت‌های تقریبی سطوح فرمی‌ای که از سطوح الکترون آزاد به دست می‌آیند، مفیدند. سطوح فرمی الکترونهاى آزاد با شگردی رسم می‌شوند که به هریسون^۱ نسبت داده شده است (شکل ۱۱). نقاط شبکه وارون تعیین می‌شوند و حول هر نقطه یک کره الکترون آزاد، با شعاعی متناسب با غلظت الکترونها، رسم می‌شود. هر نقطه در فضای k که حداقل درون کره باشد، به یک حالت اشغال‌شده در منطقه اول مربوط است. نقاطی که حداقل درون دو کره باشند، به حالت‌های اشغال‌شده منطقه دوم مربوط‌اند، و همین‌طور برای نقاطی در سه کره یا بیشتر.

پیش از این گفتیم که فلزهای قلیایی ساده‌ترین فلزها، با برهم‌کنشهای ضعیف بین الکترونهاى رسانشی با شبکه‌اند. با توجه به آنکه هر اتم قلیایی تنها یک الکترون ظرفیتی دارد، مرزهای منطقه اول بریلوئن از سطح فرمی تقریباً کروی که نصف حجم منطقه را پر می‌کند، دورند. محاسبه و تجربه نشان داده‌اند که سطح فرمی Na به کره نزدیک است، و سطح فرمی Cs تقریباً به اندازه 10° درصد نسبت به کره تغییر شکل یافته است.



شکل ۱۰. برداشتی کیفی از اثر پتانسیل ضعیف دوره‌ای بلوری بر سطح فرمی شکل ۸. در یک نقطه از هر سطح فرمی بردار $\nabla_k \epsilon$ را نشان داده‌ایم. در منطقه دوم، انرژی به سمت درون شکل افزایش می‌یابد، و در منطقه سوم انرژی به سمت بیرون افزایش می‌یابد. ناحیه‌های سایه‌دار با الکترون پر شده‌اند و از نظر انرژی از ناحیه‌های بدون سایه پایینترند. خواهیم دید که سطح فرمی‌ای مانند سطح فرمی منطقه سوم الکترون‌گونه است، در حالی که سطح فرمی‌ای مانند سطح فرمی منطقه دوم حفره‌گونه است.

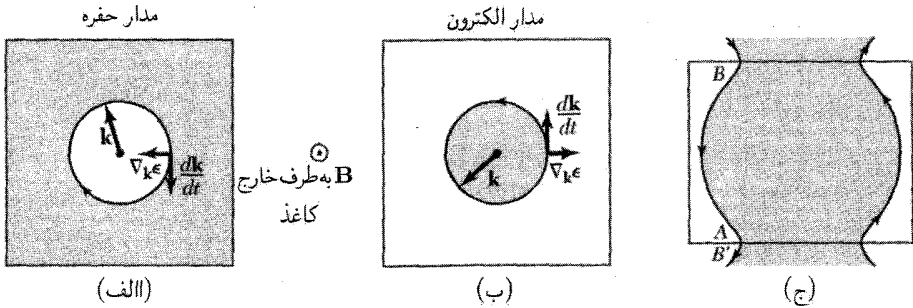


شکل ۱۱. ترسیم هریسون برای سطوح فرمی در منطقه‌های دوم، سوم، و چهارم شبکه مربعی. سطح فرمی، تمامی منطقه اول را دربر می‌گیرد، در نتیجه این منطقه از الکترون پر است.

فلزهای دوظرفیتی Be و Mg نیز برهم‌کنشهای شبکه‌ای ضعیف و سطوح فرمی تقریباً کروی دارند. ولی چون هر یک از آنها دو الکترون ظرفیتی دارند، سطح فرمی‌شان حجمی دو برابر حجم سطح فرمی قلیاییها را از فضای k دربر می‌گیرد. یعنی حجم محاط‌شده درون سطح فرمی به‌طور دقیق برابر است با حجم منطقه، ولی کروی بودن سطح فرمی موجب می‌شود که این کره به خارج منطقه اول و به درون منطقه دوم گسترش یابد.

مدارهای الکترون، مدارهای حفره، و مدارهای باز

در معادله (۷) فصل ۸ دیدیم که الکترونها در میدان مغناطیسی ایستا روی یک منحنی با انرژی ثابت در صفحه عمود بر B حرکت می‌کنند. الکترونی بر سطح فرمی روی منحنی واقع بر سطح فرمی حرکت



شکل ۱۲. حرکت بردار موج الکترون روی سطح فرمی در میدان مغناطیسی. سطوح فرمی در (الف) و (ب) از نظر توپولوژی با سطوح فرمی شکل ۱۰ معادلند. در (الف) بردار موج در جهت ساعتگرد حول مدار حرکت می‌کند؛ در (ب) بردار موج در جهت پادساعتگرد حول مدار حرکت می‌کند. جهت حرکت در (ب) همان جهتی است که برای الکترون آزاد با بار $-e$ انتظار داریم؛ الکترونها با k کوچکتر انرژی کمتری دارند، در نتیجه حالت‌های الکترونی پر درون سطح فرمی جای می‌گیرند. مدار در (ب) را الکترون گونه می‌نامیم. جهت حرکت در میدان مغناطیسی (الف) مخالف (ب) است؛ در نتیجه مدار در (الف) را حفره گونه می‌نامیم. حفره بسان ذره‌ای با بار مثبت e حرکت می‌کند. در (ج) برای یک منطقه مستطیلی، حرکت را روی مدار باز در طرح منطقه‌ای دوره‌ای نشان داده‌ایم. مدار باز از نظر توپولوژی حد واسط بین مدار حفره و مدار الکترون است.

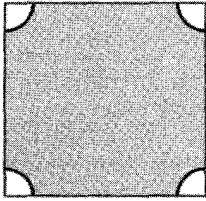
می‌کند، زیرا سطح فرمی یک سطح انرژی ثابت است. سه نوع مدار در میدان مغناطیسی در شکل ۱۲ نشان داده شده است.

مدارهای بسته در (الف) و (ب) در جهت‌های مخالف پیموده می‌شوند. از آنجا که ذرات با بارهای مخالف در میدان مغناطیسی در جهت‌های مخالف گردش می‌کنند، می‌گوییم یک مدار الکترون گونه و مدار دیگر حفره گونه است. الکترونها در مدارهای حفره گونه، در میدان مغناطیسی چنان حرکت می‌کنند که گویی دارای بار مثبت‌اند. این امر با مطالب فصل ۸ در مورد حفره‌ها سازگار است.

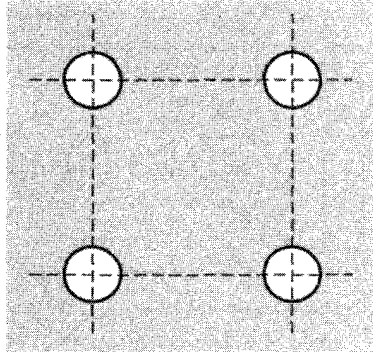
در (ج) مدار بسته نیست؛ ذره‌ای که به مرز منطقه در A می‌رسد، آن‌ا به B واگرد می‌شود. B معادل B' است، زیرا این دو با بردار شبکه وارون به هم متصل می‌شوند. چنین مداری مدار باز نامیده می‌شود. مدارهای باز اثر مهمی بر مغناطو مقاومت دارند.

اوربیتال‌های تهی در نزدیکی قله نوری که در آن همه اوربیتال‌های دیگر پرند، همان گونه مدارهای حفره گونه را به وجود می‌آورند، که در شکل‌های ۱۳ و ۱۴ نشان داده شده‌اند. در شکل ۱۵ نمایی از یک سطح انرژی ممکن در سه بعد داده شده است.

مدارهایی که حالت‌های پر را محصور می‌کنند مدارهای الکترون‌اند، مدارهایی که حالت‌های تهی را محصور می‌کنند مدارهای حفره‌اند، و مدارهایی که بدون بسته شدن از منطقه‌ای به منطقه دیگر می‌روند مدارهای بازند.

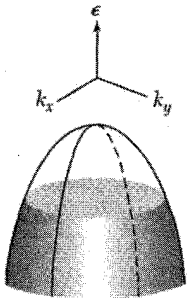


(الف)



(ب)

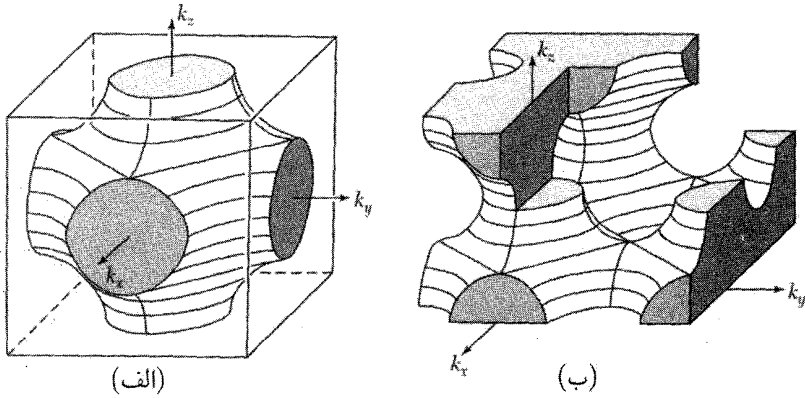
شکل ۱۳. (الف) حالت‌های تهی در گوشه‌های نوار تقریباً پیر که در طرح منطقه‌ای تحویل‌یافته رسم شده است. (ب) در طرح منطقه‌ای دوره‌ای، بخش‌های مختلف سطح فرمی به هم متصل شده‌اند. هر دایره یک مدار حفره‌گونه تشکیل می‌دهد. دایره‌های مختلف کاملاً معادل یکدیگرند، و چگالی حالتها برابر با چگالی مربوط به یک تک‌دایره است. (لزومی ندارد که مدارها واقعاً دایره‌ای باشند: برای شبکه‌ای که نشان داده شده است فقط لازم است مدارها تقارن چهارتایی داشته باشند.)



شکل ۱۴. حالت‌های تهی در نزدیکی قلّه نوار تقریباً پیر در بلور دوبعدی. این شکل معادل شکل ۱۲ (الف) است.

محاسبه نوارهای انرژی

ویگنر و سائیتس، که نخستین محاسبات نواری جدی را در ۱۹۳۳ انجام دادند، از بعدازظهرهایی یاد می‌کنند که در پشت حسابگرهای دستی آن زمان می‌گذرانند و هر بعدازظهر را برای یک تابع موج آزمایشی صرف می‌کردند. در اینجا خود را به سه روش مقدماتی محدود می‌کنیم: روش بستگی قوی، که برای درونبایی مفید است؛ روش ویگنر-سائیتس، که برای تجسم و درک فلزات قلیایی مفید است؛ و روش شبه‌پتانسیل، که با به‌کارگیری نظریه عام فصل ۷، سادگی بسیاری از مسائل را نشان می‌دهد.



شکل ۱۵. سطح انرژی ثابت در منطقه بریلوفن شبکه مکعبی ساده برای نوار انرژی مفروض

$$\epsilon_k = -\alpha - \gamma(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

(الف) سطح انرژی ثابت $\epsilon = -\alpha$. حجم پرشده به ازای هر یاخته بسط حاوی یک الکترون است. (ب) همان سطح در طرح منطقه‌ای دوره‌ای نشان داده شده است. همبندی مدارها به وضوح نشان داده شده است. آیا می‌توانید برای حرکت در میدان مغناطیسی $B \hat{z}$ ، مدارهای الکترون، حفره، و باز را پیدا کنید؟

روش بستگی قوی برای نوارهای انرژی

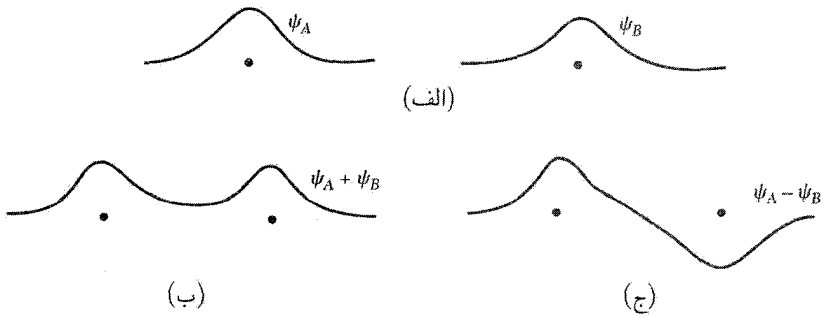
با اتمهای مجزای خنثی آغاز می‌کنیم، آنها را برای تشکیل بلورگرد هم می‌آوریم و تغییراتی که با همپوشانی توزیع بار اتمهای مجاور در ترازهای انرژی اتمی روی می‌دهد، نظاره می‌کنیم. دو اتم هیدروژن را در نظر بگیرید که هر یک دارای یک الکترون در حالت پایه $1s$ باشند. توابع موج ψ_A و ψ_B روی اتمهای مجزا در شکل ۱۶ (الف) نشان داده شده‌اند.

وقتی این اتمها نزدیک یکدیگر آورده می‌شوند، توابع موج شان همپوشانی می‌کنند. دو ترکیب $\psi_A \pm \psi_B$ را در نظر می‌گیریم. الکترون در هر یک از این ترکیبها، بین دو پروتون در اشتراک است، ولی انرژی الکترون در حالت $\psi_A + \psi_B$ تا حدودی کمتر از حالت $\psi_A - \psi_B$ است.

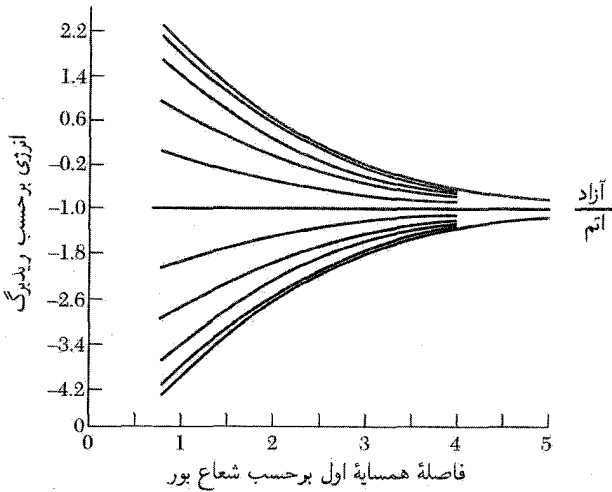
الکترون در $\psi_A + \psi_B$ بخشی از زمان را در ناحیه نیمه راه بین دو پروتون می‌گذراند و در این ناحیه همزمان در پتانسیل جاذب هر دو پروتون قرار دارد، که در اثر آن انرژی بستگی افزایش می‌یابد. در $\psi_A - \psi_B$ ، چگالی احتمال در نیمه راه بین هسته‌ها صفر می‌شود و بستگی اضافی پدیدار نمی‌شود.

وقتی دو اتم نزدیک یکدیگر آورده می‌شوند، به ازای هر تراز اتم مجزا دو تراز انرژی جدا از هم تشکیل می‌شود. برای N اتم، به ازای هر اوربیتال اتم مجزا، N اوربیتال تشکیل می‌شود (شکل ۱۷).

با گرد هم آوردن اتمهای آزاد، برهم‌کنش کولنی بین مغز اتمها و الکترون، ترازهای انرژی را می‌شکافد



شکل ۱۶. (الف) ترسیم طرحوار توابع موج الکترونها روی دو اتم هیدروژن که به فاصله زیادی از هم قرار دارند. (ب) تابع موج حالت زمینه در فاصله کوتاهتر. (ج) تابع موج حالت برانگیخته.



شکل ۱۷. نوار ۱s حلقه‌ای از ۲۰ اتم هیدروژن؛ انرژیهای تک الکترونی در تقریب بستگی قوی با استفاده از انتگرال همپوشانی همسایه اول در معادله (۹) محاسبه شده است.

و آنها را در نوارهایی توزیع می‌کند. هر حالت اتم آزاد با عدد کوانتومی معلوم در بلور در نواری از انرژیها توزیع می‌شود. پهنای نوار با قدرت برهم‌کنش همپوشانی بین اتمهای همسایه متناسب است.

از حالت‌های d, p, \dots اتمهای آزاد نیز نوارهایی به وجود می‌آیند. حالت‌هایی که در اتم آزاد واگن‌اند، نوارهای مختلفی تشکیل خواهند داد. در گستره قابل توجه بردار موج، انرژی هر یک

از این نوارها، با انرژی نوار دیگر برابر نخواهد بود. نوارها ممکن است، به ازای مقادیر معینی از \mathbf{k} در منطقه بریلوئن برهم منطبق شوند.

تقریبی که از توابع موج اتمهای آزاد آغاز می‌کند، به تقریب بستگی قوی یا تقریب LCAO (ترکیب خطی اوربیتالهای اتمی^۱) معروف است. این تقریب برای الکترونها درونی اتمها کاملاً خوب است، ولی غالباً توصیف خوبی برای خود الکترونها رسانشی نیست. این تقریب برای توصیف تقریبی نوارهای d فلزهای واسط و نوارهای ظرفیتی بلورهای الماس‌گونه و گاز نادر به کار می‌رود.

فرض کنید حالت پایه الکترونی که در پتانسیل $U(\mathbf{r})$ اتم مجزا حرکت می‌کند $\varphi(\mathbf{r})$ ، یک حالت s باشد. بررسی نوارهای ناشی از ترازهای اتمی واگن (p, d, \dots) پیچیده‌تر است. اگر تأثیر یک اتم بر اتم دیگر کم باشد، با اختیار کردن

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_j C_{\mathbf{k}j} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \quad (4)$$

که در آن روی تمام نقاط شبکه جمع زده می‌شود، یک تابع موج تقریبی برای الکترون در تمامی بلور به دست می‌آوریم. فرض می‌کنیم پایه بسط شامل یک اتم باشد. اگر برای بلوری با N اتم $C_{\mathbf{k}j}$ را به صورت $C_{\mathbf{k}j} = N^{-1/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j}$ بگیریم، این تابع به شکل تابع بلوخ است، که در نتیجه داریم

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = N^{-1/2} \sum_j \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j) \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \quad (5)$$

ثابت می‌کنیم که (۵) به شکل تابع بلوخ است. انتقال \mathbf{T} را که دو نقطه شبکه را به هم وصل می‌کند، در نظر بگیریم:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}(\mathbf{r}+\mathbf{T})} &= N^{-1/2} \sum_j \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j) \varphi(\mathbf{r} + \mathbf{T} - \mathbf{r}_j) \\ &= \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}) N^{-1/2} \sum_j \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{T})] \varphi[\mathbf{r} - (\mathbf{r}_j - \mathbf{T})] \quad (6) \\ &= \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

که دقیقاً همان شرط بلوخ است.

با محاسبه عناصر قطری ماتریس هامیلتونی بلور، انرژی مرتبه اول را پیدا می‌کنیم:

$$\langle \mathbf{k} | H | \mathbf{k} \rangle = N^{-1} \sum_j \sum_m \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_m)] \langle \varphi_m | H | \varphi_j \rangle \quad (7)$$

که در آن $\varphi_m \equiv \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m)$. با نوشتن $\rho_m = \mathbf{r}_m - \mathbf{r}_j$ داریم

$$\langle \mathbf{k} | H | \mathbf{k} \rangle = \sum_m \exp(-i\mathbf{k} \cdot \rho_m) \int dV \varphi^*(\mathbf{r} - \rho_m) H \varphi(\mathbf{r}) \quad (۸)$$

اکنون از همه انتگرالهای (۸) بجز آنها که روی یک اتم یا بین اتمهای همسایه اولی هستند که با ρ به هم متصل می‌شوند، چشم‌پوشی می‌کنیم. می‌نویسیم

$$\int dV \varphi^*(\mathbf{r}) H \varphi(\mathbf{r}) = -\alpha; \quad \int dV \varphi^*(\mathbf{r} - \rho) H \varphi(\mathbf{r}) = -\gamma \quad (۹)$$

و به شرطی که $\langle \mathbf{k} | \mathbf{k} \rangle = ۱$ ، برای انرژی مرتبه اول داریم:

$$\langle \mathbf{k} | H | \mathbf{k} \rangle = -\alpha - \gamma \sum_m \exp(-i\mathbf{k} \cdot \rho_m) = \epsilon_{\mathbf{k}} \quad (۱۰)$$

وابستگی انرژی همپوشانی γ به فاصله بین اتمی ρ را می‌توان به‌طور صریح برای دو اتم هیدروژن در حالت $۱s$ حساب کرد. برحسب واحدهای انرژی ریذبرگ، $Ry = me^4 / 2\hbar^2$ داریم

$$\gamma(Ry) = 2(1 + \rho/a_0) \exp(-\rho/a_0) \quad (۱۱)$$

که در آن $a_0 = \hbar^2 / me^2$. انرژی همپوشانی با فاصله به‌طور نمایی کاهش می‌یابد. اتمهای همسایه اول برای ساختار مکعبی ساده در مکانهای زیر قرار دارند

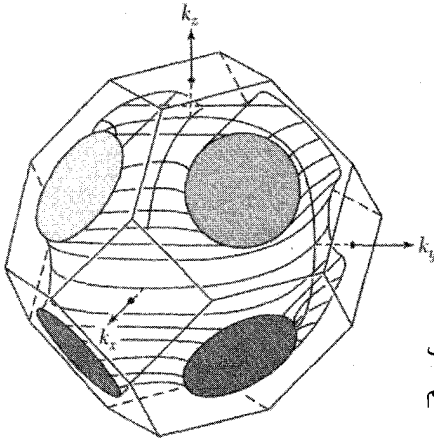
$$\rho_m = (\pm a, 0, 0); \quad (0, \pm a, 0); \quad (0, 0, \pm a) \quad (۱۲)$$

در نتیجه رابطه (۱۰) به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -\alpha - 2\gamma(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \quad (۱۳)$$

بنابراین انرژیها در نواری به پهنای ۱۲γ محصور می‌شوند. هر چه همپوشانی ضعیفتر باشد، نوار انرژی باریکتر است. یک سطح انرژی ثابت در شکل ۱۵ نشان داده شده است. برای $ka \ll ۱$ نتیجه می‌گیریم $\epsilon_{\mathbf{k}} \cong -\alpha - 6\gamma + \gamma k^2 a^2$. جرم مؤثر برابر است با $m^* = \hbar^2 / 2\gamma a^2$. وقتی انتگرال همپوشانی γ کوچک باشد، نوار باریک و جرم مؤثر زیاد خواهد بود.

یک اوربیتال از هر اتم آزاد در نظر گرفتیم و یک نوار $\epsilon_{\mathbf{k}}$ به‌دست آوردیم. در نواری که متناظر با یک تراز اتمی ناواگن است، تعداد اوربیتالها برای N اتم $۲N$ است. این نکته را می‌توان مستقیماً مشاهده کرد:



شکل ۱۸. سطح انرژی ثابت در ساختار بلوری fcc، در تقریب بستگی قوی همسایه اول. برای سطح نشان داده شده داریم $\epsilon = -\alpha + 2|\gamma|$

مقادیر k درون منطقه اول بریلوئن، توابع موج مستقل را تعریف می‌کنند. برای منطقه مکعبی ساده داریم $-\pi/a < k_x < \pi/a$ و جز اینها. حجم این منطقه $8\pi^3/a^3$ است. تعداد اوربیتالها (با منظور کردن هر دو سمگگیری اسپینی) به ازای واحد حجم فضای k برابر $V/4\pi^3$ است، در نتیجه تعداد اوربیتالها $2V/a^3$ است. در اینجا V حجم بلور و $1/a^3$ تعداد آنها در واحد حجم است. بنابراین $2N$ اوربیتال وجود دارد. برای ساختار fcc، با هشت همسایه اول، داریم

$$\epsilon_k = -\alpha - 8\gamma \cos \frac{1}{4}k_x a \cos \frac{1}{4}k_y a \cos \frac{1}{4}k_z a \quad (14)$$

برای ساختار fcc، با ۱۲ همسایه اول، داریم

$$\epsilon_k = -\alpha - 4\gamma (\cos \frac{1}{4}k_y a \cos \frac{1}{4}k_z a + \cos \frac{1}{4}k_z a \cos \frac{1}{4}k_x a + \cos \frac{1}{4}k_x a \cos \frac{1}{4}k_y a) \quad (15)$$

سطح انرژی ثابت در شکل ۱۸ نشان داده شده است.

روش ویگنر-سایتس

ویگنر و سایتس نشان دادند که برای فلزهای قلیایی بین توابع موج الکترون در اتم آزاد و مدل الکترون تقریباً آزاد برای ساختار نواری بلور هیچ ناسازگاری‌ای وجود ندارد. در بخش اعظم نوار، انرژی تقریباً همانند انرژی الکترون آزاد به بردار موج وابسته است. ولی تابع موج بلوخ، بر خلاف موج تخت، به گونه تابع موج اتمی، بار را روی مغزهای یونی مثبت انباشته می‌کند.

تابع موج بلوخ در معادله موج زیر صدق می‌کند

$$\left(\frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + U(\mathbf{r}) \right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (16)$$

با $\mathbf{p} \equiv -i\hbar\nabla$ داریم

$$\begin{aligned} \mathbf{p} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \hbar\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{p} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{p}^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= (\hbar\mathbf{k})^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (2\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{p}^2 u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

بنابراین تابع موج (۱۶) را می‌توان به صورت معادله‌ای برای $u_{\mathbf{k}}$ نوشت:

$$\left(\frac{1}{2m} (\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k})^2 + U(\mathbf{r}) \right) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (17)$$

در $\mathbf{k} = 0$ داریم $\psi_0 = u_0(\mathbf{r})$ ، که در آن $u_0(\mathbf{r})$ که دارای دوره شبکه است، با مغزهای یونی مواجه می‌شود و در نزدیکی آنها شبیه به تابع موج اتم آزاد به نظر می‌آید.

یافتن پاسخ در $\mathbf{k} = 0$ بسیار آسانتر است تا در \mathbf{k} عمومی، زیرا در $\mathbf{k} = 0$ پاسخ ناواکن دارای تقارن کامل $U(\mathbf{r})$ ، یعنی، تقارن کامل بلور است. سپس می‌توانیم با استفاده از $u_0(\mathbf{r})$ ، پاسخ تقریبی زیر را بسازیم

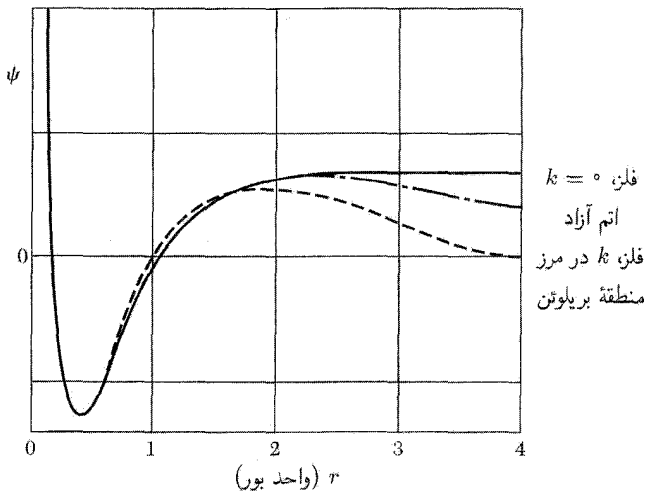
$$\psi_{\mathbf{k}} = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_0(\mathbf{r}) \quad (18)$$

این تابع به شکل تابع بلوخ است، ولی u_0 پاسخ دقیق رابطه (۱۷) نیست: u_0 تنها در صورتی یک پاسخ است که جمله برحسب $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ را حذف کنیم. این جمله غالباً، به‌گونه مسئله ۸، به صورت اختلال مورد بررسی قرار می‌گیرد. نظریه اختلال $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ که در مسئله ۸ تعمیم یافته، خصوصاً در مورد یافتن جرم مؤثر m^* در لبه نوار مفید است.

با توجه به آنکه تابع (۱۸) پتانسیل مغز یونی را به حساب می‌آورد، در مقایسه با موج تخت تقریب به مراتب بهتری را برای تابع موج صحیح فراهم می‌سازد. با اینکه مدولاسیونی که با $u_0(\mathbf{r})$ نشان داده می‌شود می‌تواند بسیار شدید باشد، انرژی پاسخ تقریبی، درست مانند انرژی موج تخت، به صورت $(\hbar\mathbf{k})^2 / 2m$ به \mathbf{k} وابسته است. چون u_0 پاسخی از معادله زیر است

$$\left(\frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + U(\mathbf{r}) \right) u_0(\mathbf{r}) = \epsilon_0 u_0(\mathbf{r}) \quad (19)$$

تابع (۱۸) دارای مقدار انرژی چشمداشتی $\epsilon_0 + (\hbar^2 k^2 / 2m)$ است. تابع $u_0(\mathbf{r})$ غالباً تصویر مطلوبی از توزیع بار درون یاخته ارائه می‌دهد.

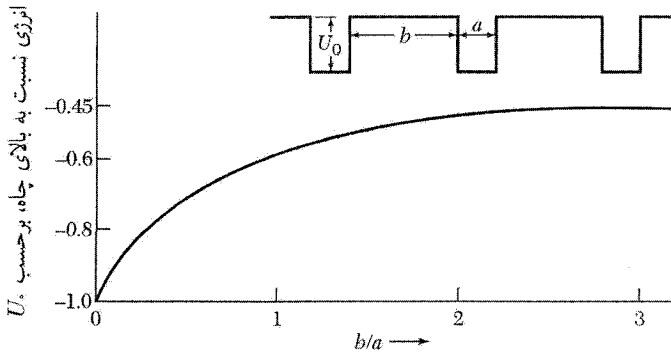


شکل ۱۹. توابع موج شعاعی برای اوربیتال $3s$ اتم سدیم آزاد و برای نوار رسانش $3s$ سدیم فلزی. این توابع موج که در اینجا بهنجار نیستند، با انتگرال‌گیری از معادله شرودینگر برای الکترون در چاه پتانسیل مغز یونی Na^+ به دست می‌آیند. برای اتم آزاد، تابع موج تحت شرط مرزی معمولی شرودینگر $\psi(r) \rightarrow 0$ در $r \rightarrow \infty$ ، انتگرال‌گیری می‌شود؛ ویژه مقدار انرژی $-5.15eV$ است. تابع موج برای بردار موج $k = 0$ در فلز تحت شرط مرزی ویگنر-سایتس است، یعنی هرگاه r در نیمه راه بین اتمهای همسایه باشد، $d\psi/dr = 0$ ؛ انرژی این اوربیتال $-8.2eV$ است که به اندازه قابل ملاحظه‌ای پایینتر از انرژی اتم آزاد است. اوربیتالهای واقع در مرز منطقه در سدیم پر نیستند و انرژی شان $+2.7eV$ است.

ویگنر و سایتس روش ساده و نسبتاً دقیقی برای محاسبه $u_0(\mathbf{r})$ به دست آوردند. شکل ۱۹ تابع موج ویگنر-سایتس را برای $k = 0$ در نوار رسانش $3s$ سدیم فلزی نشان می‌دهد. این تابع عملاً در بیش از $9r$ حجم اتم ثابت است. تا جایی که بتوان پاسخهای مربوط به k های بزرگتر را با $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})u_0(\mathbf{r})$ تقریب زد، توابع موج داخل نوار رسانش در بیشتر حجم اتم همانند موج تخت خواهند بود، ولی درون مغز یونی به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابند و نوسان می‌کنند.

انرژی چسبندگی. پایداری فلزهای ساده نسبت به اتمهای آزاد ناشی از آن است که در بلور انرژی اوربیتال بلوخ با $k = 0$ در مقایسه با انرژی اوربیتال ظرفیت پایه در اتم آزاد پایین می‌آید. این اثر در شکل ۱۹ برای سدیم و در شکل ۲۰ برای پتانسیل دوره‌ای خطی از چاههای مربعی جاذب نمایش داده شده است. انرژی اوربیتال پایه به‌ازای فاصله واقعی بین اتمها در فلز (به دلیل پایینتر بودن انرژی جنبشی) به مراتب پایینتر از انرژی مربوط به اتمهای منزوی است.

کاهش انرژی اوربیتال پایه انرژی بستگی را افزایش می‌دهد. کاهش انرژی اوربیتال پایه پیامدی از تغییر



شکل ۲۰. انرژی اوربیتال پایه ($k = 0$) برای الکترون در چاه پتانسیل مربعی دوره‌ای به عمق $|U_0| = 2\hbar^2/ma^2$ با نزدیک شدن چاهها به یکدیگر، انرژی پایین می‌آید. در اینجا a ثابت مانده و b تغییر کرده است. b/a بزرگ متناظر است با اتمهای مجزا.

شرایط مرزی روی تابع موج است: شرط مرزی شرودینگر برای اتم آزاد هنگامی که $r \rightarrow \infty$ به صورت $\psi(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ تعیین می‌شود. در بلور تابع موج برای $k = 0$ ، یعنی $u_0(\mathbf{r})$ دارای تقارن شبکه و حول $r = 0$ متقارن است. برای تحقق این امر، باید مشتق عمودی ψ روی هر صفحه که در نیمه راه بین اتمهای همسایه است، صفر باشد.

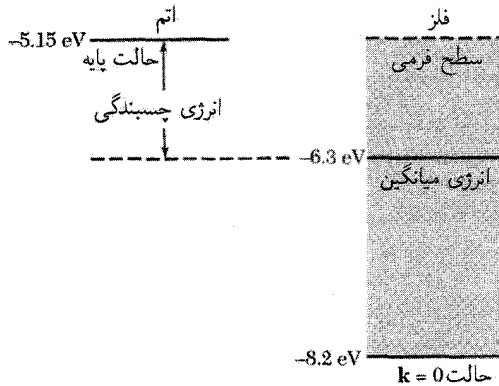
شکل کوچکترین یاخته و یگنر-سایتس را به تقریب کره می‌گیریم و شرط مرزی را به صورت زیر به کار می‌بریم

$$(d\psi/dr)_{r_0} = 0 \quad (20)$$

که در آن r_0 شعاع کره‌ای است که حجمش با حجم یاخته بسیط شبکه برابر باشد. در سدیم، r_0 برابر است با ۳٫۹۵ واحد بور، یا 0.8 \AA ؛ نصف فاصله همسایه اول برابر است با 1.86 \AA . تقریب کره‌ای برای ساختارهای fcc و bcc بد نیست. این شرط مرزی باعث می‌شود که تابع موج اوربیتال پایه در مقایسه با تابع موج حاصل از شرایط مرزی اتم آزاد انحنای بسیار کمتری داشته باشد. انحنای بسیار کمتر به معنای انرژی جنبشی بسیار کمتر است. در سدیم، دیگر اوربیتالهای پر نوار رسانش را می‌توان با تقریب زیاد با توابع موجی به شکل رابطه (۱۸) به این صورت نمایش داد

$$\psi_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_0(\mathbf{r}); \quad \epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

با استفاده از جدول ۱ فصل ۶، انرژی فرمی 3.1 eV است. انرژی جنبشی میانگین به ازای یک الکترون 0.6 eV انرژی فرمی با 1.9 eV است. از آنجا که در $k = 0$ داریم $\epsilon_0 = -8.2 \text{ eV}$ ، انرژی میانگین الکترون در



شکل ۲۱. انرژی چسبندگی فلز سدیم برابر است با اختلاف بین میانگین انرژی الکترون در فلز (-6.3eV) و انرژی حالت پایه الکترون ظرفیتی $3s$ در اتم آزاد (-5.15eV). نسبت به یون Na^+ به اضافه الکترون آزاد در فاصله بینهایت.

مقایسه با -5.15eV برای انرژی الکترون ظرفیتی اتم آزاد برابر است با -6.3eV با $\epsilon_k = -8.2 + 1.9 = -6.3\text{eV}$ (شکل ۲۱).

بنابراین پایداری فلز سدیم را نسبت به اتم آزاد حدود 1eV برآورد می‌کنیم. این نتیجه با مقدار تجربی 1.3eV به خوبی سازگار است.

روشهای شبه پتانسیل

توابع موج الکترون رسانشی معمولاً در ناحیه بین مغزهای یونی تغییرات هموار دارند، ولی در ناحیه مغزها، ساختارگرهی پیچیده‌ای دارند. این رفتار توسط اوربیتال پایه سدیم در شکل ۱۹ نمایش داده شده است. اگرگره‌های تابع موج الکترون رسانشی را در ناحیه مغز ناشی از نیاز به متعام بودن این تابع بر توابع موج الکترونیهای مغز بگیریم، برداشت مفیدی حاصل می‌شود. این همه از معادله شرودینگر حاصل می‌شود، ولی می‌توانیم ببینیم که برای متعام بودن اوربیتال رسانشی $3s$ در Na بر دو اوربیتال مغز، یکی $1s$ بدون گره و دیگری $2s$ با یک گره، به انعطاف‌پذیری دو گره در آن نیاز داریم.

انرژی پتانسیلی که در بیرون مغز بر الکترونیهای رسانشی عمل می‌کند، نسبتاً ضعیف است: این انرژی پتانسیل، تنها پتانسیل کولنی مغزهای یونی با تک بار مثبت است که به طور قابل ملاحظه‌ای توسط استتار الکتروستاتیکی دیگر الکترونیهای رسانشی کاهش یافته است (فصل ۱۴). در این ناحیه بیرونی، توابع موج الکترون رسانشی مانند امواج تخت تغییرات هموار دارند.

اگر اوربیتالهای رسانشی در این ناحیه بیرونی تقریباً به شکل امواج تخت باشند، انرژی باید تقریباً

مانند رابطه $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$ برای الکترونهاى آزاد، به بردار موج وابسته باشد. ولی در ناحیه مغز، که اوربیتالهای رسانشی اصلاً شبیه به امواج تخت نیستند، این اوربیتالها را چگونه بررسی کنیم؟ آنچه در مغز می‌گذرد عمدتاً با وابستگی ϵ به \mathbf{k} ارتباطی ندارد. خاطر نشان می‌کنیم که انرژی را می‌توانیم با اعمال عملگر هامیلتونی بر یک اوربیتال در هر نقطه از فضا محاسبه کنیم. اعمال این عملگر در ناحیه بیرونی، انرژی را تقریباً برابر با انرژی الکترون آزاد می‌دهد.

این استدلال به‌طور طبیعی به این نظر رهنمون می‌شود که می‌توانیم انرژی پتانسیل واقعی (و پوسته‌های پر) را در ناحیه مغز با انرژی پتانسیل مؤثری تعویض کنیم که در بیرون مغز همان توابع موجی را بدهد که مغزهای یونی واقعی می‌دهند. شگفت‌انگیز است که درمی‌یابیم پتانسیل مؤثر یا شبه‌پتانسیلی که این نیاز را برآورده می‌کند، تقریباً صفر است. این نتیجه‌گیری درباره، شبه‌پتانسیلها توسط شمار زیادی از تجربه‌های عملی و نیز استدلالهای نظری تأیید شده است. از این نتیجه به قضیه حذف یاد می‌شود. شبه‌پتانسیل هر مسئله نه منحصر به فرد است و نه دقیق، ولی می‌تواند بسیار خوب باشد. در مدل مغز خالی (ECM^۲)، حتی می‌توانیم شبه‌پتانسیل استتار نشده را درون کره‌ای به شعاع R_e صفر بگیریم:

$$U(r) = \begin{cases} 0 & \text{برای } r > R_e \\ -e^2/r & \text{برای } r < R_e \end{cases} \quad (21)$$

اکنون این پتانسیل را باید به‌صورتی استتار کرد که در فصل ۱۰ توصیف می‌شود. هر مؤلفه $U(\mathbf{K})$ مربوط به $U(r)$ را باید بر ثابت دی‌الکتریک $\epsilon(\mathbf{k})$ گاز الکترونی تقسیم کرد. اگر تنها برای مثال تابع دی‌الکتریک توماس-فرمی (رابطه (۳۳) فصل ۱۴) را به‌کار ببریم، شبه‌پتانسیل استتار شده‌ای را به‌دست می‌آوریم، که در شکل ۲۲ (الف) رسم شده است.

شبه‌پتانسیل همان‌گونه که ترسیم شده بسیار ضعیفتر از پتانسیل واقعی است، ولی این شبه‌پتانسیل به‌گونه‌ای تنظیم شده که تابع موج در ناحیه بیرونی، تقریباً همانند تابع موج مربوط به پتانسیل واقعی باشد. به

I. J. C Phillips and L. Kleinman, Phys. Rev. **116**, 287 (1959); E. Antoncik, J. Phys. Chem. Solids **10**, 314 (1959).

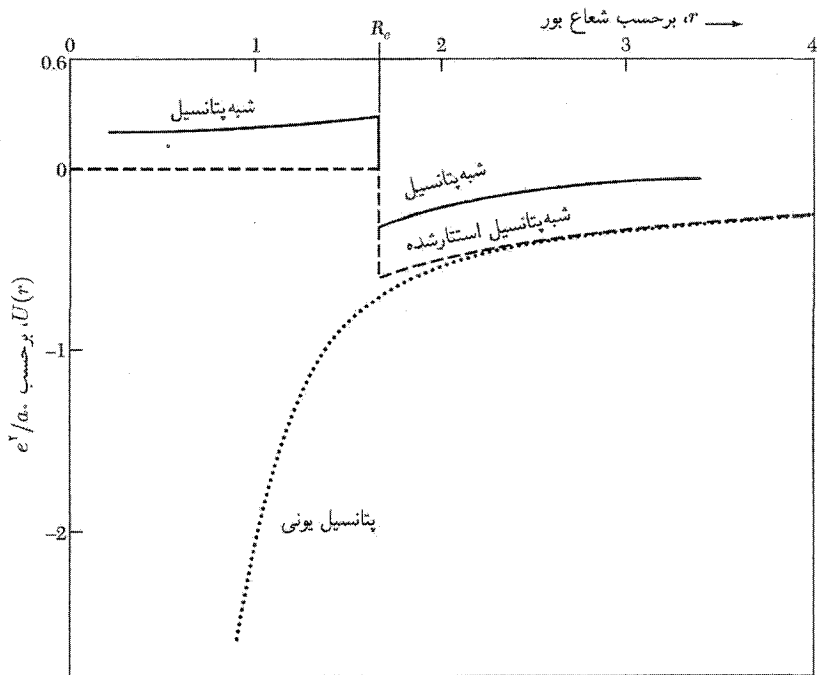
و نظریه عمومی شبه‌پتانسیلها در

B. J. Austin, V. Heine, and L. J. Sham, Phys. Rev. **127**, 276 (1962);

بحث شده است. همچنین جلد ۲۴ از *Solid state physics* را ملاحظه کنید. سالهای زیادی است که سودمندی مدل مغز خالی شناخته شده است: این امر به

E. Fermi, Nuovo Cimento **2**, 157 (1934); H. Hellmann, Acta Physicochimica URSS **1**, 913 (1935); H. Hellmann and W. Kassatotschkin, J. Chem. Phys. **4**, 324 (1936)

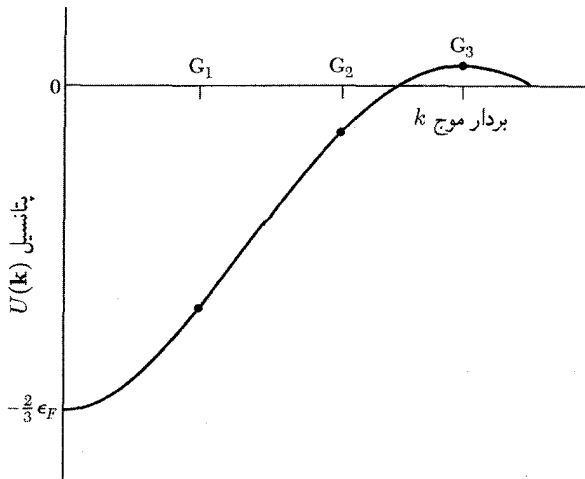
باز می‌گردد که چنین نوشتند «چون میدانی که از این طریق برای یون تعیین شد، نسبتاً هموار است، در اولین تقریب کافی است که الکترون ظرفیتی را در شبکه معادل با موج تخت قرار دهیم.»



شکل ۲۲ الف. شبه پتانسیل برای سدیم فلزی بر اساس مدل مغز خالی که توسط تابع دی الکتریک توماس-فرمی استتار شده است. محاسبات برای شعاع مغز خالی $R_e = 1.66a_0$ که در آن a_0 شعاع بور است، و برای پارامتر استتار $k_s a_0 = 0.79$ انجام شده است. منحنی خط چین پتانسیل استتار شده مفروض را به شکل رابطه (۲۱)، نمایش می دهد. منحنی نقطه چین پتانسیل واقعی مغزیونی است؛ مقادیر دیگر $U(r)$ به ازای r برابر 0.15° ، 0.4° ، و 0.7° ، به ترتیب، عبارت اند از 5° ، 11.6° ، و 46° -. بنابراین پتانسیل واقعی یون (که از طریق برازش ترازهای انرژی اتم آزاد انتخاب می شود) بسیار بیشتر از شبه پتانسیل است، در $r = 0.15^\circ$ ، پتانسیل واقعی بیش از 20° برابر شبه پتانسیل است.

زبان نظریه پراکندگی، انتقالهای فاز شبه پتانسیل را چنان تنظیم می کنیم که با انتقالهای فاز پتانسیل واقعی جور شود.

محاسبه ساختار نواری تنها به مؤلفه های فوریه شبه پتانسیل در بردارهای شبکه وارون بستگی دارد. معمولاً برای به دست آوردن یک ساختار نواری خوب، تنها به چند ضریب $U(G)$ نیاز است؛ $U(G)$ را در شکل ۲۲ (ب) ببینید. این ضرایب را گاهی از پتانسیلهای مدلی حساب می کنند، و گاهی آنها را با برازش ساختارهای نواری آزمونی با نتایج اندازه گیریهای اپتیکی به دست می آورند. مقادیر خوبی برای $U(0)$ می توان از اصول اولیه به دست آورد؛ در (معادله ۴۳) فصل ۱۴ نشان داده شده است که برای پتانسیل کولنی استتار شده داریم $U(0) = -\frac{2}{3}\epsilon_F$.



شکل ۲۲ ب. یک شبه پتانسیل نوعی در فضای وارون. نقطه‌ها مقادیر $U(\mathbf{k})$ را برای بردار موجهایی نشان می‌دهند که با بردارهای شبکه وارون، \mathbf{G} ، برابرند. پتانسیل به ازای \mathbf{k} بسیار کوچک به مقدار $(-2/3)\epsilon_F$ ضربدر انرژی فرمی نزدیک می‌شود. این مقدار حد یون استوار شده برای فلزهاست.

در روش شبه پتانسیل تجربی (EPM)^۱ که موفقیت قابل ملاحظه‌ای داشته است، ساختار نواری با استفاده از چند ضریب $U(\mathbf{G})$ استنتاج می‌شود که از برازشهای نظری با اندازه‌گیریهای بازتابش و جذب اپتیکی بلورها، که در فصل ۱۵ مورد بحث قرار می‌گیرند، به دست می‌آیند. به کمک توابع موجی که EPM تولید می‌کند، می‌توان نگاشتهای چگالی بار را رسم کرد (شکل ۱۱ فصل ۳). نتایج با یافته‌های پراش پرتو x سازگاری عالی‌ای دارند؛ نوع پیوندها را می‌توان به کمک چنین نگاشتهایی درک کرد. برای ترکیبها و ساختارهای جدید پیشنهادی، این نگاشتها ابزار پیش‌گویی‌کننده با ارزش بالایی‌اند.

سهام چند نوع یونی که حضور دارند، در مقدارهای EPM برای ضرایب $U(\mathbf{G})$ اغلب جمع‌پذیرند. بنابراین می‌توان با استفاده از نتایج مربوط به ساختارهای شناخته شده $U(\mathbf{G})$ ‌های مربوط به ساختارهای کاملاً جدید را به دست آورد. علاوه بر این، با توجه به اینکه می‌توان از شکل منحنی $U(r)$ وابستگی $U(\mathbf{G})$ را به بردشهای کوچک \mathbf{G} به دست آورد، این امکان وجود دارد که وابستگی ساختار نواری را به فشار تعیین کرد.

اغلب می‌توان ساختار نواری، انرژی چسبندگی، ثابتهای شبکه، و مدولهای حجمی را از اصول اولیه محاسبه کرد. در چنین محاسبات شبه پتانسیل پیشینی^۲، دروندادهای اصلی عبارت‌اند از نوع ساختار بلور و عدد اتمی، همراه با تقریبهای نظری کاملاً آزمون شده برای جمله‌های انرژی تبدالی. این شیوه همانند محاسبه

از عدد اتمی تنها نیست، بلکه منطقی‌ترین اساس برای محاسبات از اصول اولیه است. نتایج مربوط به بین^۱ و کوهن^۲ در جدول زیر با تجربه مقایسه شده‌اند.

مدول حجمی (Mbar)	انرژی چسبندگی (eV)	ثابت شبکه (Å)	سیلیسیم
۰٫۹۸	۴٫۸۴	۵٫۴۵	محاسبه شده
۰٫۹۹	۴٫۶۳	۵٫۴۳	تجربی
			ژرمانیم
۰٫۷۳	۴٫۲۶	۵٫۶۶	محاسبه شده
۰٫۷۷	۳٫۸۵	۵٫۶۵	تجربی
			الماس
۴٫۳۳	۸٫۱۰	۳٫۶۰	محاسبه شده
۴٫۴۳	۷٫۳۵	۳٫۵۷	تجربی

روشهای تجربی در بررسیهای سطح فرمی

روشهای تجربی مؤثری برای تعیین سطح فرمی ایجاد شده‌اند. در این روشها، مغناطوسمقاومت، اثر پوستی بی‌هنجار، تشدید سیکلوترونی، آثار هندسی مغناطوس-اوستیکی، اثر شوینیکوف-دوهاس، و اثر دوهاس-ون آلفن مطرح می‌شوند. نابودی پوزیترون، پراکندگی کامپتون، و اثر کان^۳ اطلاعات بیشتری در مورد توزیع تکانه به دست می‌دهند.

ما برآنیم یک روش را به‌طور نسبتاً کامل بررسی کنیم. همه این روشها مفیدند، ولی به تحلیل نظری مفصلی نیاز دارند. اثر دوهاس-ون آلفن را برمی‌گزینیم، زیرا این اثر دوره‌ای بودن مشخصه ویژگیهای فلز را در میدان مغناطیسی یکنواخت برحسب $1/B$ به خوبی نمایش می‌دهد.

کوانتشن مدارها در میدان مغناطیسی

تکانه \mathbf{p} ذره در میدان مغناطیسی مجموع دو بخش است (پوست z)، تکانه جنبشی $m\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k}$ جنبشی \mathbf{p} و تکانه پتانسیلی یا تکانه میدانی $q\mathbf{A}/c = \mathbf{p}$ میدانی، که در آن q بار است. پتانسیل برداری با $\mathbf{B} = \text{curl}\mathbf{A}$

به میدان مغناطیسی مربوط می‌شود. تکانه کل برابر است با

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_{\text{جنبشی}} + \mathbf{p}_{\text{میدان}} = \hbar \mathbf{k} + \frac{q\mathbf{A}}{c} \quad (۲۲)$$

(CGS)

در SI، ضریب c^{-1} حذف می‌شود.

با دنبال کردن رهیافت نیمه‌کلاسیکی انزاگر^۱ و لیفشیتز^۲، فرض می‌کنیم که در میدان مغناطیسی مدارها طبق رابطه بور-زومرفلد به صورت زیر، کوانتیده‌اند

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = (n + \gamma) 2\pi \hbar \quad (۲۳)$$

که در آن n عدد درستی است و γ تصحیح فازی است که برای الکترونهاي آزاد برابر $\frac{1}{4}$ است. سپس

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = \oint \hbar \mathbf{k} \cdot d\mathbf{r} + \frac{q}{c} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \quad (۲۴)$$

معادله حرکت ذره‌ای با بار q در میدان مغناطیسی به صورت زیر است

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \frac{q}{c} \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B} \quad (الف ۲۵)$$

نسبت به زمان انتگرال می‌گیریم و صرف‌نظر از یک ثابت افزودنی که در نتیجه نهایی سهمی ندارد، به دست می‌آوریم

$$\hbar \mathbf{k} = \frac{q}{c} \mathbf{r} \times \mathbf{B}$$

بنابراین یکی از انتگرالهای مسیر در رابطه (۲۴) عبارت است از

$$\oint \hbar \mathbf{k} \cdot d\mathbf{r} = \frac{q}{c} \oint \mathbf{r} \times \mathbf{B} \cdot d\mathbf{r} = -\frac{q}{c} \mathbf{B} \cdot \oint \mathbf{r} \times d\mathbf{r} = -\frac{2q}{c} \Phi \quad (ب ۲۵)$$

که در آن Φ شار موجود درون مدار در فضای حقیقی است. از این نتیجه هندسی استفاده کرده‌ایم که

$$\oint \mathbf{r} \times d\mathbf{r} = 2 \times (\text{مساحت محصور در مدار})$$

انتگرال مسیر دیگر در رابطه (۲۴) با استفاده از قضیه استوکس برابر است با

$$\frac{q}{c} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \frac{q}{c} \int \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\boldsymbol{\sigma} = \frac{q}{c} \int \mathbf{B} \cdot d\boldsymbol{\sigma} = \frac{q}{c} \Phi \quad (ج ۲۵)$$

در اینجا $d\boldsymbol{\sigma}$ عنصر مساحت در فضای واقعی است. انتگرال مسیر تکانه مجموع روابط (ب ۲۵) و (ج ۲۵) است:

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = -\frac{q}{c} \Phi = (n + \gamma) 2\pi \hbar \quad (۲۶)$$

نتیجه می‌شود که مدار الکترون به‌گونه‌ای کوانتیده است که شار گذرنده از آن برابر باشد با

$$\Phi_n = (n + \gamma)(2\pi\hbar c/e) \quad (27)$$

واحد شار برابر است با Tm^2 یا 10^{-7}G cm^2 یا $1.4 \times 10^{-7} \text{G cm}^2$.

در اثر دوهاس-ون آلفن که در ادامه مطرح می‌شود به مساحت مدار در فضای بردار موج نیاز داریم. در رابطه (۲۷) شاری که در فضای حقیقی از مدار می‌گذرد، به‌دست آوردیم. از رابطه (۲۵ الف) می‌دانیم که عنصر خط Δr در صفحه عمود بر \mathbf{B} با رابطه $\Delta r = (\hbar c/eB)\Delta k$ به Δk مربوط می‌شود، نتیجه مساحت S_n در فضای \mathbf{k} با رابطه زیر به مساحت A_n مدار در فضای \mathbf{r} مربوط می‌شود

$$A_n = (\hbar c/eB)^2 S_n \quad (28)$$

از معادله (۲۷) نتیجه می‌شود که

$$\Phi_n = \left(\frac{\hbar c}{e}\right)^2 \frac{1}{B} S_n = (n + \gamma) \frac{2\pi\hbar c}{e} \quad (29)$$

بنابراین مساحت مدار در فضای \mathbf{k} در رابطه زیر صدق می‌کند

$$S_n = (n + \gamma) \frac{2\pi e}{\hbar c} B \quad (30)$$

در آزمایشهای سطح فرمی ممکن است آن نمونه ΔB مورد نظر باشد که به‌ازای آن دو مدار متوالی n و $n+1$ روی سطح فرمی در فضای \mathbf{k} دارای مساحت یکسان باشند. با استفاده از (۳۰)، این مساحتها وقتی با هم مساوی‌اند که

$$S \left(\frac{1}{B_{n+1}} - \frac{1}{B_n} \right) = \frac{2\pi e}{\hbar c} \quad (31)$$

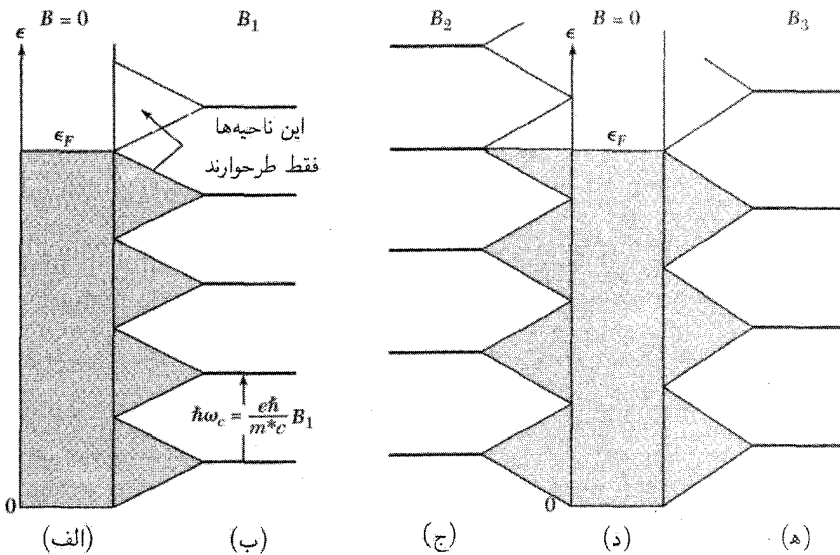
به این نتیجه مهم رسیده‌ایم که نواحی مساوی در $1/B$ مدارهای همانند را به‌وجود می‌آورند. این دوره‌ای بودن برحسب $1/B$ ، خلصت برجسته آثار مغناطونوسانی در فلزها در دماهای پایین است: مقاومت ویژه، پذیرفتاری، ظرفیت گرمایی.

جمعیت مدارها روی سطح فرمی یا در نزدیکی آن، با تغییر B نوسان می‌کند و آثار بسیار گوناگونی را به‌وجود می‌آورد. با استفاده از دوره نوسان، سطح فرمی را بازسازی می‌کنیم. نتیجه (۳۰) مستقل از پیمانه برداری به‌کار برده شده در عبارت (۲۲) برای تکانه است؛ یعنی \mathbf{p} ناوردای پیمانه‌ای نیست، ولی S_n هست. در مورد ناوردایی پیمانه‌ای در فصل ۱۰ و در پیوست ز فراتر بحث می‌شود.

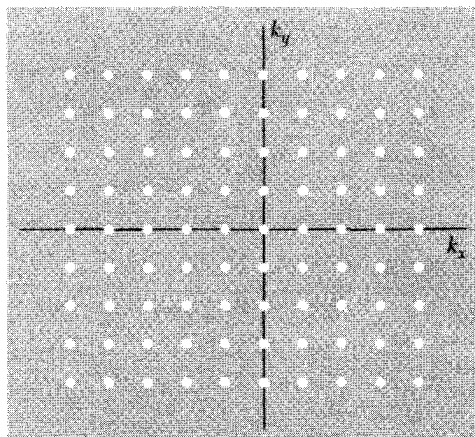
اثر دوهااس-ون آلفن

اثر دوهااس-ون آلفن عبارت است از نوسان گشتاور مغناطیسی فلز به صورت تابعی از شدت میدان مغناطیسی استاتیکی. این اثر را می توان در دماهای پایین، در نمونه های خالص در میدانهای مغناطیسی قوی مشاهده کرد: نمی خواهیم کوانتیدگی مدارهای الکترون در اثر برخوردها محو شود، و نمی خواهیم نوسانهای جمعیت توسط جمعیت گرمایی مدارهای مجاور متوسط گیری و حذف شوند.

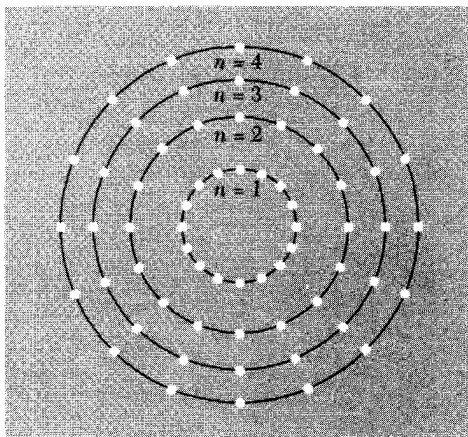
تحلیل اثر دوهااس-ون آلفن برای صفر در شکل ۲۳ داده شده است. از اسپین الکترونها چشم پوشی می کنیم. بررسی برای دستگاه دوبعدی (۲D) انجام شده است؛ در ۳D، اگر میدان مغناطیسی موازی محور z باشد، تنها باید تابع موج ۲D را در $\exp(ik_z z)$ ضرب کنیم. بنابراین رابطه (۳۰) مساحت مدار در فضای k_x و k_y کوانتیده است. مساحت بین مدارهای متوالی برابر است با



شکل ۲۳. توضیح اثر دوهااس-ون آلفن برای گاز الکترون آزاد در دو بعد در میدان مغناطیسی. اوربیتالهای پر در دریای فرمی در غیاب میدان مغناطیسی در (الف) سایه زده شده اند. ترازهای انرژی در میدان مغناطیسی در (ب)، (ج)، و (ه) نشان داده شده اند. در (ب) میدان به گونه ای دارای شدت B_1 است که انرژی کل الکترونها برابر انرژی کل آنها در غیاب میدان مغناطیسی است: تعداد الکترونهايي که در اثر کوانتش مداري در میدان مغناطیسی B_1 افزایش انرژی می یابند برابر است با تعداد الکترونهايي که کاهش انرژی یافته اند. وقتی میدان را تا B_2 افزایش می دهیم، انرژی الکترونی کل افزایش می یابد، زیرا انرژی بالاترین الکترونها زیاد می شود. در (ه) برای میدان B_3 ، بار دیگر انرژی کل برابر انرژی کل در $B = 0$ است. انرژی کل در نقاطی چون B_1 ، B_3 ، B_5 ، و... کمینه، و در نزدیکی نقاطی چون B_2 ، B_4 ، B_6 بیشینه است.



(الف)



(ب)

شکل ۲۴. (الف) اوربیتالهای الکترونی مجاز در دو بعد در غیاب میدان مغناطیسی. (ب) در میدان مغناطیسی، می توان نقاطی را که نمایشگر اوربیتالهای الکترونیهای آزادند، مقید به دایرههایی در صفحه $k_x k_y$ پیشین در نظر گرفت. دایرههای متوالی متناظرند با مقادیر متوالی عدد کوانتومی n در انرژی $(n - \frac{1}{2})\hbar\omega_c$. مساحت بین دو دایره متوالی برابر است با

$$(CGS) \quad \pi \Delta(k^2) = 2\pi k(\Delta k) = (2\pi m \hbar^2) \Delta \epsilon = 2\pi m \omega_c / \hbar - 2\pi eB / \hbar c$$

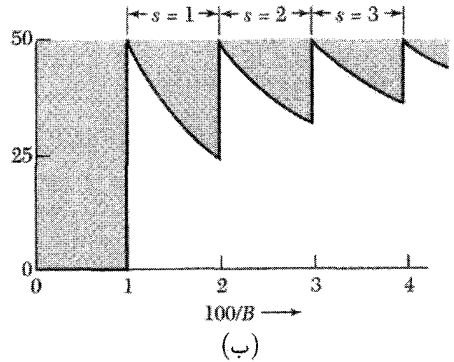
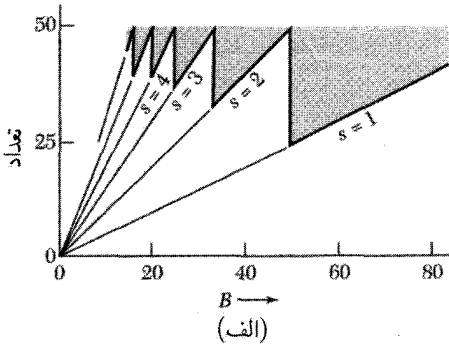
موقعیت زاویه ای نقاط اهمیتی ندارد. تعداد اوربیتالهای روی دایره ثابت و برابر است با مساحت بین دایرههای متوالی ضرب در تعداد اوربیتالها به ازای واحد مساحت در (الف) بدون در نظر گرفتن اسپین الکترونها، یعنی $(2\pi eB / \hbar c)(L / 2\pi)^2 = L^2 eB / 2\pi \hbar c$.

$$\Delta S = S_n - S_{n-1} = 2\pi eB / \hbar c \quad (32)$$

برای یک نمونه مربعی به ضلع L ، مساحتی که یک تک اوربیتال در فضای k اشغال می کند، با چشم پوشی از اسپین، برابر است با $(2\pi / L)^2$. تعداد مدارهای الکترون آزادی که در یک تک تراز مغناطیسی ادغام می شوند، با استفاده از معادله (۳۲) برابر است با

$$D = (2\pi eB / \hbar c)(L / 2\pi)^2 = \rho B \quad (33)$$

که در آن $\rho = eL^2 / 2\pi \hbar c$ ، مانند شکل ۲۴. چنین تراز مغناطیسی ای را تراز لانداؤ می خوانند. وابستگی تراز فرمی به B مهم و حساس است. در صفر مطلق، برای دستگامی حاوی N الکترون، ترازهای لانداؤ تا یک عدد کوانتومی مغناطیسی که آن را با s نشان می دهیم به طور کامل پر می شوند، s یک عدد درست مثبت است. اوربیتالهای تراز بالاتر $s + 1$ تا حدی اشغال می شوند که برای جادادن الکترونها لازم است. تراز فرمی، در صورتی که الکترونها در تراز $s + 1$ لانداؤ باشند، در این تراز واقع می شود؛ با



شکل ۲۵. (الف) خط درشت تعداد ذرات در ترازهایی را می‌دهد که برای دستگاه دوعبدهی با $N = 50$ و $\rho = 50^\circ$ در میدان مغناطیسی B به‌طور کامل اشغال شده‌اند. مساحت سایه‌زده شده تعداد ذرات در ترازهایی را می‌دهد که به‌طور جزئی اشغال شده‌اند. مقدار s نمایشگر عدد کوانتومی بالاترین تراز است که به‌طور کامل اشغال شده است. بنابراین در $B = 40$ داریم $s = 2$ ؛ ترازهای $n = 1$ و $n = 2$ پرند و 10° ذره در تراز $n = 3$ وجود دارد. در $B = 50$ ، تراز $n = 3$ خالی است. (ب) وقتی همین نقاط برحسب $1/B$ رسم شوند، دوره‌ای بودن برحسب $1/B$ آشکار می‌شود.

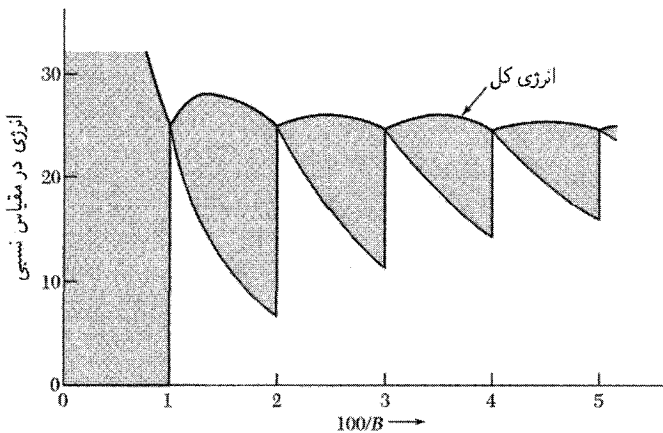
زیاد شدن میدان مغناطیسی، الکترونها به ترازهای پایینتر می‌روند. وقتی تراز $s + 1$ خالی شد، تراز فرمی به‌طور ناگهانی به تراز یکی پایینتر s می‌رود.

الکترونها به این دلیل به ترازهای لاندائوی پایینتر می‌روند که واکنی این ترازها، D ، همان‌گونه که در شکل ۲۵ نشان داده شده است، با افزایش B زیاد می‌شود. وقتی B افزایش می‌یابد، به‌ازای مقادیری از B ، عدد کوانتومی بالاترین تراز اشغال شده به‌طور ناگهانی یک واحد کاهش می‌یابد. در این میدانهای مغناطیسی بحرانی که با B_s شاخص‌گذاری می‌کنیم، هیچ تراز در صفر مطلق به‌طور جزئی اشغال نشده است، در نتیجه داریم

$$s\rho B_s = N \quad (34)$$

در B_s تعداد ترازهای پرضرب در واکنی باید برابر تعداد الکترونها، N ، باشد.

برای آنکه دوره‌ای بودن انرژی را با تغییر B نشان دهیم، از این نتیجه استفاده می‌کنیم که انرژی تراز لاندائو با عدد کوانتومی مغناطیسی n برابر است با $E_n = (n - \frac{1}{4})\hbar\omega_c$ که در آن $\omega_c = eB/m^*c$ بسامد سیکلوترونی است. این نتیجه برای E_n از تشابه بین مدارهای تشدید سیکلوترونی و نوسانگر هماهنگ ساده به‌دست می‌آید، با این تفاوت که در اینجا مناسبتر دیده‌ایم که به‌جای $n = 0$ از $n = 1$ شمارش را آغاز کنیم.



شکل ۲۶. منحنی بالایی، انرژی الکترونی کل برحسب $1/B$ است. نوسانهای انرژی را می توان توسط اندازه گیری گشتاور مغناطیسی، که با $-\partial U/\partial B$ داده می شود، آشکار کرد. وقتی میدان افزایش می یابد. ترازهای اوربیتالی متوالی تراز فرمی را قطع می کنند و در نتیجه ویژگیهای گرمایی و ترابردی فلز نیز به نوسان درمی آید. ناحیه سایه دار در شکل سهم ترازهایی را می دهد که به طور جزئی اشغال شده اند. پارامترهای این شکل با پارامترهای شکل ۲۵ همانندند، واحد B را به گونه ای برگزیده ایم که داشته باشیم $B = \hbar\omega_c$.

انرژی کل الکترونها در ترازهای کاملاً اشغال شده برابر است با

$$\sum_{n=1}^s D\hbar\omega_c\left(n - \frac{1}{4}\right) = \frac{1}{4}D\hbar\omega_c s^2 \quad (35)$$

که در آن D تعداد الکترونها در هر تراز است. انرژی کل الکترونها واقع در تراز $s + 1$ که به طور جزئی اشغال شده برابر است با

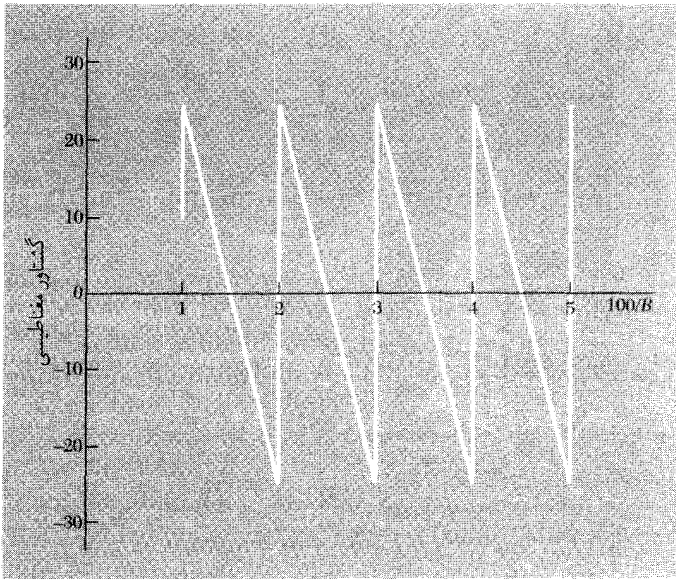
$$\hbar\omega_c\left(s + \frac{1}{4}\right)(N - sD) \quad (36)$$

که در آن sD تعداد الکترونها در ترازهای پر پاینتر است. انرژی کل N الکترون، همان گونه که در شکل ۲۶ نشان داده شده، مجموع روابط (۳۵) و (۳۶) است.

گشتاور مغناطیسی دستگاه در صفر مطلق با $\mu = -\partial U/\partial B$ داده می شود. در اینجا این گشتاور یک تابع نوسانی از $1/B$ است (شکل ۲۷). این گشتاور مغناطیسی نوسانی گاز فرمی در دماهای پایین، اثر دوهاس-ون آلفن است. از رابطه (۳۱) می بینیم که نوسانها در بازه های مساوی $1/B$ ظاهر می شوند به گونه ای که

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi e}{\hbar cS} \quad (37)$$

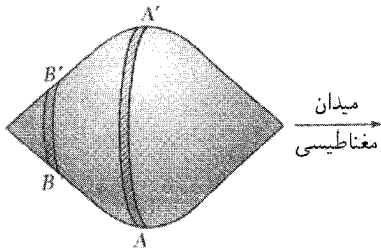
که در آن S مساحت فرین سطح فرمی عمود بر جهت B است (ادامه مطلب را ببینید). با اندازه گیریهای



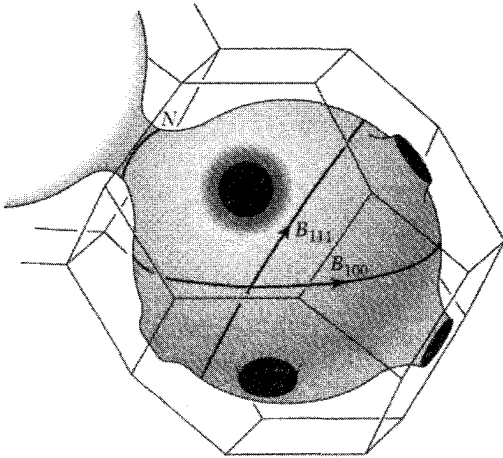
شکل ۲۷. در صفر مطلق گشتاور مغناطیسی با $-\partial U/\partial B$ داده می‌شود. انرژی رسم شده در شکل ۲۶ به گشتاور مغناطیسی که در اینجا نشان داده شده است منجر می‌شود، که یک تابع نوسانی از $1/B$ است. در نمونه‌های ناخالص، بخشی از این نوسانها از بین می‌روند، زیرا دیگر ترازهای انرژی به صورت تیزی مشخص نمی‌شوند.

$\Delta(1/B)$ ، مساحت‌های فرین متناظر S را به دست می‌آوریم؛ به این وسیله می‌توان به اطلاعات زیادی درباره شکل و اندازه سطح فرمی دست یافت.

مدارهای فرین. یک نکته ظریف در تعبیر اثر دوهااس-ون آلفن وجود دارد. برای یک سطح فرمی به شکل عمومی، مقاطع مربوط به مقادیر متفاوت k_B ، دوره‌های متفاوت دارند. در اینجا k_B مؤلفه k در راستای میدان مغناطیسی است. پاسخ برابر است با مجموع سهم‌های تمامی مقاطع یا همه مدارها، ولی پاسخ برتر دستگاه از مدارهایی ناشی می‌شود که دوره آنها نسبت به تغییرات کوچک k_B مانا باشد. چنین مدارهایی را مدارهای فرین می‌نامند. بنابراین در شکل ۲۸، مقطع AA' بر دوره سیکلوترونی مشاهده شده حاکم است. این بحث را می‌توان به شکل ریاضی مطرح کرد، ولی اثبات آن را در اینجا ارائه نمی‌کنیم (صفحه ۲۲۳ از *QTS*). این موضوع اساساً مسئله حذف فاز است، سهم مدارهای غیرفرین متفاوت حذف می‌شود، ولی در نزدیکی فرینه‌ها، فاز فقط به‌کندی تغییر می‌کند و یک علامت خالص از این مدارها حاصل می‌شود. حتی از سطوح فرمی پیچیده نیز تشدیدهای تیز حاصل می‌شوند، زیرا آزمایش مدارهای فرین را برمی‌گزینند. سطح فرمی مس. سطح فرمی مس (شکل ۲۹) به‌طور بارزی غیرکروی است: هشت‌گردن با وجوه شش



شکل ۲۸. مدارهای واقع در مقطع AA' مدارهای فرین‌اند: دورهٔ سیکلوترونی روی یک مقطع مناسب از سطح فرمی تقریباً ثابت است. دورهٔ مدارهای دیگری که بر مقطعی مانند BB' واقع‌اند، روی این مقطع تغییر می‌کنند.



شکل ۲۹. سطح فرمی مس. منطقهٔ بریلوئن ساختار fcc، هشت‌وجهی ناقصی است که در فصل ۲ به‌دست آمد. سطح فرمی در مرکز وجوه شش‌گوش منطقه، در جهت‌های $[111]$ در فضای k ، با مرز تماس پیدا می‌کند. دو مدار فرین «شکمی»، که با B مشخص شده، نشان داده شده‌اند؛ مدار فرین «گردنی» با N مشخص شده است.

گوشی منطقهٔ اول بریلوئن شبکهٔ fcc تماس برقرار می‌کنند. غلظت الکترونی در فلز یک ظرفیتی با ساختار fcc برابر است با $n = 4/a^3$ ؛ در مکعبی به حجم a^3 چهار الکترون وجود دارد. شعاع کرهٔ فرمی الکترون آزاد برابر است با

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} = (12\pi^2/a^3)^{1/3} \cong (4.90/a) \quad (38)$$

و قطر آن برابر $9.80/a$ است.

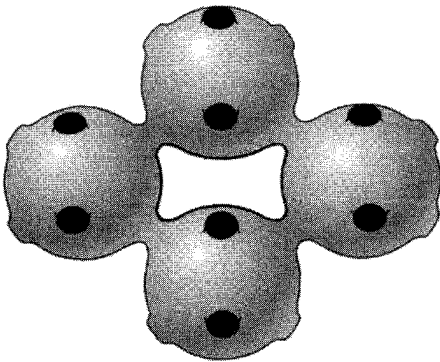
کوتاهترین فاصلهٔ بین دو وجه مقابل منطقهٔ بریلوئن (فاصلهٔ بین وجوه شش‌گوش) برابر است با $10.88/a = (2\pi/a)(3)^{1/2}$ ، که کمی بزرگتر از قطر کرهٔ الکترون آزاد است. کره با مرز منطقهٔ تماس برقرار نمی‌کند، ولی می‌دانیم که حضور مرز منطقه انرژی نوار را در نزدیکی مرز پایین می‌آورد. در نتیجه امکان دارد که سطح فرمی به خارج گردن بکشد و به وجوه (شش‌گوش) منطقه متصل شود (شکل‌های ۱۸ و ۲۹). وجوه مربعی منطقه دورترند و به فاصلهٔ $12.57/a$ از هم قرار دارند و سطح فرمی برای متصل شدن به آنها گردن نمی‌کشد.

مثال: سطح فرمی طلا. در طلا، شونبرگ^۱ دوره گشتاور مغناطیسی را برای گستره کاملاً وسیعی از جهت‌های میدان برابر $10^{-9} \text{G}^{-1} \times 2$ به دست آورد. این دوره متناظر است با مدار فرینی به این مساحت

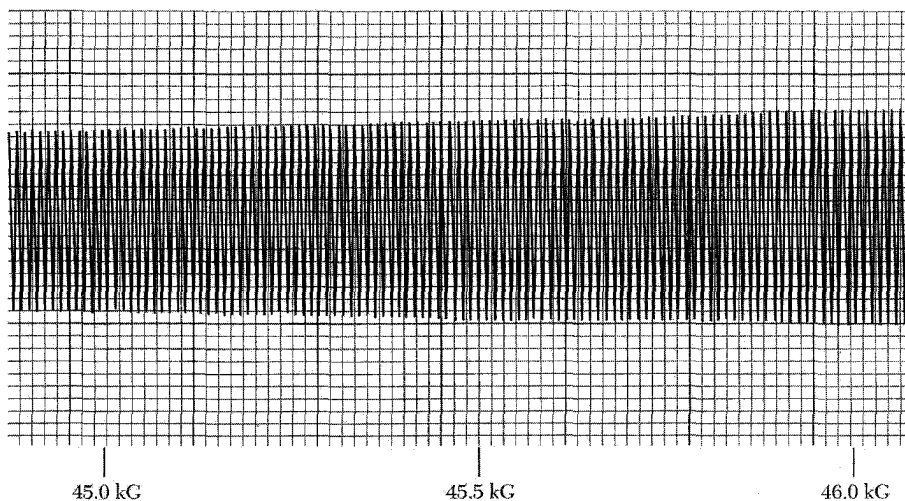
$$S = \frac{2\pi e/\hbar c}{\Delta(1/B)} \cong \frac{9.55 \times 10^7}{2 \times 10^{-9}} \cong 4.8 \times 10^{16} \text{cm}^{-2}$$

از جدول ۱ فصل ۶، برای کره فرمی الکترون آزاد طلا داریم $k_F = 1.2 \times 10^8 \text{cm}^{-1}$ ، که مساحت فرین متناظر با آن برابر است با $4.5 \times 10^{16} \text{cm}^{-2}$ ، که با مقدار تجربی سازگاری عامی دارد. دوره‌های واقعی، که شونبرگ آنها را گزارش کرد، عبارت‌اند از $2.05 \times 10^{-9} \text{G}^{-1}$ و $1.95 \times 10^{-9} \text{G}^{-1}$. یک دوره بزرگ برابر با $10^{-8} \text{G}^{-1} \times 6$ نیز برای Au در جهت [۱۱۱] به دست آمده است؛ مساحت مدار متناظر برابر است با $10^{15} \text{cm}^{-2} \times 1.6$. این مدار «گردنی» N است. مدار فرین دیگری که «استخوان‌سگی» نام دارد در شکل ۳۰ نشان داده شده و مساحتش در Au حدود $4 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ است. نتایج تجربی در شکل ۳۱ نشان داده شده‌اند. برای حل این مثال در SI، c را در رابطه مربوط به S حذف کنید و دوره را برابر 10^{-5} (تسلا)^{-۱} بگیرد.

کره فرمی الکترون آزاد آلومینیم منطقه اول را به طور کامل پر می‌کند، و همپوشانی بزرگی در منطقه‌های دوم و سوم دارد (شکل ۱). سطح فرمی منطقه سوم، با آنکه فقط از تکه‌های معینی از سطح کره آزاد ساخته شده، بسیار پیچیده است. مدل الکترون آزاد در منطقه چهارم نیز بسته‌های کوچکی از حفره‌ها را به دست می‌دهد، ولی وقتی پتانسیل شبکه منظور شود، این بسته‌ها خالی و الکترون‌ها به منطقه سوم افزوده می‌شوند. خصلتهای عمومی پیش‌بینی شده برای سطح فرمی آلومینیم، در تجربه به خوبی تأیید شده‌اند. شکل ۳۲ بخشی از سطح فرمی الکترون آزاد منیزیم را نشان می‌دهد.



شکل ۳۰. مدار استخوان‌سگی الکترون روی سطح فرمی مس یا طلا در میدان مغناطیسی. این مدار، حفره‌گونه دسته‌بندی می‌شود، زیرا انرژی به سوی درون مدار افزایش می‌یابد.

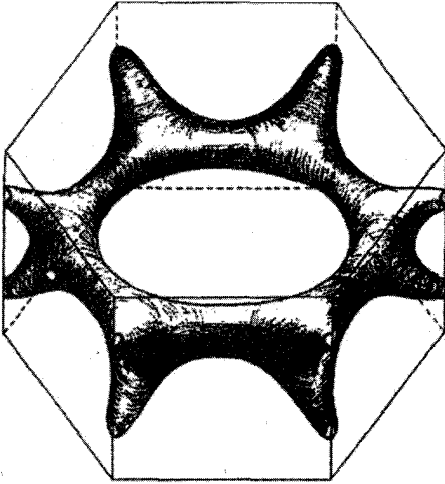


شکل ۳۱. اثر دو هاس-سون آلفن در طلا برای $[110] \parallel B$. این نوسان از مدار استخوان سگی شکل 30° ناشی می شود. این علامت به مشتق مرتبه دوم گشتاور مغناطیسی نسبت به میدان مربوط می شود. این نتایج توسط شگرد مدولاسیون میدان در سیمولوله ابرسانی بسیار همگن در دمایی حدود $1.2K$ به دست آمده است.

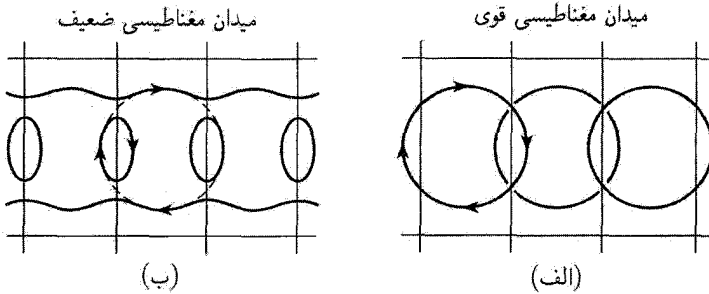
فروریزش مغناطیسی. الکترونها در میدانهای مغناطیسی به قدر کافی بزرگ در مدارهای ذره آزاد، یعنی مدارهای سیکلوترونی دایره ای شکل 33 (الف) حرکت می کنند. در اینجا نیروهای مغناطیسی حاکم اند و پتانسیل شبکه اختلالی جزئی است. در این حد، دسته بندی اوربیتالها به صورت نوار می تواند اهمیت جزئی داشته باشد. ولی می دانیم که در میدانهای مغناطیسی ضعیف، حرکت توسط معادله (۷) از فصل ۸، با ساختار نواری ϵ_k که در غیاب میدان مغناطیسی به دست می آید، توصیف می شود.

وقتی میدان مغناطیسی افزایش می یابد، فروریزش نهایی چنین توصیفی را فروریزش مغناطیسی می نامند. عبور از میدانهای مغناطیسی قوی ممکن است همبندی مدارها را به طور قابل ملاحظه ای تغییر دهد. شروع فروریزش مغناطیسی را می توان توسط ویژگیهای فیزیکی ای چون مغناطومقاومت آشکار کرد که به طور حساسی به همبندی نوارها وابسته است. شرط فروریزش مغناطیسی آن است که تقریباً $E_g^2 > \epsilon_F \hbar \omega_c$. در اینجا انرژی فرمی الکترون آزاد و E_g گاف انرژی است. این شرط، به خصوص در فلزهای با گاف کوچک، از این شرط ساده که شکافتگی مغناطیسی $\hbar \omega_c$ از گاف بزرگتر باشد، به مراتب متعادلتر است.

گافهای کوچک را می توان در فلزهای hcp یافت که در آنها گاف در وجه شش گوشه منطقه، بجز برای



شکل ۳۲. سطح حفره‌ای منیزیم با اتصال چندگانه در نوارهای ۱ و ۲.



شکل ۳۳. فروریزش ساختار نواری توسط میدان مغناطیسی قوی. خطهای باریک مرزهای منطقه بریلوئن اند. مدارهای الکترون آزاد (الف) در میدان مغناطیسی قوی که (ب) در میدان ضعیف همبندی خود را تغییر می‌دهند، و به صورت مدارهای باز در نوار اول و مدارهای الکترون و نوار دوم درمی‌آیند. هر دو نوار با هم نگاشته شده‌اند.

شکافتگی کوچک ناشی از برهم‌کنش اسپین-مدار، صفر می‌شود. در Mg شکافتگی از مرتبه $10^{-3} eV$ است؛ برای این گاف $10 eV \sim \epsilon_F$ شرط فروریزش به صورت $\hbar\omega_c > 10^{-5} eV$ یا $B > 1000 G$ درمی‌آید.

چکیده

• سطح فرمی، سطح با انرژی ثابت برابر با ϵ_F در فضای k است. سطح فرمی در صفر مطلق حالت‌های

پر را از حالت‌های خالی جدا می‌کند. شکل سطح فرمی معمولاً به بهترین نحو در طرح منطقه‌ای تحویل یافته نمایش داده می‌شود، ولی همبندی سطوح در طرح منطقه‌ای دوره‌ای، واضح‌ترین است.

- نوار انرژی تک‌شاخه‌ای است از سطح ϵ_k برحسب k .
- چسبندگی فلزهای ساده را می‌توان با پایین آمدن انرژی اوربیتال $k = 0$ نوار رسانش در اثر تغییر شرایط مرزی از شرودینگر به ویگنر-سایتس توجیه کرد.
- دوره‌ای بودن اثر دوهااس-ون آلفن مقیاسی است از مساحت سطح مقطع فرین S سطح فرمی، در فضای k ، سطح مقطع عمود بر B اختیار می‌شود:

$$(CGS) \quad \Delta \left(\frac{1}{B} \right) = \frac{2\pi e}{\hbar S}$$

مسائل

۱. منطقه‌های بریلوئن شبکه مستطیلی. دو منطقه بریلوئن نخست شبکه دوبعدی مستطیلی با محورهای a و $b = 3a$ را رسم کنید.
۲. منطقه بریلوئن، شبکه مستطیلی. یک فلز دوبعدی دارای یک اتم یک‌ظرفیتی در هر یاخته بسط مستطیلی ساده $a = 2\text{\AA}$ و $b = 4\text{\AA}$ است. (الف) منطقه اول بریلوئن را رسم کنید. ابعادش را برحسب cm^{-1} به دست آورید. (ب) شعاع کره فرمی الکترون آزاد را برحسب cm^{-1} محاسبه کنید. (ج) این کره را روی منطقه اول بریلوئن رسم شده با همان مقیاس رسم کنید. طرح دیگری رسم کنید که چند دوره اول نوار الکترون آزاد را، در طرح منطقه‌ای دوره‌ای، برای هر دو نوار انرژی اول و دوم نشان دهد. فرض کنید که گاف انرژی کوچکی در مرز وجود دارد.
۳. ساختار تنگ‌چین شش‌گوشی. منطقه اول بریلوئن بلوری با شبکه شش‌گوشی ساده را در سه بعد با ثابتهای شبکه a و c در نظر بگیرید. فرض کنید G_c نمایشگر کوتاهترین بردار شبکه موازی با محور c شبکه این بلور باشد. (الف) نشان دهید که در ساختار بلوری شش‌گوشی تنگ‌چین، مؤلفه فوریه $U(G_c)$ بتانسیل $U(\mathbf{r})$ بلور برابر صفر است. (ب) آیا $U(2G_c)$ نیز صفر است؟ (ج) چرا در اصل امکان به دست آوردن عایقی متشکل از اتمهای دوظرفیتی در نقاط شبکه یک شبکه شش‌گوشی ساده وجود دارد؟ (د) چرا نمی‌توان عایقی متشکل از اتمهای یک‌ظرفیتی با ساختار تنگ‌چین شش‌گوشی به دست آورد؟
۴. منطقه‌های بریلوئن فلز دوظرفیتی دوبعدی. یک فلز دوبعدی به شکل یک شبکه مربعی دو الکترون رسانشی به‌ازای هر اتم دارد. در تقریب الکترون تقریباً آزاد، سطحهای انرژی الکترون و حفره را به‌دقت رسم کنید. برای الکترونها، طرح منطقه‌ای را به‌گونه‌ای برگزینید که سطح فرمی بسته نشان داده شود.

۵. مدارهای باز. یک مدار باز در فلز چهارگوشی تک ظرفیتی، وجوه مقابل مرز منطقه بریلوئن را به هم وصل می‌کند. این وجوه از یکدیگر توسط $G = 2 \times 10^8 \text{cm}^{-1}$ فاصله دارند. میدان مغناطیسی تسلا $B = 10^3 \text{G} = 10^{-1} \text{T}$ بر صفحه این مدار باز عمود است. (الف) مرتبه بزرگی دوره حرکت در فضای k چیست؟ v را تقریباً برابر 10^8cm/s بگیرید. (ب) حرکت الکترون را روی این مدار در حضور میدان مغناطیسی در فضای حقیقی توصیف کنید.

۶. انرژی چسبندگی چاه پتانسیل مربعی. (الف) عبارتی برای انرژی بستگی الکترون در یک بعد در یک تک چاه مربعی به عمق U_0 و به پهنای a بیابید. (این اولین مسئله استاندارد در مکانیک کوانتومی مقدماتی است.) فرض کنید که پاسخ حول نقطه میانی چاه متقارن باشد. (ب) در مورد خاص $|U_0| = 2\hbar^2/ma^2$ ، یک نتیجه عددی برای انرژی بستگی برحسب U_0 بیابید و آن را با حد مناسب در شکل ۲۰ مقایسه کنید. در این حد که فاصله چاهها از یکدیگر بسیار زیاد است، پهنای نوار صفر می‌شود، در نتیجه انرژی به‌ازای $k = 0$ با انرژی به‌ازای هر k دیگر در پایینترین نوار انرژی برابر است. در این حد، نوارهای دیگر از حالت‌های برانگیخته چاه تشکیل می‌شوند.

۷. دوره دوهاوس-ون آلفن پتاسیم. (الف) دوره $\Delta(1/B)$ مورد انتظار برای پتاسیم را در مدل الکترون آزاد محاسبه کنید. (ب) مساحت مدار فرین در فضای حقیقی، برای $B = 1 - kG = 1 \text{T}$ چقدر است؟ همین دوره برای نوسانهای مقاومت ویژه الکتریکی به کار می‌رود که به اثر شوبنیکوف-دوهاس معروف است.

* ۸. ساختار لبه نوری در نظریه اختلال $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. اوربیتال ناواگن ψ_{nk} را در نوار n بلور مکعبی در $\mathbf{k} = 0$ در نظر بگیرید. با به کار بردن نظریه اختلال مرتبه دوم نتیجه زیر را بیابید

$$\epsilon_n(\mathbf{k}) = \epsilon_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_j' \frac{|\langle n^0 | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | j^0 \rangle|^2}{\epsilon_n(0) - \epsilon_j(0)} \quad (39)$$

که در آن جمع‌زنی روی همه اوربیتال‌های ψ_{jk} در $\mathbf{k} = 0$ است. جرم مؤثر در این نقطه برابر است با

$$\frac{m}{m^*} \approx 1 + \frac{2}{m} \sum_j' \frac{|\langle n^0 | \mathbf{p} | j^0 \rangle|^2}{\epsilon_n(0) - \epsilon_j(0)} \quad (40)$$

در جرم لبه نوار رسانش، در نیمرسانایی با گاف باریک، اغلب اثر لبه نوار ظرفیت حاکم است، در نتیجه

$$\frac{m}{m^*} \approx \frac{2}{mE_g} \sum_v |\langle c | \mathbf{p} | v \rangle|^2 \quad (41)$$

* حل این مسئله تا اندازه‌ای مشکل است.

که در آن جمع‌زنی روی نوارهای ظرفیت و E_g گاف انرژی است. برای عناصر ماتریسی مفروض، گافهای کوچک به جرمه‌های کم منجر می‌شوند.

۹. توابع وانیه. توابع وانیه یک نوار برحسب توابع بلوخ همان نوار با رابطه زیر تعریف می‌شوند

$$w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) = N^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (42)$$

که در آن نقطه شبکه‌ای است. (الف) ثابت کنید که توابع وانیه حول نقاط شبکه‌ای متفاوت m و n متعامدند:

$$\int dV w^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m) = 0 \quad n \neq m \quad (43)$$

این ویژگی تعامد باعث می‌شود که این تابعها بیش از اوربیتالهای اتمی متمرکز بر جایگاههای متفاوت شبکه به‌کار روند، زیرا اوربیتالهای اتمی فوق عموماً متعامد نیستند. (ب) توابع وانیه در اطراف جایگاههای شبکه قله دارند. نشان دهید که در $w_k = N^{-1/2} e^{ikx} u_0(x)$ تابع وانیه برای N اتم روی خطی با ثابت شبکه a به صورت زیر است

$$w(x - x_n) = u_0(x) \frac{\sin \pi(x - x_n)/a}{\pi(x - x_n)/a}$$

۱۰. مدارهای باز و مغناطومقاومت. مغناطومقاومت عرضی الکترونیهای آزاد را در مسئله ۹ فصل ۶ و مغناطومقاومت الکترونها و حفره‌ها را در مسئله ۵ فصل ۸ در نظر گرفتیم. در برخی از بلورها مقاومت، بجز برای سم‌تگیریه‌های خاص بلور، اشباع می‌شود. مدار باز تنها در یک تک جهت در صفحه عمود بر میدان مغناطیسی، جریان حمل می‌کند. در آرایش شکل ۱۴ فصل ۶، مدارهای باز را موازی با k_x بگیرید؛ این مدارها در فضای حقیقی جریان را موازی با محور y حمل می‌کنند. $\sigma_{yy} = s\sigma_0$ را رسانندگی مدارهای باز بگیرید، این رابطه ثابت s را تعریف می‌کند. تانسور مغناطومقاومت در حد میدان قوی $\omega_c \tau \gg 1$ به این صورت است

$$\sigma_0 \begin{pmatrix} Q^{-2} & -Q^{-1} & 0 \\ Q^{-1} & s & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

که در آن $Q = \omega_c \tau$. (الف) نشان دهید که میدان حال برابر است با $E_y = -E_x/sQ$. (ب) نشان دهید که مقاومت ویژه مؤثر در جهت x برابر است با $\rho = (Q^2/\sigma_0)(s/s + 1)$ ، در نتیجه مقاومت اشباع نمی‌شود، بلکه به صورت B^2 افزایش می‌یابد.

۱۱. ترازهای لاندائو. پتانسیل برداری میدان مغناطیسی یکنواخت $B\hat{z}$ در پیمانه لاندائو برابر است با $\mathbf{A} = -By\hat{x}$. هامیلتونی الکترون آزاد بدون اسپین عبارت است از

$$H = -(\hbar^2/2m)(\partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2) + (\hbar^2/2m)[-i\hbar\partial/\partial x - eyB/c]^2$$

برای معادله موج $H\psi = \epsilon\psi$ در جستجوی ویژه تابعی به صورت زیر هستیم:

$$\psi = \chi(y) \exp[i(k_x x + k_z z)]$$

(الف) نشان دهید که $\chi(y)$ در این معادله صدق می‌کند:

$$(\hbar^2/2m)d^2\chi/dy^2 + [\epsilon - (\hbar^2 k_z^2/2m) - \frac{1}{2}m\omega_c^2(y - y_0)^2]\chi = 0$$

که در آن $\omega_c = eB/mc$ و $y_0 = \hbar k_x / eB$. (ب) نشان دهید که این معادله، معادله موج نوسانگر هماهنگ ساده با بسامد ω_c است، که برای آن

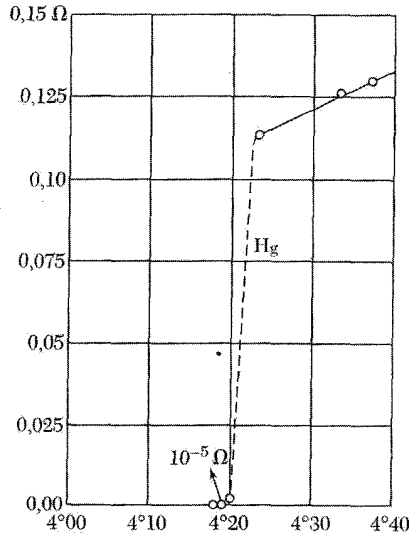
$$\epsilon_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c + \hbar^2 k_z^2 / 2m$$

ابرسیانایی^۱

برای بسیاری از فلزات و آلیاژها هنگامی که نمونه تا دمای کاملاً پایینی، غالباً در گستره دمای هلیم مایع، سرد شود مقاومت ویژه الکتریکی ناگهان صفر می‌شود. این پدیده را نخست کامرلینگ اونس^۲ در لیدن در سال ۱۹۱۱، سه سال بعد از آنکه برای اولین بار هلیم را به صورت مایع درآورد، مشاهده کرد. در دمای بحرانی T_c ، نمونه تحت گذار فاز فلز از حالتی با مقاومت ویژه الکتریکی معمولی به حالت ابررسیانش می‌رود (شکل ۱).

اکنون ابررسیانایی بسیار خوب شناخته شده است. رشته‌ای است که جنبه‌های عملی و نظری بسیاری دارد. تمامی این فصل و پیوستهای مربوطه منعکس‌کننده غنا و ظرافتهای این رشته‌اند.

۱. نمادگذاری: در این فصل B_a نشانگر میدان مغناطیسی اعمال شده است. مقدار بحرانی B_{ac} ی میدان اعمال شده در دستگاه CGS بنا بر رسم پژوهشگران ابررسیانایی با نماد H_c نشان داده می‌شود و مقادیر B_{ac} در CGS برحسب گاوس و در SI برحسب تسلا داده می‌شوند، که در آن $1 \text{ T} = 10^4 \text{ G}$. در SI داریم $B_{ac} = \mu_0 H_c$.



شکل ۱. مقاومت الکتریکی نمونه‌ای از جیوه به اهم برحسب دمای مطلق. این نمودار، که کامرلینگ اونس به دست آورد، سرآغاز کشف ابرسانایی شد.

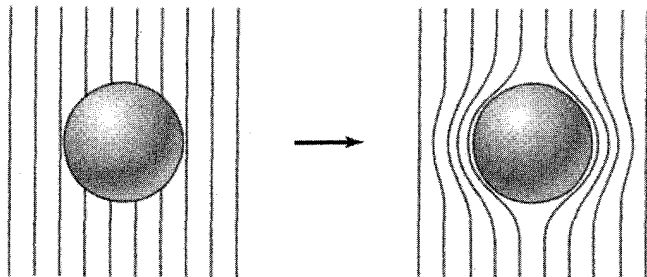
مروری بر کارهای تجربی

در حالت ابرسانش، مقاومت ویژه الکتریکی dc صفر یا آنقدر به صفر نزدیک است که در حلقه‌های ابرسانا جریانهای الکتریکی ماندگاری مشاهده شده که بدون هیچ کاهشی با بیش از یک سال جاری بوده‌اند، تا اینکه سرانجام پژوهشگر از ادامه آزمایش خسته شده است.

فایل و میلز^۱ فروافت ابرجریان را در سیمولوه مطالعه کردند. آنها برای اندازه‌گیری میدان مغناطیسی وابسته به ابرجریان از روشهای دقیق تشدید مغناطیسی هسته‌ای استفاده کردند و نتیجه گرفتند که زمان فروافت ابرجریان کمتر از ۱۰۰۰۰۰ سال نیست. زمان فروافت را بعداً تخمین می‌زنیم. در بعضی مواد ابرسانا، به‌ویژه موادی که در آهنرباهای ابرسانشی به‌کار می‌روند، به دلیل بازتوزیع برگشت‌ناپذیر شار مغناطیسی در ماده، زمانهای فروافت متناهی مشاهده شده‌اند.

ویژگیهای مغناطیسی که ابرساناها از خود نشان می‌دهند نیز مانند ویژگیهای الکتریکی آنها قابل توجه‌اند. ویژگیهای مغناطیسی را نمی‌توان با این فرض توضیح داد که مقاومت ویژه الکتریکی صفر، حالت ابرسانش را به‌طور صحیح مشخص می‌کند.

این واقعیتی است تجربی که ابرسانای حجیم در میدان مغناطیسی ضعیف مانند دیامغناطیس کامل عمل می‌کند و القای مغناطیسی درون آن صفر است. وقتی نمونه‌ای در میدان مغناطیسی قرار گیرد و برای



شکل ۲. اثر مایسنر در کره ابررسانایی که در میدان مغناطیسی ثابت سرد شده است؛ در گذر از دمای گذار، خطوط القای B از کره به بیرون رانده می‌شوند.

گذر از دمای گذار ابررسانایی سرد شود، شار مغناطیسی موجود در آن به بیرون رانده می‌شود. این پدیده را اثر مایسنر گویند. شکل ۲ توالی این رویدادها را نشان می‌دهد. ویژگیهای مغناطیسی منحصر به فرد ابررساناها در مشخص کردن حالت ابررسانایی اهمیت اساسی دارند.

حالت ابررسانش حالت منظم الکترونیهای رسانش فلز است. این نظم مربوط است به تشکیل زوج الکترونیهای که به طور ضعیفی به یکدیگر وابسته‌اند. الکترونها در دماهای پایینتر از دمای گذار منظم و در دماهای بالاتر از آن نامنظم‌اند.

باردین، کوپر، و شریف‌ماهیت و منشأ این نظم را بیان کردند.^۱ در این فصل فیزیک حالت ابررسانش را، تا آنجا که ممکن است، با روشی مقدماتی گسترش می‌دهیم. همچنین فیزیک بنیادی موادی که در آهنرباهای ابررسانشی به کار می‌روند، بررسی می‌کنیم و از بحث در مورد فناوری مربوط به آنها چشم‌پوشی می‌کنیم. بیوستهای ح و ط بررسیهای ژرفتری از حالت ابررسانش ارائه می‌دهند.

وقوع ابررسانایی

ابررسانایی در بسیاری از عناصر فلزی جدول دوره‌ای و همچنین در آلیاژها، ترکیبات بین‌فلزی و نیمرساناهای آلیبیده رخ می‌دهد. در حال حاضر گستره دمای گذار از 90°K برای ترکیب $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ تا زیر 10^{-4}K برای عنصر Rh مورد تأیید قرار گرفته است. چند ابررسانای نوار f نیز به عنوان «ابررساناهای شگفت‌انگیز» در فصل ۶ فهرست شده‌اند. برخی مواد فقط تحت فشار بالا ابررسانا می‌شوند، Si در فشار 165kbar ، با دمای گذار $T_c = 8.3\text{K}$ شکل ابررسانشی دارد. عناصری که در فشار صفر ابررسانا شناخته شده‌اند، در جدول ۱ فهرست کرده‌ایم.

آیا هر عنصر فلزی غیرمغناطیسی در دماهای به اندازه کافی پایین ابررسانا می‌شود؟ نمی‌دانیم. در

1. J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **106**, 162 (1957); **108**, 1175 (1957).

جدول ۲. ابرسانایی ترکیبات برگزیده

T_c برحسب K	ترکیب	T_c برحسب K	ترکیب
۱۶٫۵	V_3Ga	۱۸٫۰۵	Nb_3Sn
۱۷٫۱	V_3Si	۲۳٫۲	Nb_3Ge
۹۰٫۰	$YBa_2Cu_3O_{6.9}$	۱۷٫۵	Nb_3Al
۳۱٫۳	Rb_2CsC_6	۱۶٫۰	NbN
۳۹٫۰	MgB_2	۱۹٫۲	C_6

کاوشهای تجربی برای یافتن ابرساناهایی که دمای گذارشان فوق‌العاده پایین است، حذف مقادیر بسیار کمی از عناصر پارامغناطیسی خارجی، که در کاهش دمای گذار به‌وضوح مؤثرند، دارای اهمیت است. Mo خالص در دمای $T_c = 9.2 K$ ابرسانا می‌شود، در حالی که با افزایش چند اتم Fe در هر 10^4 اتم Mo ابرسانایی از بین می‌رود. همچنین یک درصد اتمی گادولینیم دمای گذار لاتتان را از $5.6 K$ به $6.6 K$ کاهش می‌دهد. ناخالصیهای غیرمغناطیسی اثر قابل‌توجهی بر دمای گذار ندارند. دمای گذار تعدادی از ترکیبهای ابرساناهای مرکب مورد توجه در جدول ۲ داده شده‌اند. تعدادی از ترکیبهای آلی در دماهای نسبتاً پایین، ابرسانایی نشان می‌دهند.

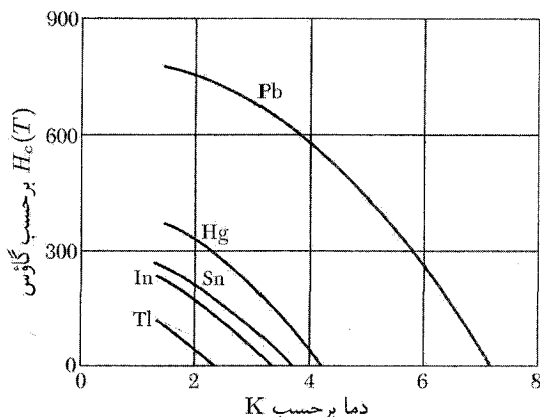
از بین بردن ابرسانایی توسط میدانهای مغناطیسی

یک میدان به‌اندازه‌کافی قوی ابرسانایی را از بین می‌برد. آستانه یا مقدار بحرانی میدان مغناطیسی خارجی که ابرسانایی را از بین می‌برد با $H_c(T)$ که تابع دماست نشان داده می‌شود. در دمای بحرانی، میدان بحرانی برابر است با صفر: $H_c(T) = 0$. تغییر میدان بحرانی نسبت به دما، برای چند عنصر ابرسانا در شکل ۳ نشان داده شده است.

منحنیهای آستانه، حالت ابرسانایی را در سمت چپ پایین شکل از حالت عادی در سمت راست بالای شکل جدا می‌کنند. توجه کنید که مقدار بحرانی میدان مغناطیسی خارجی باید با B_{ac} نشان داده شود، ولی این امر در میان پژوهشگران ابرسانایی متداول نیست. باید دانست که در دستگاه OGS همواره داریم $H_c \equiv B_{ac}$ ، و در SI داریم $H_c \equiv \frac{B_{ac}}{\mu_0}$. نماد B_a میدان مغناطیسی اعمال‌شده را مشخص می‌کند.

اثر مایسنر

مایسنر و اوشنفلد^۱ (۱۹۳۳) دریافتند که اگر ابرسانا در میدان مغناطیسی تا زیر دمای گذار سرد شود،



شکل ۳. منحنیهای آستانه تجربی برای میدان بحرانی $H_c(T)$ برحسب دما برای چند ابرسانا. نمونه مورد آزمایش در زیرمنحنی ابرسانا و در بالای آن عادی است.

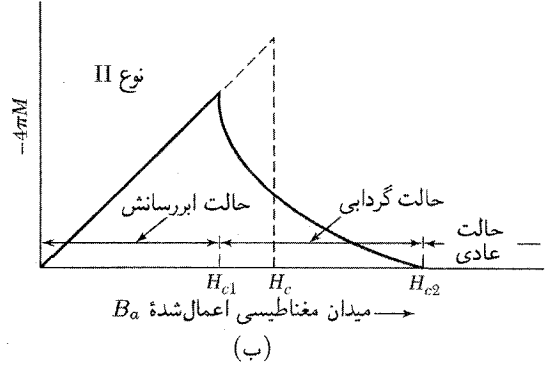
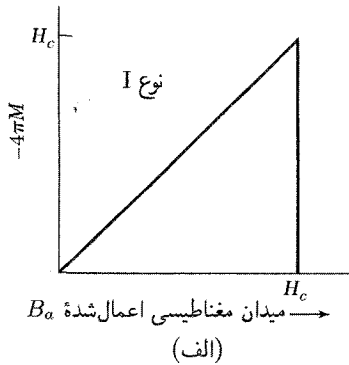
در لحظه گذار خطوط القای B به بیرون رانده می‌شوند (شکل ۲). اثر مایسنر نشان می‌دهد که ابرسانای حجیم چنان رفتار می‌کند که گویی در داخل نمونه مورد نظر $B = 0$. اگر به نمونه‌های نازک و درازی که محور طولی آنها به موازات B_a باشد اکتفا کنیم، شکل مناسب به خصوصی از این نتیجه به دست می‌آوریم: در این صورت سهم میدان و امغانطیدگی (فصل ۱۶) در چشم‌پوشیدنی خواهد بود.^۱ بنابراین

$$(CGS) \quad B = B_a + 4\pi M = 0 \quad \text{یا} \quad \frac{M}{B_a} = -\frac{1}{4\pi} \quad (1)$$

$$(SI) \quad B = B_a + \mu_0 M = 0 \quad \text{یا} \quad \frac{M}{B_a} = -\frac{1}{\mu_0} = -\epsilon_0 c^2$$

نتیجه $B = 0$ را نمی‌توان با در نظر گرفتن ابرسانا به صورت محیطی با مقاومت ویژه صفر به دست آورد. از قانون اهم، $\mathbf{E} = \rho \mathbf{j}$ ، درمی‌یابیم که اگر مقاومت ویژه ρ در حالی که \mathbf{j} متناهی است صفر شود، با توجه به معادلهٔ ماکسول مقدار $d\mathbf{B}/dt$ متناسب با \mathbf{E} است و بنابراین از صفر بودن مقاومت ویژه نتیجه می‌شود که $d\mathbf{B}/dt = 0$ ، ولی نمی‌توان نتیجه گرفت که $B = 0$. این استدلال کاملاً روشن نیست، ولی نتیجه حاصل پیش‌بینی می‌کند که شار داخل فلز در اثر سرد کردن آن و گذر از دمای گذار نمی‌تواند تغییر کند. اثر مایسنر پیشنهاد می‌کند که خاصیت دیامغانطیسی کامل ویژگی اساسی حالت ابرسانش است.

۱. دیامغانطیس، مغانطیدگی M ، و پذیرفتاری مغانطیسی در فصل ۱۴ تعریف می‌شوند. مقدار پذیرفتاری دیامغانطیسی ظاهری در ابرساناهای حجیم خیلی بیشتر از پذیرفتاری دیامغانطیسی در مواد دیامغانطیس نوعی است. در رابطه (۱)، M مغانطیدگی معادل با جریانهای ابرسانشی در نمونه است.

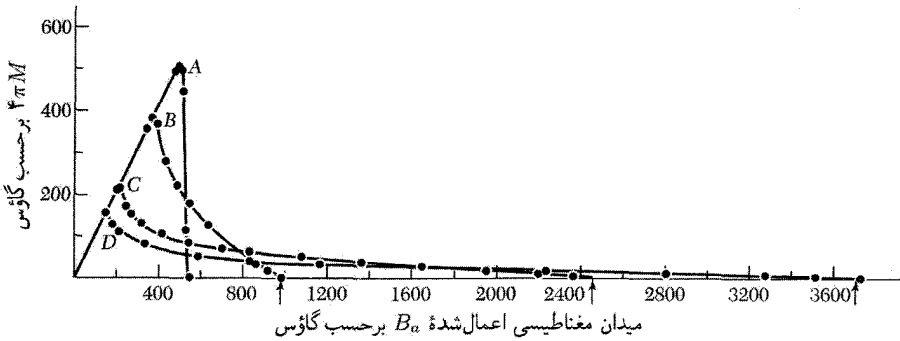


شکل ۴. (الف) مغناطیدگی بر حسب میدان مغناطیسی اعمال شده برای ابررسانای حجیمی که اثر کامل مایسنر (خاصیت دیامغناطیسی کامل) را نشان می دهد. یک ابررسانا با چنین رفتاری را ابررسانای نوع I می نامند. نمونه در بالای میدان بحرانی H_c رسانای عادی است و مغناطیدگی کوچکتر از آن است که در این مقیاس دیده شود. توجه کنید که منهای $4\pi M$ روی محور عمودی رسم شده است؛ مقدار منفی M به خاصیت دیامغناطیسی مربوط است. (ب) منحنی مغناطیدگی ابررسانشی برای ابررسانای نوع II. شار در میدان H_{c1} که پایینتر از میدان بحرانی ترمودینامیکی H_c است، شروع به نفوذ در نمونه می کند. نمونه بین H_{c1} و H_{c2} در حالت گردابی است و تا H_{c2} دارای ویژگیهای الکتریکی ابررسانشی است. نمونه در بالای H_{c2} از هر جهت، مگر در مورد برخی آثار سطحی ممکن، رسانای عادی است. برای یک H_c معین، مساحت زیر منحنی مغناطیدگی برای ابررسانای نوع II و نوع I مساوی است. (در تمام قسمتهای این شکل واحدهای CGS به کار رفته است.)

انتظار می رود که تفاوت دیگری بین ابررسانا و رسانای کامل وجود داشته باشد. منظور از رسانای کامل رسانایی است که در آن الکترونها دارای مسافت آزاد میانگین بی پایان باشند. هنگامی که مسئله را به تفصیل حل کنیم، معلوم می شود که رسانای کامل، وقتی در میدان مغناطیسی قرار گیرد، نمی تواند با جریان تلاطمی حفاظ دائمی ایجاد کند: میدان در یک ساعت حدود یک سانتیمتر نفوذ می کند.^۱

انتظار می رود که منحنی مغناطیدگی برای ابررسانا، تحت شرایط آزمایشی مایسنر-اوشنفلد، مطابق شکل ۴ (الف) باشد. این منحنی به طور کمی در مورد نمونه ای به شکل استوانه دراز و توپر در میدان مغناطیسی طولی صادق است. نمونه های خالص بسیاری از مواد چنین رفتاری را نشان می دهند؛ آنها را ابررسانای نوع I یا به نام قدیمی شان ابررسانای نرم می نامند. مقادیر H_c برای ابررساناهای نوع I همیشه آنقدر پایین اند که کاربرد فنی مفیدی در پیچه آهنرباهای ابررسانشی ندارند.

منحنی مغناطیدگی مواد دیگر به شکل نمودار ۴ (ب) است. این گونه مواد ابررسانای نوع II نامیده



شکل ۵ الف. منحنیهای مغناطیدگی ابررسانا برای بسبورهای بازپخته سرب و آلیاژهای سرب-ایندیم در ۴٫۲K. (A) سرب؛ (B) سرب-۸٫۰ درصد وزنی ایندیم؛ (C) سرب-۲۳٫۸ درصد وزنی ایندیم؛ (D) سرب-۴٫۰ درصد وزنی ایندیم.

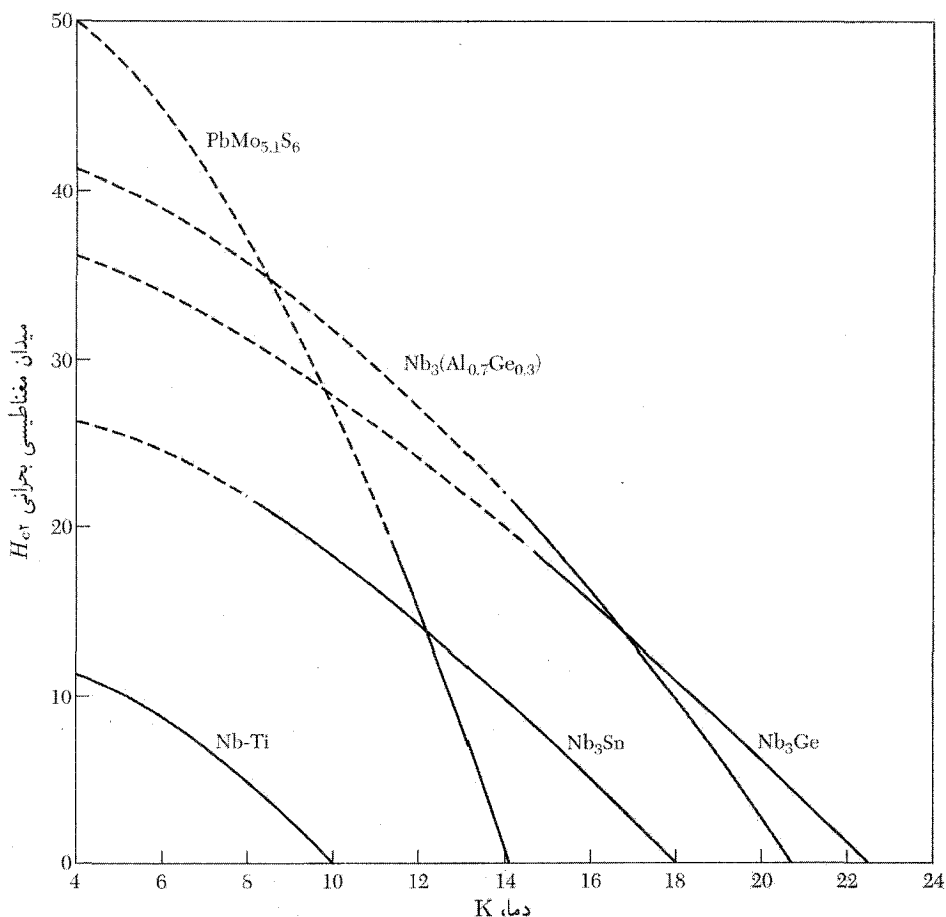
می‌شوند. آلیاژها (مانند شکل ۵ الف) یا فلزات واسطه که مقاومت ویژه الکتریکی‌شان در حالت عادی زیاد است، یعنی مسافت آزاد میانگین الکترونی آنها در حالت عادی کوتاه است، از جمله این موادند. بعداً خواهیم دید که چرا مسافت آزاد میانگین در «مغناطیدگی» ابررسانا وارد می‌شود.

ابررساناهای نوع II تا میدانی که با H_{c2} نشان داده می‌شود ویژگیهای الکتریکی ابررسانایی دارند. بین میدانهای بحرانی پایینی H_{c1} و میدان بحرانی بالایی H_{c2} چگالی شار بدین صورت است، $B \neq 0$ و می‌گویند اثر مایسنر کامل نیست. مقدار H_{c2} می‌تواند صد برابر یا بیشتر از صد برابر مقدار میدان بحرانی H_c باشد که از ترمودینامیک گذار محاسبه می‌شود (شکل ۵ ب). در ناحیه بین H_{c1} و H_{c2} ابررسانا به وسیله خطوط شار نخ‌کشی و گفته می‌شود که در حالت گردابی است. در آلیاژی از Al, Nb, و Ge در نقطه جوش هلیوم، به میدان H_{c2} برابر 410 kG (41 تسلا) دست یافته‌اند و میدان 540 kG (54 تسلا) برای PbMo_6S_8 گزارش شده است.

سیملوله‌های تجارتي که با ابررسانای سخت پیچیده شده‌اند، میدانهای پایای بزرگی بالاتر از 100 kG تولید می‌کنند. ابررسانای نوع II «ابررسانای سخت» است که مقدار زیادی پسماند مغناطیسی دارد که معمولاً به وسیله عملیات مکانیکی، در آن القا می‌شود. چنین موادی کاربرد پزشکی مهمی در تصویرنگاری تشدید مغناطیسی (MRI) دارند.

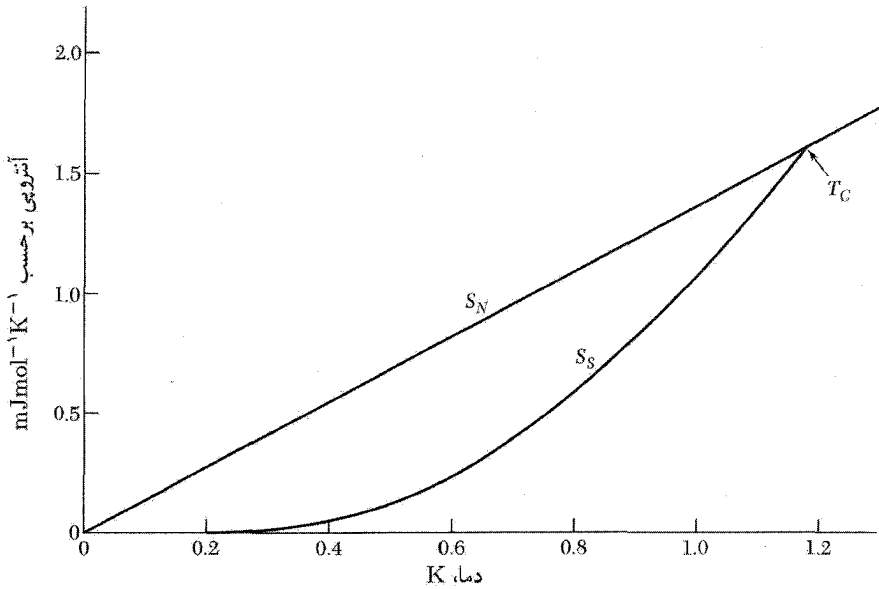
ظرفیت گرمایی

آنتروپی در تمام ابررساناها به هنگام سردکردن تا زیر دمای بحرانی T_c به طور قابل توجهی کاهش می‌یابد. اندازه‌گیری‌هایی که روی آلومینیم انجام گرفته در شکل ۶ رسم شده‌اند. کاهش آنتروپی بین حالت عادی و



شکل ۵ ب. میدانهای مغناطیسی قوی قابل تحمل برای برخی مواد نوع II.

حالت ابررسانش نشانگر آن است که حالت ابررسانش از حالت عادی منظمتر است، زیرا آنتروپی مقیاسی از بی نظمی دستگاه است. برخی یا تمامی الکترونیایی که در حالت عادی به گونه گرمایی برانگیخته می شوند، در حالت ابررسانش منظم اند. تغییر آنتروپی کوچک و در آلومینیم از مرتبه $10^{-4} k_B$ به ازای هر اتم است. تغییر کم آنتروپی باید به این معنی باشد که فقط کسر کوچکی (از مرتبه 10^{-4}) از الکترونیهای رسانشی در گذار به حالت منظم ابررسانش شرکت می کنند. انرژیهای آزاد حالتیهای عادی و ابررسانش در شکل ۷ مقایسه شده اند. ظرفیت گرمایی گالیم در شکل ۸ ترسیم شده است: (الف) حالتیهای عادی و ابررسانش را مقایسه می کند؛ (ب) نشان می دهد که سهم الکترونی در ظرفیت گرمایی برای حالت ابررسانش به شکل نمایی



شکل ۶. آنترژی S . آلومینیم در حالت‌های عادی و ابررسانش به صورت تابعی از دما. آنترژی در حالت ابررسانش پایینتر است، زیرا الکترون‌ها در این حالت از حالت عادی منظم‌ترند. در هر دمای پایینتر از دمای بحرانی T_C نمونه را می‌توان با اعمال یک میدان مغناطیسی که قویتر از میدان بحرانی باشد در حالت عادی قرار داد.

است که شناسه آن با $1/T$ متناسب است؛ این امر نشانگر برانگیختگی الکترون‌ها از پایین به بالای گاف انرژی است. گاف انرژی (شکل ۹) یکی از خصیصه‌های مشخصه حالت ابررسانش است ولی کلی نیست. این گاف در نظریه ابررسانایی باردین-کوپر-شریفر (BCS)، توجیه شده است (پیوست ح را ببینید).

گاف انرژی

گاف انرژی در ابررساناها طبیعت کاملاً متفاوتی از گاف انرژی در عایقها دارد. در عایق گاف انرژی ناشی از برهم‌کنش الکترون-شبکه است (فصل ۷). این برهم‌کنش الکترون‌ها را به شبکه متصل می‌کند. در ابررسانا برهم‌کنش مهم برهم‌کنش الکترون-الکترون است که الکترون‌ها را در فضای k نسبت به الکترون‌های گاز فرمی منظم می‌کند.

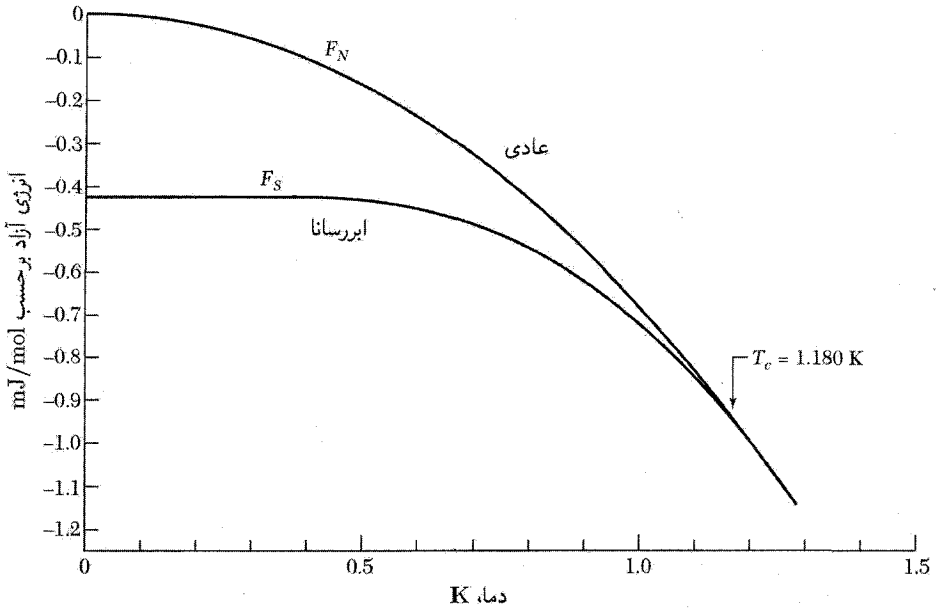
شناسه عامل نمایی در ظرفیت گرمایی ابررسانا با $-E_g/2k_B T$ برابر است، نه با $-E_g/k_B T$. این نتیجه از مقایسه با محاسبات گاف E_g به روش‌های اپتیکی و تونل‌زنی الکترونی حاصل شده است. مقادیر گاف چند ابررسانا در جدول ۳ داده شده‌اند.

مشاهده می‌شود که گذار از حالت ابررسانش به حالت عادی در میدان مغناطیسی صفر،

جدول ۳. گاف انرژی در ابررساناها، در $T = 0^\circ$

E_g بر حسب 10^{-4} eV
 $E_g (0\text{K}) T_c$

Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge
		16							2.4	3.3	
		3.4							3.2	3.5	
Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn ^(w)
		30.5	2.7						1.5	10.5	11.5
		3.80	3.4						3.2	3.6	3.5
La ^{fcc}	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg ^(w)	Tl	Pb
19		14							16.5	7.35	27.3
3.7		3.60							4.6	3.57	4.38

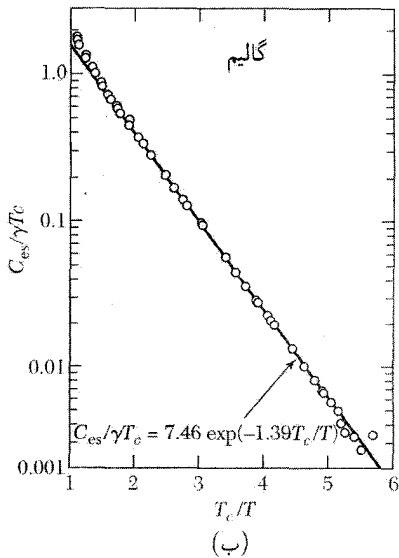
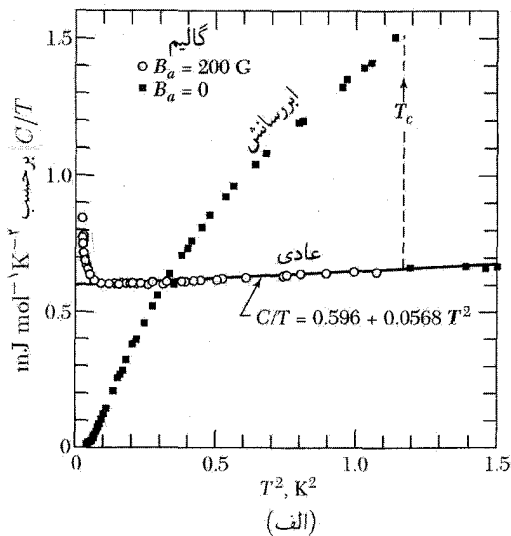


شکل ۷. مقادیر تجربی انرژی آزاد به صورت تابعی از دما برای آلومینیم در حالت‌های ابرسانش و عادی. در دمای پایتیز از دمای گذار، $T_c = 1.180\text{ K}$ ، انرژی آزاد برای حالت ابرسانش کمتر است. این دو منحنی در دمای گذار یکی می‌شوند. بنابراین گذار فاز از مرتبه دوم است (گرمای نهان گذار در T_c وجود ندارد). منحنی F_S در میدان مغناطیسی صفر و منحنی F_N در میدان مغناطیسی، که برای قراردادن نمونه در حالت عادی کافی باشد، اندازه‌گیری می‌شود.

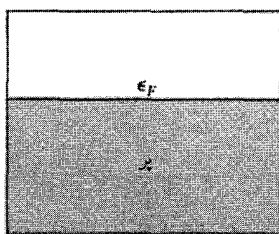
گذار فاز مرتبه دوم است. در گذار مرتبه دوم گرمای نهان وجود ندارد، ولی در ظرفیت گرمایی ناپیوستگی وجود دارد که در شکل ۸ (الف) آشکار است. علاوه بر آن، همان‌گونه که در شکل ۱۰ نشان داده شده است، گاف انرژی، هنگامی که دما افزایش می‌یابد و به دمای گذار T_c می‌رسد، به‌طور پیوسته به صفر کاهش می‌یابد. گذار مرتبه اول با گرمای نهان و ناپیوستگی در گاف انرژی مشخص می‌شود.

ویژگیهای میکروموجی و فروسرخ

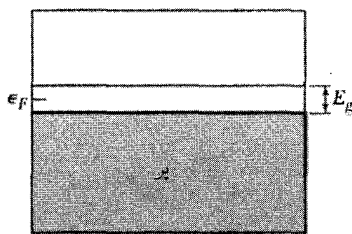
وجود گاف انرژی در ابرساناها به این معنی است که فوتونهایی با انرژی کمتر از انرژی گاف جذب نمی‌شوند. تقریباً تمام فوتونهای فرودی روی ابرسانا، مانند فوتونهای فرودی روی هر فلز، به دلیل جور نبودن پآگیری الکتریکی در مرز خلأ و فلز بازتاب می‌یابند، ولی برای لایه بسیار نازک ($\sim 20\text{ \AA}$) عبور فوتونها در حالت ابرسانش بیشتر از حالت عادی است.



شکل ۸. (الف) ظرفیت گرمایی گالیم در حالت‌های عادی و ابررسانش. حالت عادی (که با اعمال میدان 200 G دوبار برقرار شده است) دارای سهم‌های الکترونی، شبکه‌ای، و (در دماهای پایین) چهارقطبی هسته‌ای است. در (ب) بخش الکترونی ظرفیت گرمایی در حالت ابررسانش، C_{es} ، روی محور لگاریتمی برحسب T_c/T ترسیم شده است؛ وابستگی نمایی به $1/T$ آشکار است. در اینجا $\gamma = 0.60\text{ mJ mol}^{-1}\text{ deg}^{-2}$.

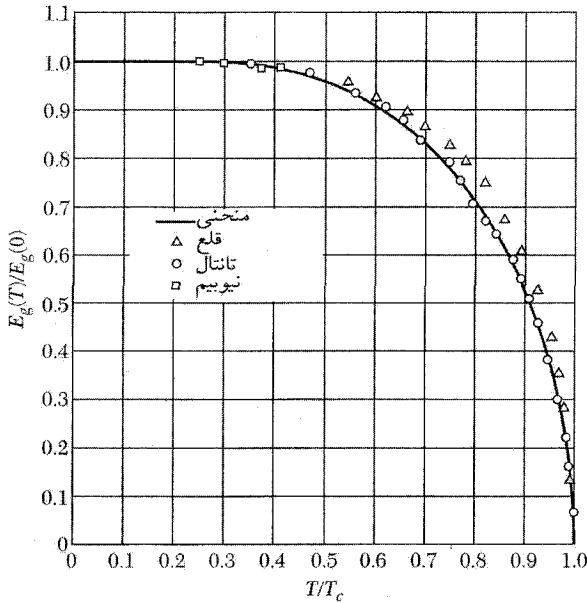


عادی
(الف)



ابررسانا
(ب)

شکل ۹. (الف) نوار رسانش در حالت عادی؛ (ب) گاف انرژی در تراز فرمی در حالت ابررسانش. رفتار الکترونی در حالت‌های برانگیخته بالای گاف در میدان‌های f مانند رفتار الکترونی عادی است، یعنی مقاومت ایجاد می‌کنند؛ در میدان‌های ds الکترونی ابررسانشی این الکترونها را اتصال کوتاه می‌کنند. گاف E_g در شکل به طور مبالغه‌آمیز نشان داده شده است؛ نوعاً $E_g \sim 10^{-4} \epsilon_F$.



شکل ۱۰. مقادیر کاهش یافته گاف انرژی مشاهده شده، $E_g(T)/E_g(0)$ به صورت تابعی از دمای کاهش یافته، T/T_c . منحنی توپر برای نظریه BCS رسم شده است.

مقاومت ویژه ابرسانا برای فوتونهایی که انرژی شان کمتر از گاف انرژی است، در صفر مطلق از بین می رود. در $T \ll T_c$ مقاومت در حالت ابرسانش آستانه تیزی در انرژی گاف دارد. فوتونهای با انرژی کمتر با سطح بدون مقاومتی مواجه می شوند. فوتونهای با انرژی بالاتر از گاف انرژی با مقاومتی مواجه می شوند که به مقاومت حالت عادی می رسد، زیرا چنین فوتونهایی باعث می شوند که گذارهایی به ترازهای انرژی عادی اشغال شده در بالای گاف صورت گیرد.

هنگامی که دما افزایش می یابد، نه تنها انرژی گاف کاهش می یابد، بلکه مقاومت ویژه برای فوتونهایی با انرژی کمتر از انرژی گاف دیگر صفر نمی شود، مگر در بسامد صفر. در بسامد صفر، الکترونهای ابرسانش همه الکترونهای عادی را، که در بالای گاف به گونه گرمایی برانگیخته شده اند، اتصال کوتاه می کنند. در بسامدهای متناهی، لختی الکترونهای ابرسانش مانع می شود که آنها میدان الکتریکی را به طور کامل استتار کنند، در نتیجه الکترونهای عادی که به گونه گرمایی برانگیخته شده اند، اکنون می توانند انرژی جذب کنند (مسئله ۳).

اثر ایزوتوپی

مشاهده شده است که دمای بحرانی ابرساناها با جرم ایزوتوپی تغییر می کند. در جیوه هنگامی که میانگین جرم اتمی M از ۱۹۹٫۵ واحد جرم اتمی به ۲۰۳٫۴ تغییر می کند، T_c از ۴٫۱۸۵K به ۴٫۱۴۶K تغییر

جدول ۴. اثر ایزوتوپی در ابررساناها

مقادیر تجربی α در رابطه $(M^\alpha T_c = \text{ثابت})$ که در آن M جرم ایزوتوپی است			
ماده	α	ماده	α
Zn	0.05 ± 0.045	Ru	0.05 ± 0.00
Cd	0.07 ± 0.032	Os	0.05 ± 0.015
Sn	0.02 ± 0.047	Mo	0.33
Hg	0.03 ± 0.05	Nb ₃ Sn	0.02 ± 0.008
Pb	0.02 ± 0.049	Zr	0.05 ± 0.00

می‌کند. هنگامی که ایزوتوپهای گوناگون یک عنصر را مخلوط می‌کنیم، دمای گذار به گونه همواری تغییر می‌کند. نتایج تجربی در هر رشته از ایزوتوپها را می‌توان با رابطه‌ای به شکل

$$M^\alpha T_c = \text{ثابت} \quad (2)$$

برازش داد. مقادیر مشاهده شده α در جدول ۴ داده شده‌اند.

از وابستگی T_c به جرم ایزوتوپی می‌آموزیم که ارتعاشات شبکه و لذا برهم‌کنشهای الکترون-شبه‌در ابررسانایی نقش مهمی دارند. این یک کشف بنیادی بود: هیچ دلیل دیگری برای وابستگی دمای گذار ابررسانش به تعداد نوترونهای هسته وجود ندارد.

مدل اصلی BCS به نتیجه $M^{-1/2} \propto T_c \propto \theta$ منجر شد، بنابراین در رابطه (۲) داریم $\alpha = \frac{1}{2}$ ، ولی وارد کردن برهم‌کنشهای کولنی بین الکترونها این رابطه را تغییر می‌دهد، یعنی $\alpha = \frac{1}{2}$ قاعده تغییرناپذیری نیست. غیاب اثر ایزوتوپی در Ru و Zr به دلیل ساختار نوار الکترونی این مواد توجیه شده است.

مرور نظری

فهم نظری پدیده‌های مربوط به ابررسانایی از چندین طریق به دست آمده است. بعضی نتایج مستقیماً از ترمودینامیک به دست می‌آیند. بسیاری از نتایج مهم را می‌توان با معادلات پدیده‌شناختی توصیف کرد: معادلات لندن و لاندائو-گینزبرگ (بیوست ط). باردین، کوپر و شریف‌ریک نظریه کوانتومی موفق در مورد ابررسانایی ارائه دادند که پایه مطالعات پیشرفته را فراهم ساخته است. جوزفسون و اندرسون اهمیت فاز تابع موج ابررسانشی را کشف کردند.

ترمودینامیک گذار ابرسانش

از نظر ترمودینامیکی گذار بین حالت‌های عادی و ابرسانش، درست مانند گذار بین فازهای بخار و مایع ماده، برگشت‌پذیر است. بنابراین، ترمودینامیک را می‌توان در مورد این گذار به کار برد، و رابطه‌ای برای اختلاف آنتروپی بین حالت‌های عادی و ابرسانش برحسب منحنی میدان بحرانی H_c برحسب T به دست آورد. این رابطه به معادله فشار بخار برای منحنی همزیستی گاز-مایع (فصل ۱۰ TP) شباهت دارد.

یک ابرسانای نوع I را بررسی می‌کنیم که برای آن اثر مایسنر کامل است، یعنی درون آن $B = 0$ ، خواهیم دید که میدان بحرانی H_c یک مقیاس کمی از اختلاف انرژی بین حالت‌های ابرسانش و عادی در صفر مطلق است. نماد H_c همواره در مورد نمونه حجیم، و نه لایه نازک، به کار می‌رود. در ابرساناهای نوع II، H_c میدان بحرانی ترمودینامیکی در نظر گرفته می‌شود که به انرژی آزاد پایدارسازی مربوط است. انرژی آزاد پایدارسازی حالت ابرسانش را نسبت به حالت عادی می‌توان با اندازه‌گیری‌های گرماسنجی یا مغناطیسی معین کرد. در روش گرماسنجی برای ابرسانا و نیز برای رسانای عادی، یعنی ابرسانایی که در میدان مغناطیسی بزرگتر از H_c باشد، ظرفیت گرمایی به صورت تابعی از دما اندازه‌گیری می‌شود. از تفاضل این ظرفیتهای گرمایی می‌توان تفاوت انرژی را، که همان انرژی آزاد پایدارسازی حالت ابرسانش است، محاسبه کرد. در روش مغناطیسی انرژی آزاد پایدارسازی از مقدار میدان مغناطیسی اعمال شده‌ای به دست می‌آید که حالت ابرسانش را، در دمای ثابت، از بین می‌برد. دلیل این امر در ادامه می‌آید. کار انجام شده روی واحد حجم نمونه ابرسانا را هنگامی در نظر بگیرید که از موقعیتی در بینهایت (که در آن میدان اعمال شده صفر است) به موقعیت \mathbf{r} در میدان آهنربای دائمی آورده شود (شکل ۱۱):

$$W = - \int^{B_a} \mathbf{M} \cdot d\mathbf{B}_a \quad (3)$$

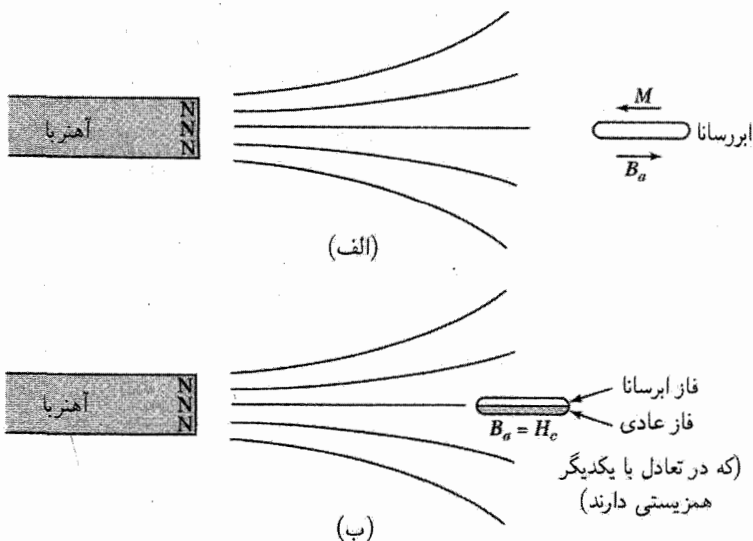
این کار در انرژی میدان مغناطیسی ظاهر می‌شود. اتحاد ترمودینامیکی برای این فرایند، که در فصل ۸ TP آمده، به صورت زیر است

$$dF = -\mathbf{M} \cdot d\mathbf{B}_a \quad (4)$$

در مورد ابرسانایی که برای آن \mathbf{M} با رابطه (۱) که \mathbf{B}_a مربوط می‌شود، داریم

$$(CGS) \quad dF_S = \frac{1}{4\pi} B_a dB_a; \quad (5)$$

$$(SI) \quad \boxed{dF_S = \frac{1}{\mu_0} B_a dB_a}$$



شکل ۱۱. (الف) در ابرسانایی که اثر مایسنر در آن کامل است، $B = 0$ ، گویی مغناطیدگی، در دستگاه CGS، برابر است با $M = -B_a / 4\pi$. (ب) وقتی میدان اعمالی به مقدار B_{ac} می‌رسد، حالت عادی می‌تواند با حالت ابرسانش در تعادل در حال همزیستی باشد. در همزیستی، چگالیهای انرژی آزاد با یکدیگر برابرند: $F_N(T, B_{ac}) = F_S(T, B_{ac})$.

در آوردن ابرسانا از موقعیتی که در آن میدان اعمال شده B_a است، افزایش چگالی انرژی آزاد ابرسانا عبارت است از

$$(CGS) \quad F_S(B_a) - F_S(0) = B_a^2 / 8\pi; \quad (6)$$

(SI)

$$F_S(B_a) - F_S(0) = B_a^2 / 2\mu_0$$

اکنون یک فلز عادی غیرمغناطیسی در نظر بگیرید. اگر از پذیرفتاری کم فلز^۱ در حالت عادی چشم‌پوشی کنیم، $M = 0$ و انرژی فلز عادی مستقل از میدان خواهد بود. در میدان بحرانی داریم

$$F_N(B_{ac}) = F_N(0) \quad (7)$$

۱. این فرض برای ابرسانای نوع I کافی است. در ابرساناهای نوع II، در میدانهای بالا تغییر در پارامغناطیس اسپینی الکترونهای رسانشی، انرژی فلز عادی را به طور قابل ملاحظه‌ای پایین می‌آورد. در برخی ابرساناهای نوع II، نه در همه آنها، این اثر میدان بحرانی بالایی را محدود می‌کند. کلاگستون پیشنهاد کرده است که $H_{c2}(max) = 1.84 \times 10^4 T_c$ که در آن H_{c2} برحسب گاوس و T_c برحسب K است.

نتایج (۶) و (۷) برای تعیین انرژی پایدارسازی حالت ابررسانش در صفر مطلق کافی‌اند. در مقدار بحرانی میدان مغناطیسی اعمال‌شده، B_{ac} ، انرژی حالت‌های عادی و ابررسانش برابرند:

$$(CGS) \quad F_N(B_{ac}) = F_S(B_{ac}) = F_S(\circ) + B_{ac}^2 / 8\pi; \quad (۸)$$

$$(SI) \quad \boxed{F_N(B_{ac}) = F_S(B_{ac}) = F_S(\circ) + B_{ac}^2 / 2\mu_0}$$

در دستگاه SI، $H_c \equiv B_{ac} / \mu_0$ ، در حالی که در دستگاه CGS، $H_c \equiv B_{ac}$ ، هنگامی که میدان اعمال‌شده با میدان بحرانی برابر باشد، نمونه در هر دو حالت پایدار است. اکنون به کمک رابطه (۷) نتیجه می‌شود که

$$(CGS) \quad \Delta F \equiv F_N(\circ) - F_S(\circ) = B_{ac}^2 / 8\pi \quad (۹)$$

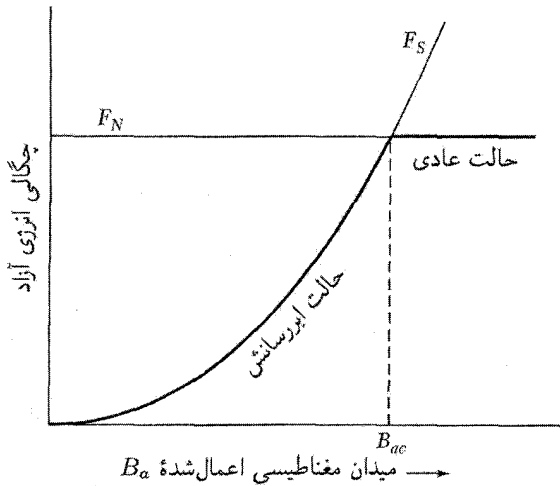
که در آن ΔF چگالی انرژی آزاد پایدارسازی حالت ابررسانش است. برای آلومینیم، در صفر مطلق برابر با ۱۰۵ گاوس است، در نتیجه در صفر مطلق $\Delta F = (۱۰۵)^2 / 8\pi = ۴۳۹ \text{ erg cm}^{-3}$ ، که با نتیجه اندازه‌گیری‌های گرمایی ۴۳۰ erg cm^{-3} توافق بسیار خوبی دارد.

در دمای متناهی، فازهای عادی و ابررسانش، به شرطی با یکدیگر در تعادل‌اند که میدان مغناطیسی چنان باشد که انرژی آزادشان، $F = U - TS$ ، با یکدیگر برابر باشند، انرژی آزاد این دو فاز در شکل ۱۲ به صورت تابعی از میدان مغناطیسی ترسیم شده‌اند. منحنیهای تجربی انرژی آزاد این دو فاز در آلومینیم در شکل ۷ ترسیم شده‌اند. شبیهی dF/dT در دمای گذار برابرند، در نتیجه گرمای نهان وجود ندارد.

معادله لندن

دیدیم که از اثر مایسنر نتیجه می‌شود که در حالت ابررسانش پذیرفتاری مغناطیسی برابر است با $\chi = -1/4\pi$ در CGS، یا $\chi = -1$ در SI. آیا می‌توان یک معادله اساسی الکتروپدینامیکی (مانند قانون اهم) را به صورتی تغییر داد تا اثر مایسنر به دست آید؟ خود معادلات ماکسول را نمی‌خواهیم تغییر دهیم. رسانش الکتریکی فلز در حالت عادی با قانون اهم، $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$ ، توصیف می‌شود. برای توصیف رسانش و اثر مایسنر در حالت ابررسانش لازم است این رابطه را به طور قابل ملاحظه‌ای تغییر دهیم. اصل موضوعی فرض می‌کنیم و می‌بینیم چه پیش می‌آید.

فرض می‌کنیم که در حالت ابررسانش چگالی جریان مستقیماً با پتانسیل برداری \mathbf{A} ی میدان مغناطیسی موضعی، $\mathbf{B} = \text{curl} \mathbf{A}$ ، متناسب باشد. در دستگاه CGS ثابت تناسب را، به دلایلی که بعداً آشکار می‌شود، به صورت $-c/4\pi \lambda_L^2$ می‌نویسیم. در اینجا c سرعت نور و λ_L ثابتی با بعد طول است. در



شکل ۱۲. چگالی انرژی آزاد F_N فلز عادی غیرمغناطیسی تقریباً مستقل از شدت میدان مغناطیسی اعمال شده B_a است. در دمای $T < T_c$ ، این فلز در میدان مغناطیسی صفر ابررساناست، در نتیجه $F_S(T, \circ)$ از $F_N(T, \circ)$ پایینتر است. میدان مغناطیسی اعمال شده، در دستگاه CGS، F را به اندازه $B_a^2 / 4\pi$ افزایش می دهد، در نتیجه $F_S(T, B_a) = F_S(T, \circ) + B_a^2 / 4\pi$. اگر B_a از میدان بحرانی B_{ac} بزرگتر باشد، چگالی انرژی آزاد در حالت عادی پایینتر از حالت ابررسانش است، و در این صورت حالت عادی پایدار است. در این نمودار مبدأ محور عمودی در $F_S(T, \circ)$ قرار دارد. در $T = \circ$ این شکل به طور مساوی در مورد U_N و U_S صادق است.

دستگاه SI ثابت تناسب را به صورت $1/\mu_0 \lambda_L^2$ می نویسیم. بنابراین

$$(CGS) \quad \mathbf{j} = -\frac{c}{4\pi\lambda_L^2} \mathbf{A}; \quad (SI) \quad \mathbf{j} = -\frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2} \mathbf{A} \quad (10)$$

این رابطه معادله لندن است. با گرفتن تاو از هر دو طرف بیان دیگری از این معادله به دست می آوریم

$$(CGS) \quad \text{curl} \mathbf{j} = -\frac{c}{4\pi\lambda_L^2} \mathbf{B}; \quad (SI) \quad \text{curl} \mathbf{j} = -\frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2} \mathbf{B} \quad (11)$$

باید دانست که پتانسیل برداری در معادله لندن (۱۰) برحسب پیمانه لندن نوشته می شود، که در آن $\text{div} \mathbf{A} = \circ$ و روی هر سطح خارجی که از آن هیچ جریانی نمی گذرد، $\mathbf{A}_n = \circ$. شاخص پایین n نشانگر مؤلفه عمود بر سطح است. بنابراین $\text{div} \mathbf{j} = \circ$ و $\mathbf{j}_n = \circ$ ، که شرایط مرزی فیزیکی واقعی اند. معادله (۱۰) در مورد ابررسانایی با اتصال ساده صادق است؛ در مورد حلقه یا استوانه ممکن است جملات اضافی موجود باشند، ولی رابطه (۱۱) مستقل از هندسه ابررسانا برقرار است. نخست نشان می دهیم که معادله لندن به اثر مایسنر می انجامد. با استفاده از معادله ماکسول تحت

شرایط استاتیکی می‌دانیم که

$$(CGS) \quad \text{curl} \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}; \quad \boxed{(SI) \quad \text{curl} \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j}} \quad (12)$$

با تاو گرفتن از دو طرف خواهیم یافت

$$(CGS) \quad \text{curl curl} \mathbf{B} = -\nabla^2 \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \text{curl} \mathbf{j};$$

$$(SI) \quad \boxed{\text{curl curl} \mathbf{B} = -\nabla^2 \mathbf{B} = \mu_0 \text{curl} \mathbf{j};}$$

که می‌توان آن را با معادله لندن (۱۱) ترکیب کرد تا برای ابرسانا رابطه زیر حاصل شود

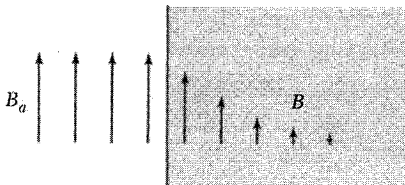
$$\nabla^2 \mathbf{B} = \frac{\mathbf{B}}{\lambda_L^2} \quad (13)$$

این معادله اثر مایسنر را توجیه می‌کند، زیرا برای آن پاسخ یکنواختی در فضا وجود ندارد، در نتیجه میدان مغناطیسی یکنواخت ممکن نیست در ابرسانا وجود داشته باشد. یعنی، ثابت $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}_0 =$ یک پاسخ برای رابطه (۱۳) نیست، مگر آنکه میدان ثابت \mathbf{B}_0 متحد با صفر باشد. این نتیجه پیامد آن است که $\nabla^2 B_0$ همواره صفر است ولی $\mathbf{B}_0 / \lambda_L^2$ صفر نیست مگر $\mathbf{B}_0 = 0$ صفر باشد. علاوه بر این توجه کنید که رابطه (۱۲) ثابت می‌کند که هر جا $\mathbf{B} = 0$ داریم $\mathbf{j} = 0$.

در حالت ابرسائش خالص، تنها میدان مجاز میدانی است که از سطح خارجی به طرف داخل به صورت نمایی میرا می‌شود. فرض کنید یک ابرسانای نیمه‌نامتناهی فضا را، مانند شکل ۱۳، در طرف مثبت محور x ها اشغال کند. اگر $B(0)$ میدان روی مرز تخت باشد، در این صورت میدان در داخل برابر است با

$$B(x) = B(0) \exp(-x/\lambda) \quad (14)$$

زیرا این پاسخی برای رابطه (۱۳) است. در این مثال فرض می‌شود که میدان مغناطیسی موازی با مرز باشد. بدین ترتیب می‌بینیم که λ_L عمق نفوذ میدان مغناطیسی را اندازه‌گیری می‌کند، که به عمق نفوذ لندن معروف است. عمقهای نفوذ واقعی دقیقاً با λ_L به تنهایی توصیف نمی‌شوند، زیرا اکنون آشکار شده است



شکل ۱۳. نفوذ میدان مغناطیسی اعمال شده در ابرسانای نیمه‌نامتناهی. عمق نفوذ λ به صورت فاصله‌ای تعریف می‌شود که در آن میدان با ضریب e^{-1} کاهش می‌یابد. به طور نوعی، در ابرسانای خالص $\lambda \approx 50 \text{ \AA}$.

جدول ۵. طول همدوسی ذاتی و عمق نفوذ لندن که در صفر مطلق محاسبه شده‌اند

λ/ξ_0	عمق نفوذ لندن		فلز
	برحسب 10^{-6} cm		
	طول همدوسی ذاتی	عمق نفوذ لندن	
	برحسب 10^{-6} cm		
۰٫۱۶	۲۳	۳٫۴	Sn
۰٫۱۰	۱۶۰	۱٫۶	Al
۰٫۴۵	۸٫۳	۳٫۷	Pb
۰٫۱۴	۷۶	۱۱٫۰	Cd
۱٫۰۲	۳٫۸	۳٫۹	Nb

که معادله لندن بیش از اندازه ساده شده است. از مقایسه رابطه (۲۲) با معادله (۱۱) برای ذراتی با بار q و جرم m و غلظت n داریم

$$(CGS) \quad \lambda_L = (mc^2/4\pi nq^2)^{1/2}; \quad (SI) \quad \lambda_L = (\epsilon_0 mc^2/nq^2)^{1/2} \quad (14 \text{ الف})$$

مقادیر λ_L در جدول ۵ داده شده‌اند.

میدان اعمال شده B_a در لایه نازک در صورتی به طور نسبتاً یکنواخت نفوذ خواهد کرد که ضخامت آن بسیار کمتر از λ_L باشد؛ بنابراین در لایه نازک اثر مایسنر کامل نیست. در لایه نازک میدان القاشده بسیار کوچکتر از B_a است، و B_a اثر اندکی روی چگالی انرژی حالت ابررسانش دارد، بنابراین معادله (۶) صادق نیست. چنین برمی آید که میدان بحرانی H_c ی لایه‌های نازک در میدانهای مغناطیسی موازی باید بسیار بالا باشد.

طول همدوسی

عمق نفوذ لندن، λ_L ، یک طول اساسی برای مشخص کردن ابررساناست. طول همدوسی ξ طول مستقل دیگری است. طول همدوسی مقیاسی است از فاصله‌ای که در آن غلظت الکترون ابررسانش نمی‌تواند به طور قابل ملاحظه‌ای در میدان مغناطیسی متغیر در فضا تغییر کند.

معادله لندن معادله‌ای موضعی است: این معادله چگالی جریان را در نقطه \mathbf{r} به پتانسیل برداری در همان نقطه مربوط می‌کند. مادامی‌که $\mathbf{z}(\mathbf{r})$ به صورت یک ثابت ضرب در $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ داده می‌شود، جریان دقیقاً باید هر تغییری را در پتانسیل برداری دنبال کند. ولی طول همدوسی ξ مقیاسی است از گستره‌ای

که باید روی آن میانگین A گرفته شود تا z به دست آید. همچنین، این طول مقیاسی است از کمینه اندازه فضایی لایه گذار بین حالت‌های ابرسانی و عادی. طول همدوسی از طریق معادلات لاندائو-گینزبرگ به بهترین نحو در نظریه ابرسانایی وارد می‌شود (پیوست ط). اکنون برای انرژی مورد نیاز جهت مدوله کردن غلظت الکترون ابرسانش استدلالی توجیهی ارائه می‌کنیم.

هر تغییر فضایی در حالت دستگاه الکترونی به انرژی جنبشی اضافی نیاز دارد. مدولاسیون ویژه تابع، انرژی را افزایش می‌دهد، زیرا مدولاسیون باعث افزایش انتگرال $d^2\varphi/dx^2$ می‌شود. منطقی است که تغییر فضایی $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ را به گونه‌ای محدود کنیم که انرژی اضافی کمتر از انرژی پایدارسازی حالت ابرسانش باشد. موج تخت $\psi(x) = e^{ikx}$ را با تابع موج زیر که قویاً مدوله شده است مقایسه می‌کنیم:

$$\varphi(x) = 2^{-1/2}(e^{i(k+q)x} + e^{ikx}) \quad (الف ۱۵)$$

چگالی احتمال مربوط به موج تخت در فضا یکنواخت است: $\psi^*\psi = e^{-ikx}e^{ikx} = 1$ ، در حالی که $\varphi^*\varphi$ با بردار موج q مدوله می‌شود:

$$\begin{aligned} \varphi^*\varphi &= \frac{1}{2}(e^{-i(k+q)x} + e^{-ikx})(e^{i(k+q)x} + e^{ikx}) \\ &= \frac{1}{2}(2 + e^{iqx} + e^{-iqx}) = 1 + \cos qx \end{aligned} \quad (ب ۱۵)$$

انرژی جنبشی موج $\psi(x)$ برابر است با $\epsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$ ؛ انرژی جنبشی توزیع چگالی مدوله شده بالاتر است، زیرا

$$\int dx \varphi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \varphi = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) [(k+q)^2 + k^2] \cong \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \frac{\hbar^2}{2m} kq$$

که در آن به علت آنکه $k \ll q$ از چشم پوشیده‌ایم.

افزایش انرژی لازم برای مدوله کردن برابر است با $\hbar^2 kq / 2m$. اگر این افزایش از انرژی گاف F_g بیشتر باشد، ابرسانایی از بین می‌رود. مقدار بحرانی q_c برای بردار موج مدولاسیون با رابطه زیر داده می‌شود

$$\frac{\hbar^2}{2m} k_F q_c = E_g \quad (الف ۱۶)$$

طول همدوسی ذاتی ξ را تعریف می‌کنیم که با رابطه $\xi = 1/q_c = 2m/\hbar^2 k_F$ به مدولاسیون بحرانی مربوط می‌شود.

داریم

$$\xi_c = \hbar^2 k_F / 2m E_g = \hbar v_F / 2 E_g \quad (ب ۱۶)$$

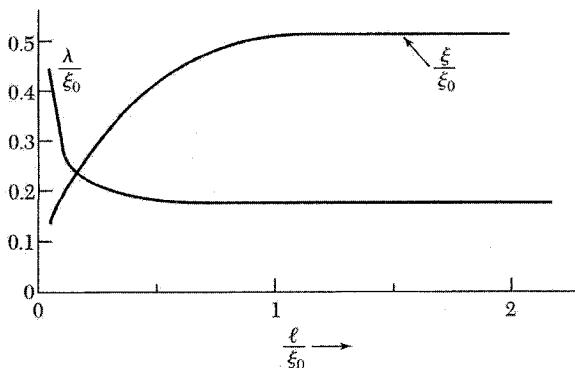
که در آن v_F سرعت الکترون در سطح فرمی است. در نظریه BCS نتیجه مشابهی به دست می‌آید:

$$\xi_0 = 2\hbar v_F / \pi E_g \quad (17)$$

مقادیر محاسبه شده ξ_0 از معادله (۱۷) در جدول ۵ داده شده‌اند. طول همدوسی ذاتی ξ_0 مشخصه ابررسانای خالص است.

در مواد ناخالص و آلیاژها طول همدوسی ξ از ξ_0 کوتاهتر است. این مطلب را می‌توان به‌طور کیفی فهمید: در ویژه‌تاب‌های الکترون در ماده ناخالص، از قبل تکانهای مختصری وجود دارد: در صورتی که به‌جای توابع موج هموار از توابع موجی با تکانهای مختصر استفاده کنیم می‌توانیم تغییری موضعی در چگالی جریان با انرژی کمتر ایجاد کنیم.

طول همدوسی اولین بار در معادلات لاندائو-گیتزبرگ پدیدار شد؛ این معادلات نیز از نظریه BCS نتیجه می‌شوند. این معادلات ساختار لایه گذار را بین فازهای عادی و ابررسانش در حال تماس توصیف می‌کنند. طول همدوسی و عمق نفوذ واقعی λ به مسیر آزاد میانگین، l ، الکترونها در حالت عادی بستگی دارند؛ روابط مربوط در شکل ۱۴ نشان داده شده‌اند. هنگامی که ابررسانا خیلی ناخالص باشد، l بسیار کوچک خواهد بود، پس $\xi \approx (\xi_0 l)^{1/2}$ و $\lambda \approx \lambda_L (\xi_0 / l)^{1/2}$ در نتیجه $\lambda / \xi \approx \lambda_L / l$. این حد «ابررسانای کثیف» است. نسبت λ / ξ را با κ نشان می‌دهند.



شکل ۱۴. عمق نفوذ λ و طول همدوسی ξ به‌صورت تابعی از مسافت آزاد میانگین l الکترونهای رسانش در حالت عادی. همه طولها برحسب ξ_0 ، طول همدوسی ذاتی، بیان شده‌اند. منحنیها برای $\lambda_L = 10 \lambda_L$ ترسیم شده‌اند. برای مسافتهای آزاد میانگین کوتاه، طول همدوسی کوتاهتر و عمق نفوذ بلندتر می‌شود. افزایش نسبت $\kappa \lambda / \xi$ حاکی از وقوع ابررسانایی نوع II است.

نظریه BCS در مورد ابرسانایی

بنیاد نظریه کوانتومی ابرسانایی با مقاله کلاسیک باردین، کوپر، و شریف در سال ۱۹۵۷ نهاده شد. «نظریه BCS در مورد ابرسانایی» دارای گستره بسیار وسیعی است از کاربردپذیری، از اتمهای He^3 در فاز چگالی‌شان تا ابرساناهای فلزی نوع I و نوع II، و تا ابرساناهای با دمای بالا بر مبنای صفحات یونهای مسین. علاوه بر این یک «تابع موج BCS» مرکب از زوج ذره‌های $k \uparrow$ و $k \downarrow$ وجود دارد، که وقتی توسط نظریه BCS بررسی شود، ابرسانایی الکترونی معمولی را ارائه می‌کند و گافهای انرژی جدول ۳ را نشان می‌دهد. این زوج‌شدگی موسوم به زوج‌شدگی موج s است. شکلهای ممکن دیگری برای زوج‌شدگی ذره به غیر از نظریه BCS نیز وجود دارند، ولی در اینجا مجبور نیستیم غیر از تابع موج BCS را در نظر بگیریم. در این فصل به بررسی دستاوردهای خاص نظریه BCS با تابع موج BCS می‌پردازیم که شامل موارد زیر است:

۱. برهم‌کنش جاذب بین الکترونها می‌تواند به حالت پایه‌ای منجر شود که با گاف انرژی از حالت‌های برانگیخته جدا می‌شود. میدان بحرانی، ویژگیهای گرمایی، و اغلب ویژگیهای الکترومغناطیسی پیامدهای این گاف انرژی‌اند.

۲. برهم‌کنش الکترون-شبه‌الکترون به گاف انرژی با بزرگی مشاهده‌شده منجر می‌شود. این برهم‌کنش غیرمستقیم هنگامی انجام می‌گیرد که یک الکترون با شبکه برهم‌کنش کند و آن را تغییر شکل دهد؛ الکترون دوم با شبکه تغییرشکل‌یافته مواجه می‌شود و خود را به‌گونه‌ای تنظیم می‌کند که از این تغییر شکل استفاده کند و انرژی‌اش را پایین بیاورد. در نتیجه، الکترون دوم از طریق تغییرشکل شبکه با الکترون اول برهم‌کنش می‌کند.

۳. عمق نفوذ و طول همدوسی به‌صورت پیامدهای طبیعی نظریه BCS بروز می‌کنند. معادله لندن برای میدانهای مغناطیسی که در فضا به آهستگی تغییر می‌کنند، به‌دست می‌آید. بنابراین پدیده اصلی در ابرسانایی، اثر مایسنر، به‌طور طبیعی به‌دست می‌آید.

۴. معیار دمای گذار یک عنصر یا آلیاژ متضمن چگالی اوربیتالهای الکترونی $D(\epsilon_F)$ در تراز فرمی و برهم‌کنش الکترون-شبه‌الکترون U است که می‌توان آن را از مقاومت ویژه الکتریکی برآورد کرد زیرا مقاومت ویژه در دمای اتاق مقیاسی از برهم‌کنش الکترون-فونون است. نظریه BCS برای $UD(\epsilon_F) \ll 1$ رابطه زیر را پیش‌بینی می‌کند

$$T_c = 1.14 \theta \exp[-1/UD(\epsilon_F)] \quad (18)$$

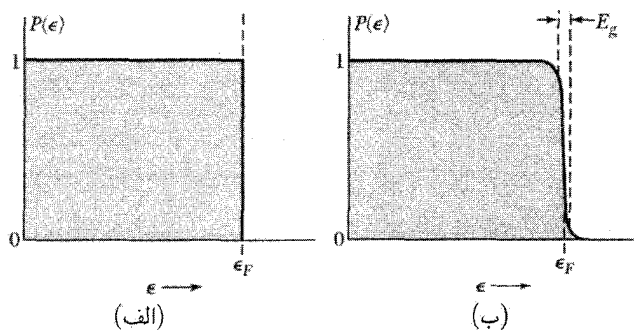
که در آن θ دمای دبی و U برهم‌کنش جاذب است. داده‌های آزمایشی، حداقل به‌طور کیفی، در این نتیجه برای T_c صدق می‌کنند. پارادوکس ظاهری جالبی وجود دارد: هر چه مقاومت ویژه در دمای اتاق بیشتر باشد U بیشتر است و بنابراین احتمال آنکه فلز با سرد شدن ابرسانا شود، بیشتر است.

۵. شار مغناطیسی که از حلقه ابرسانا می‌گذرد کوانتومی است و واحد بار مؤثر به جای e ، $2e$ است. حالت پایه BCS متضمن زوج الکترون‌هاست؛ بدین ترتیب کوانتومی شدن شار برحسب زوج بار $2e$ پیامدی از این نظریه است.

حالت پایه BCS

حالت پایه گاز فرمی از الکترون‌های بدون برهم‌کنش به صورت دریای فرمی پر است. از این حالت می‌توان برانگیختگی‌های کم دلخواه را به دست آورد. یک حالت برانگیخته را می‌توان با برداشتن یک الکترون از سطح فرمی و بالابردن آن تا بالای سطح فرمی تشکیل داد. نظریه BCS نشان می‌دهد که با برهم‌کنش جاذب مناسب بین الکترون‌ها، حالت پایه جدید ابرسانا خواهد بود. این حالت پایه با انرژی متناهی E_g از پایتترین حالت برانگیخته خود جدا می‌شود.

تشکیل حالت پایه BCS در شکل ۱۵ پیشنهاد شده است. حالت BCS در (ب) شامل مخلوط‌هایی از اوربیتال‌های یک الکترونی در بالای انرژی فرمی ϵ_F است. در اولین نگاه به نظر می‌رسد که حالت BCS انرژی بالاتری از حالت فرمی دارد؛ مقایسه (ب) با (الف) نشان می‌دهد که انرژی جنبشی حالت BCS بالاتر از انرژی جنبشی حالت فرمی است. ولی انرژی پتانسیل جاذب حالت BCS، گرچه در شکل نشان داده نشده است، چنان عمل می‌کند که انرژی کل حالت BCS را نسبت به حالت فرمی پایین می‌آورد. هنگامی که حالت پایه BCS یک دستگاه بس‌الکترونی برحسب اشغال‌شدگی اوربیتال‌های یک ذره‌ای بیان می‌شود، اوربیتال‌هایی که به ϵ_F نزدیک‌اند تا حدی شبیه به توزیع فرمی-دیراک در دمای متناهی پر می‌شوند.



شکل ۱۵. (الف) احتمال P برای اینکه اوربیتالی با انرژی جنبشی ϵ در حالت پایه گاز فرمی بدون برهم‌کنش اشغال شود؛ (ب) در ناحیه‌ای که پهنای آن از مرتبه گاف انرژی E_g است، حالت پایه BCS با حالت فرمی تفاوت دارد. هر دو منحنی برای صفر مطلق ترسیم شده‌اند.

جنبه اصلی حالت BCS این است که اوربیتالهای یک ذره‌ای به صورت زوج اشغال می‌شوند: اگر اوربیتالی با بردار موج k و اسپین رو به بالا اشغال شده باشد، در این صورت اوربیتال، با بردار موج $-k$ و با اسپین رو به پایین نیز اشغال می‌شود. اگر $k \uparrow$ خالی باشد، در این صورت $k \downarrow$ نیز خالی خواهد بود. این زوجها را زوجهای کوپر می‌نامند، که در پیوست ح بررسی می‌شوند. آنها دارای اسپین صفرند، و بسیاری از صفات بوزونها را دارند.

کوانتیدگی شار در حلقه ابرسانا

ثابت می‌کنیم که شار مغناطیسی کلی که از حلقه ابرسانا می‌گذرد فقط مقادیر کوانتومی، یعنی مضارب صحیحی از کوانتوم شار $2\pi\hbar c/q$ ، را اختیار می‌کند که به طور تجربی $q = 2e$ بار مربوط به زوج الکترون است. کوانتس شار مثال زیبایی از اثر کوانتومی بلندبرد است که در آن همدوسی حالت ابرسانش روی حلقه یا سیملوله گسترش می‌یابد.

نخست میدان الکترومغناطیسی را مثالی از میدان بوزونی مشابه در نظر می‌گیریم. شدت میدان الکتریکی $E(\mathbf{r})$ به طور کیفی مانند دامنه میدان احتمال عمل می‌کند. هنگامی که تعداد کل فوتونها زیاد باشد، چگالی انرژی را می‌توان چنین نوشت

$$E^*(\mathbf{r})E(\mathbf{r})/4\pi \cong n(\mathbf{r})\hbar\omega$$

که در آن $n(\mathbf{r})$ چگالی تعداد فوتونهای با بسامد ω است. در این صورت میدان الکتریکی را می‌توان، در تقریب نیمه‌کلاسیکی، چنین نوشت

$$E(\mathbf{r}) \cong (\hbar\omega)^{1/2} n(\mathbf{r})^{1/2} e^{i\theta(\mathbf{r})} \quad E^*(\mathbf{r}) \cong (\hbar\omega)^{1/2} n(\mathbf{r})^{1/2} e^{-i\theta(\mathbf{r})}$$

که در آن $\theta(\mathbf{r})$ فاز میدان است. دامنه احتمال مشابهی زوجهای کوپر را توصیف می‌کند. استدلال زیر در مورد گاز بوزونی، شامل تعداد زیادی بوزون در یک اوربیتال، صادق است. در این صورت دامنه احتمال بوزون را می‌توان، درست همان‌گونه که میدان الکترومغناطیسی در مورد فوتونها به‌کار می‌رود، به صورت کمیت کلاسیکی در نظر گرفت. بنابراین دامنه و فاز هر دو بامعنی و مشاهده‌پذیرند. این استدلال در مورد فلزی در حالت عادی صادق نیست، زیرا الکترون در حالت عادی مانند یک تک فرمیون بدون زوج عمل می‌کند که با آن نمی‌توان به‌گونه کلاسیکی رفتار کرد.

نخست نشان می‌دهیم که گاز بوزون بردار از معادله لندن پیروی می‌کند. فرض کنید $\psi(\mathbf{r})$ دامنه احتمال ذره باشد. فرض می‌کنیم غلظت زوجها برابر باشد با ثابت $n = \psi^*\psi$. در صفر مطلق n برابر نصف غلظت الکترونها در نوار رسانش است، زیرا n تعداد زوجهاست. در این صورت می‌توان نوشت

$$\psi = n^{1/2} e^{i\theta(\mathbf{r})}; \quad \psi^* = n^{1/2} e^{-i\theta(\mathbf{r})} \quad (19)$$

فاز $\theta(\mathbf{r})$ به دلیل آنچه در زیر می آید مهم است. در دستگاه SI در معادلات زیر $c = 1$ را قرار دهید. سرعت ذره، با استفاده از معادلات هامیلتونی مکانیک، برابر است با

$$(CGS) \quad \mathbf{v} = \frac{1}{m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) = \frac{1}{m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)$$

شماره ذره چنین است

$$\psi^* \mathbf{v} \psi = \frac{n}{m} \left(\hbar \nabla \theta - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \quad (20)$$

به گونه ای که چگالی جریان الکتریکی برابر است با

$$\mathbf{j} = q \psi^* \mathbf{v} \psi = \frac{nq}{m} \left(\hbar \nabla \theta - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \quad (21)$$

با تاوگیری از دو طرف این رابطه و با استفاده از این واقعیت که تاوگرادیان کمیت نرده ای متحداً برابر صفر است، معادله لندن را به دست می آوریم:

$$\text{curl } \mathbf{j} = -\frac{nq^2}{mc} \mathbf{B} \quad (22)$$

ثابتی که در \mathbf{B} صرف شده با رابطه (۱۴ الف) سازگار است. خاطر نشان می سازد که اثر مایسنر پیامدی از معادله لندن است، که در اینجا به دست آمد.

کوانتیدگی شار مغناطیسی حلقه پیامد برجسته ای از معادله (۲۱) است. در داخل ماده ابررسانا مسیر بسته C را که کاملاً از سطح ابررسانا دور است، انتخاب می کنیم (شکل ۱۶). اثر مایسنر به ما اطلاع می دهد که \mathbf{B} و \mathbf{j} درون ابررسانا صفر است. اکنون رابطه (۲۱) در صورتی صفر است که

$$\hbar c \nabla \theta = q \mathbf{A} \quad (23)$$

برای تغییر فاز در پیمودن یک دور حلقه رابطه زیر را می نویسیم

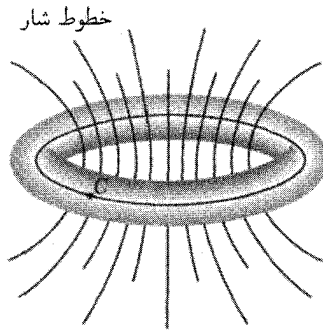
$$\oint_C \nabla \theta \cdot d\mathbf{l} = \theta_2 - \theta_1$$

دامنه احتمال ψ را در تقریب کلاسیکی می توان اندازه گیری کرد، در نتیجه ψ باید تک مقدار باشد و

$$\theta_2 - \theta_1 = 2\pi s \quad (24)$$

که در آن s عدد درست است. به کمک قضیه استوکس داریم

$$\oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \int_C (\text{curl } \mathbf{A}) \cdot d\boldsymbol{\sigma} = \int_C \mathbf{B} \cdot d\boldsymbol{\sigma} = \Phi \quad (25)$$



شکل ۱۶. مسیر انتگرال‌گیری C در دورن حلقهٔ ابرسانا. شاری که از حلقه می‌گذرد برابر است با مجموع شار Φ_{ext} ، مربوط به چشمه‌های خارجی، و Φ_{sc} ناشی از جریانهای ابرسانیایی که در سطح حلقه جریان دارند؛ $\Phi = \Phi_{\text{ext}} + \Phi_{\text{sc}}$. شار Φ کوانتیده است. معمولاً هیچ شرطی برای کوانتش شار ناشی از چشمه‌های خارجی وجود دارند، در نتیجه Φ_{sc} باید به‌گونه‌ای خود را تنظیم کند که Φ یک مقدار کوانتیده اختیار کند.

که در آن $d\sigma$ عنصر مساحت روی سطحی است که با منحنی C محصور شده و Φ شار مغناطیسی است که از حلقهٔ C می‌گذرد. از روابط (۲۳)، (۲۴)، و (۲۵) داریم $2\pi\hbar cs = q\Phi$ یا

$$\Phi = (2\pi\hbar c/q)s \quad (26)$$

بنابراین شاری که از حلقه می‌گذرد کوانتیده و به‌صورت مضربهای درستی از $2\pi\hbar c/q$ است. به‌طور تجربی $q = -2e$ که همان بار مناسب زوج الکترونهاست و در نتیجه کوانتوم شار ابرسانا برابر است با

$$\Phi_0 = 2\pi\hbar c/2e \cong 2.0678 \times 10^{-7} \text{G cm}^2; \quad (\text{CGS})$$

$$\Phi_0 = 2\pi\hbar/2e \cong 2.0678 \times 10^{-15} \text{T m}^2 \quad (\text{SI}) \quad (27)$$

این کوانتوم شار را فلوکسویید یا فلوکسون می‌نامند.

شاری که از حلقه می‌گذرد برابر است با مجموع شار Φ_{ext} ، ناشی از چشمه‌های خارجی، و شار Φ_{sc} ، ناشی از جریانهای ماندگار ابرسانیایی که در سطح حلقه جاری‌اند: $\Phi = \Phi_{\text{ext}} + \Phi_{\text{sc}}$. شار Φ کوانتیده است. معمولاً هیچ شرطی برای کوانتش شار ناشی از چشمه‌های خارجی وجود ندارد، در نتیجه Φ_{sc} باید به‌گونه‌ای خود را تنظیم کند که Φ یک مقدار کوانتیده اختیار کند.

دوام جریانهای ماندگار

جریان ماندگاری را در نظر بگیرید که در حلقه‌ای از ابررسانای نوع I به طول L و سطح مقطع A جاری است. این جریان ماندگار شاری را داخل حلقه برقرار می‌کند که برابر با تعداد درستی از فلوکسویدهای رابطه (۲۷) است. فلوکسویید نمی‌تواند از حلقه به خارج نشت کند و در نتیجه جریان ماندگار را کاهش دهد، مگر آنکه به دلیل افت و خیزهای گرمایی حجم کمینه‌ای از حلقه ابررسانا برای یک لحظه به حالت عادی درآید. احتمال در واحد زمان برای اینکه فلوکسویید به خارج نشت کند برابر است با حاصلضرب زیر

$$P = (\text{عامل سد فعال سازی}) (\text{فراوانی کوششها}) \quad (28)$$

عامل سد فعال سازی برابر با $\exp(-\Delta F/k_B T)$ است، که در آن انرژی آزاد شده برابر است با

$$\Delta F \approx (\text{فزونی چگالی انرژی آزاد حالت عادی}) (\text{حجم کمینه})$$

حجم کمینه‌ای از حلقه که باید به حالت عادی برگردد تا فرار فلوکسویید را میسر سازد از مرتبه $R\xi^2$ است، که در آن ξ طول همدوسی ابررسانا و R ضخامت سیم است. فزونی چگالی انرژی آزاد حالت عادی برابر با $H_c^2/8\pi$ است، در نتیجه انرژی آزاد سد برابر است با

$$\Delta F \approx R\xi^2 H_c^2/8\pi \quad (29)$$

فرض کنید ضخامت سیم برابر با 10^{-4} cm، طول همدوسی مساوی با 10^{-4} cm باشد و $H_c = 10^3$ G؛ در این صورت $\Delta F \approx 10^{-7}$ erg خواهد شد. هنگامی که از پایین به دمای گذار نزدیک می‌شویم، ΔF به صفر کاهش می‌یابد، ولی مقدار داده شده فوق تخمین مناسبی بین صفر مطلق و $8T_c$ است. بدین ترتیب عامل سد فعال سازی برابر است با

$$\exp(-\Delta F/k_B T) \approx \exp(-10^8) \approx 10^{-(4.34 \times 10^7)}$$

فراوانی مشخصه‌ای که برای آن کمینه حجم بتواند حالتش را تغییر دهد باید از مرتبه E_g/\hbar باشد. اگر $E_g = 10^{-15}$ erg، فراوانی کوششها در حدود $10^{12} \text{ s}^{-1} \approx 10^{-27}/10^{-15}$ می‌شود. احتمال نشت (۲۸) به صورت زیر درمی‌آید

$$P \approx 10^{12} 10^{-4.34 \times 10^7} \text{ s}^{-1} = 10^{-4.34 \times 10^7} \text{ s}^{-1}$$

وارونه این مقدار، مقیاسی از زمان لازم برای نشت فلوکسویید به خارج است، $T = 1/P = 10^{4.34 \times 10^7} \text{ s}$

عمر جهان فقط 10^{18} است، بنابراین تحت شرایط فرض شده فلوکسوید هرگز در عمر این جهان به خارج نشت نخواهد کرد. بنابراین، جریان برقرار خواهد ماند.

در دو وضعیت زیر انرژی فعال سازی خیلی پایینتر است و می توان نشت فلوکسوید را به خارج حلقه مشاهده کرد. یکی اینکه دمای ابرسانا خیلی نزدیک به دمای بحرانی باشد، در این وضعیت H_c بسیار کوچک است. دیگر اینکه جنس حلقه از ابرسانای نوع II باشد و قبلاً فلوکسویدهایی در آن نهفته باشند. این وضعیتهای ویژه در نوشتارها، به عنوان افت وخیز در ابرساناها مورد بحث قرار می گیرند.

II ابرساناهای نوع

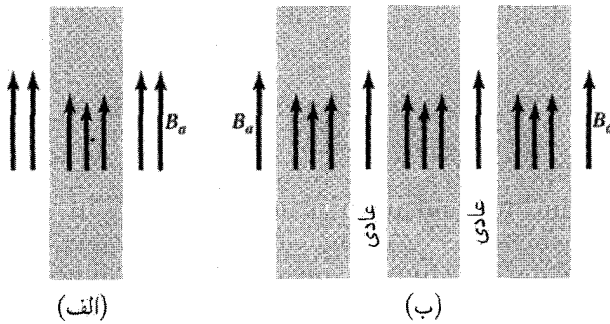
سازوکار ابرسانش در ابرساناهای I و II هیچگونه اختلافی با یکدیگر ندارد. هر دو نوع ابرسانا در گذار ابرسانا-عادی در میدان مغناطیسی صفر ویژگیهای گرمایی یکسانی دارند. ولی اثر مایسنر در آنها کاملاً متفاوت است (شکل ۵).

ابرسانای خوب نوع I میدان مغناطیسی را به خود راه نمی دهد تا اینکه ناگهان ابرسانایی از بین برود و سپس میدان به طور کامل در آن نفوذ کند. ابرسانای خوب نوع II میدان را، تا میدان H_{c1} ، کاملاً به خود راه نمی دهد. بالای H_{c1} بخشی از میدان به نمونه راه می یابد، ولی نمونه از نظر الکتریکی ابرسانا باقی می ماند. در میدان به مراتب بزرگتر، H_{c2} ، شار کاملاً نفوذ می کند و ابرسانایی از بین می رود. (یک لایه سطحی بیرونی از نمونه ممکن است تا میدان باز هم بزرگتر H_{c3} در حالت ابرسانایی باقی بماند.) یک اختلاف مهم بین ابرساناهای نوع I و II مربوط به مسافت آزاد میانگین الکترونها رسانش در حالت عادی آنهاست. اگر طول همدوسی ξ بلندتر از عمق نفوذ λ باشد، ابرسانا از نوع I خواهد بود. بیشتر فلزات خالص از نوع II اند، با $\lambda/\xi < 1$ (جدول ۵ را ببینید).

ولی اگر مسافت آزاد میانگین کوتاه باشد، طول همدوسی کوتاه و عمق نفوذ بزرگ خواهد بود (شکل ۱۴)؛ این وضعیتی است که $\lambda/\xi > 1$ ، و ابرسانا از نوع II خواهد بود.

با افزودن متعادل یک عنصر آلیاژکننده به بعضی فلزات آنها را می توان از نوع I به نوع II تغییر داد. در شکل ۵ افزایش ۲ درصد وزنی ایندیم به سرب، گرچه دمای گذار را به طور قابل ملاحظه ای تغییر نمی دهد، ولی سرب را از نوع I به نوع II تبدیل می کند. با این مقدار آلیاژسازی هیچ تغییر اساسی ای در ساختار الکترونی سرب صورت نمی گیرد، ولی رفتار مغناطیسی آن به طور قابل ملاحظه ای تغییر می کند.

نظریه ابرساناهای نوع II را گینزبرگ، لاندائو، ابریکوزوف^۱، و گورکف^۲ تعمیم دادند. بعد از آن کونزler^۳ و همکارانش مشاهده کردند که سیمهای Nb_3Sn می توانند ابرجریانهای بزرگی را در میدانهای نزدیک به 10^5 kG انتقال دهند؛ این امر به گسترش تجارتي آهنرباهای ابرسانای با میدان قوس منجر شد.

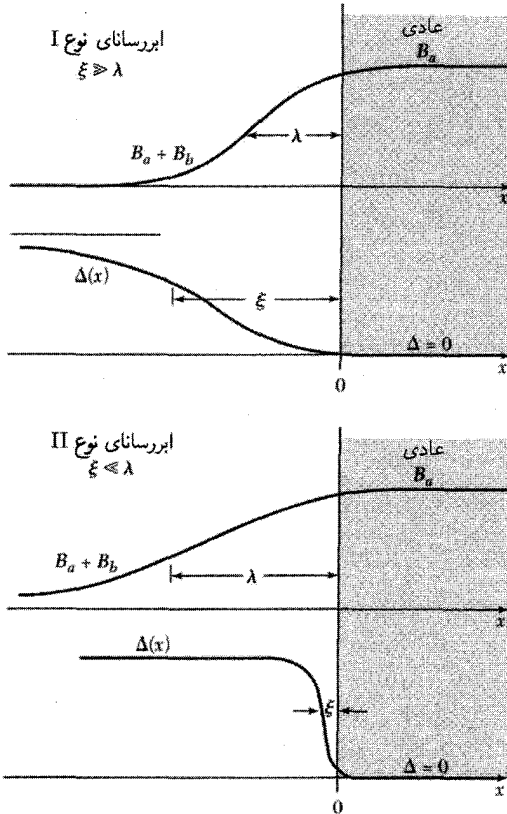


شکل ۱۷. (الف) نفوذ میدان مغناطیسی در لایه نازکی به ضخامت عمق نفوذ λ . پیکانها نمایشگر شدت میدان مغناطیسی اند. (ب) نفوذ میدان مغناطیسی در ساختار حجیم همگن در حالت آمیخته یا گردابی که در آن لایه‌ها متناوباً در حالت‌های عادی و ابررسانش‌اند. لایه‌های ابررسانا در مقایسه با λ نازک‌اند. ساختار لایه نشان داده شده برای راحتی است؛ ساختار واقعی از میله‌هایی در حالت عادی تشکیل می‌شود که به وسیله حالت ابررسانش احاطه شده‌اند. (نواحی N در حالت گردابی کاملاً عادی نیستند، ولی با مقادیر چگالی انرژی پایدارسازی کم توصیف می‌شوند.)

فصل مشترک بین ناحیه‌ای در حالت ابررسانش و ناحیه‌ای در حالت عادی را در نظر بگیرید. انرژی سطح این فصل مشترک که ممکن است مثبت یا منفی باشد با افزایش میدان مغناطیسی اعمال شده کاهش می‌یابد. در حین افزایش میدان مغناطیسی اگر انرژی سطحی هموار مثبت باشد، ابررسانا از نوع I و اگر انرژی سطحی منفی شود ابررسانا از نوع II است. علامت انرژی سطحی اهمیتی در دمای گذار ندارد.

انرژی آزاد ابررسانای حجیم هنگامی که میدان مغناطیسی از آن به خارج رانده می‌شود، افزایش می‌یابد. ولی میدان موازی می‌تواند در یک لایه بسیار نازک تقریباً به صورت یکنواخت نفوذ کند (شکل ۱۷)، فقط بخشی از شار به خارج رانده می‌شود، و انرژی لایه ابررسانا با افزایش میدان مغناطیسی خارجی فقط به طور آهسته افزایش می‌یابد. این امر باعث می‌شود که شدت میدان لازم برای از بین بردن ابررسانایی خیلی افزایش یابد. این لایه دارای گاف انرژی معمولی است و بدون مقاومت الکتریکی خواهد بود. لایه نازک ابررسانای نوع II نیست، ولی نتایج مربوط به لایه نازک نشان می‌دهند که ابررسانایی ممکن است تحت شرایط مناسب در میدانهای مغناطیسی بالا وجود داشته باشد.

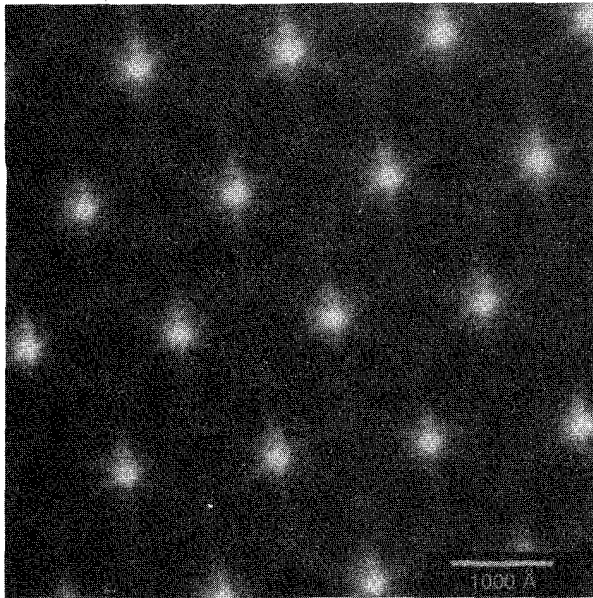
حالت گردابی. نتایج حاصل از لایه‌های نازک این سؤال را مطرح می‌کنند: آیا در میدان مغناطیسی پیکربندیهای پایداری برای ابررسانا وجود دارند که در آنها ناحیه‌هایی (به شکل میله‌های نازک یا صفحه) در حالت عادی باشند و هر ناحیه عادی با یک ابررسانا احاطه شده باشد؟ در چنین حالت آمیخته‌ای که موسوم به گرداب است، میدان مغناطیسی خارجی در نواحی عادی نازک به طور یکنواخت نفوذ خواهد کرد. این میدان، مانند شکل ۱۸، در ماده ابررسانای احاطه‌کننده نیز تا حدودی نفوذ خواهد کرد.



شکل ۱۸. تغییرات میدان مغناطیسی و پارامترگاف انرژی $\Delta(x)$ در فصل مشترک نواحی عادی و ابرسانش برای ابرساناهای نوع I و II. پارامترگاف انرژی مقیاسی از چگالی پایدارسازی حالت ابرسانش است.

واژه حالت گردابی گردش جریانهای ابرسانشی را به صورت گردابهایی در سرتاسر نمونه حجیم توصیف می کند (مانند شکل ۱۹). در حالت گردابی هیچ اختلاف شیمیایی با بلور نگاشتی بین نواحی عادی و ابرسانشی وجود ندارد. چون نفوذ میدان اعمال شده در ماده ابرسانا باعث منفی شدن انرژی سطح می شود، حالت گردابی پایدار است. ابرسانای نوع II با یک حالت گردابی که در گستره معینی از شدت میدان مغناطیسی، مثلاً بین H_{c1} و H_{c2} ، پایدار است مشخص می شود.

برآورد H_{c1} و H_{c2} . شرط شروع حالت گردابی وقتی میدان مغناطیسی افزایش می یابد چیست؟ با استفاده از عمق نفوذ λ می توان H_{c1} را برآورد کرد. هنگامی که میدان اعمال شده برابر H_{c1} باشد، میدان در مغز عادی فلوکسوئید برابر H_{c1} خواهد بود.



شکل ۱۹. شبکه شار در $NbSe_2$ در 1000 گاؤس در $2K$ در 0° که با میکروسکوپ تونل زنی رویشی مشاهده شده است. این عکس چگالی حالتها را، به گونه شکل ۲۳، در تراز فرمی نشان می دهد. مغزهای گردابی دارای چگالی بالای حالتها و با سایه سفید نشان داده شده اند: نواحی ابررسانشی، بدون هیچ حالتی در تراز فرمی، تیره اند. دامنه و گستره فضایی این حالتها را چاه پتانسیلی تعیین می کند که در شکل ۱۸ برای ابررسانای نوع II به وسیله $\Delta(x)$ نشان داده شده است. در این تصویر چاه پتانسیل توابع موج حالت مغز را محدود می کند. شکل ستاره ای، خصلت ظریفتر ویژه $NbSe_2$ است که از اغتشاش شش تاییه چگالی بار در سطح فرمی ناشی می شود.

میدان از مغز عادی به اندازه λ در محیط ابررسانا گسترش می یابد. بنابراین، شار مربوط به یک تک مغز برابر است با $\pi\lambda^2 H_{c1}$ ، و این مقدار باید با کوانتوم شار Φ_0 که با رابطه (۲۷) تعریف می شود برابر باشد، لذا

$$H_{c1} \simeq \Phi_0 / \pi\lambda^2 \quad (30)$$

این میدان لازم برای هسته بندی یک تک فلوکسویید است.

در H_{c2} فلوکسوییدها تا جایی که با نگهداری حالت ابررسانا سازگار باشد به صورت تنگاتنگ روی یکدیگر انباشته می شوند. این بدان معنی است که فلوکسوییدها تا جایی متراکم می شوند که طول همدوسی اجازه می دهد. میدان خارجی تقریباً به صورت یکنواخت، با موجکهای کوچکی در مقیاس شبکه فلوکسوییدها، در داخل نمونه نفوذ می کند. هر مغز مستول حمل شاری از مرتبه $\pi\xi^2 H_{c2}$ است که آن نیز

برحسب مقدار Φ کوانتیده است. لذا رابطه

$$H_{c2} \approx \frac{\Phi_0}{\pi \xi^2} \quad (31)$$

میدان بحرانی بالایی ارائه می‌دهد. هر چه نسبت λ/ξ بزرگتر باشد، نسبت H_{c1} به H_{c2} بزرگتر است. حال آنچه باقی می‌ماند یافتن رابطه‌ای بین این میدانهای بحرانی و میدان ترمودینامیکی H_c است که چگالی انرژی پایداری حالت ابررسانش را، که بر طبق رابطه (۹) برابر است با $H_c^2/8\pi$ ، اندازه می‌گیرد. در ابرسانی نوع II، H_c را فقط می‌توان به گونه غیرمستقیم، با اندازه‌گیری انرژی پایداری به روش گرماسنجی، تعیین کرد. برای آنکه H_{c1} را برحسب H_c برآورد کنیم، پایداری حالت گردابی را در صفر مطلق در حد ناخالصی $\lambda < \xi$ ، مورد توجه قرار می‌دهیم؛ در اینجا $\kappa > 1$ و طول همدوسی در مقایسه با عمق نفوذ کوتاه است.

برای برآورد انرژی پایداری مغز فلوکسویدی در حالت گردابی، آن را به صورت یک استوانه فلزی عادی در نظر می‌گیریم که حامل میدان مغناطیسی میانگین B_a است. شعاع این استوانه از مرتبه طول همدوسی، یعنی ضخامت مرز بین فازهای S و N ، است. انرژی مغز عادی در واحد طول نسبت به انرژی ابرسانی خالص برابر است با حاصلضرب انرژی پایداری در مساحت این مغز

$$f_{\text{مغز}} \approx \frac{1}{8\pi} H_c^2 \times \pi \xi^2 \quad (32)$$

ولی کاهش نیز در انرژی مغناطیسی، به علت نفوذ میدان مغناطیسی اعمال شده B_a به داخل ماده ابرسانا در اطراف مغز، وجود دارد:

$$f_{\text{مغناطیسی}} \approx -\frac{1}{8\pi} B_a^2 \times \pi \lambda^2 \quad (33)$$

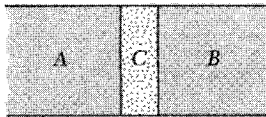
برای تک فلوکسوید این دو سهم را جمع می‌کنیم تا چنین رابطه‌ای به دست آید

$$f = f_{\text{مغز}} + f_{\text{مغناطیسی}} \approx \frac{1}{8} (H_c^2 \xi^2 - B_a^2 \lambda^2) \quad (34)$$

در صورتی که $f < 0$ مغز پایدار است. میدان آستانه برای فلوکسوید پایدار به ازای $f = 0$ رخ می‌دهد، یا با نوشتن H_{c1} به جای B_a

$$H_{c1}/H_c \approx \xi/\lambda \quad (35)$$

میدان آستانه ناحیه با انرژی سطحی مثبت را از ناحیه با انرژی سطحی منفی جدا می‌سازد.



شکل ۲۰. دو فلز A و B که با لایه عایق نازک C از هم جدا شده‌اند.

با ترکیب روابط (۳۰) و (۳۵) می‌توان رابطه‌ای برای H_c به دست آورد:

$$\pi \xi \lambda H_c \approx \Phi. \quad (۳۶)$$

با ترکیب روابط (۳۰)، (۳۱)، و (۳۵) می‌توان این رابطه را به دست آورد

$$(H_{c1} H_{c2})^{1/2} \approx H_c \quad (۳۷ \text{ الف})$$

و

$$H_{c2} \approx (\lambda/\xi) H_c = \kappa H_c \quad (۳۷ \text{ ب})$$

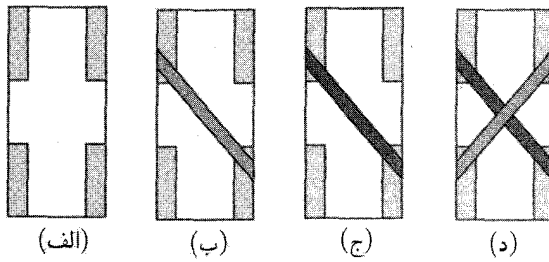
تونل زنی تک ذره‌ای

دو فلز در نظر بگیرید که به وسیله عایقی مانند شکل ۲۰، از یکدیگر جدا شده‌اند. این عایق معمولاً به صورت سدی در برابر جریان الکترونی‌های رسانشی از یک فلز به فلز دیگر عمل می‌کند. اگر این سد به اندازه کافی نازک (کمتر از 10 \AA تا 20 \AA) باشد، احتمال قابل توجهی وجود دارد که الکترونی که به سد اصابت می‌کند، از یک فلز به فلز دیگر برود: این فرایند را تونل زنی می‌نامند. در بسیاری از آزمایشها لایه عایق به طور ساده لایه اکسیدی نازکی است که روی یکی از دو لایه فلزی تبخیر شده، مانند شکل ۲۱، تشکیل می‌شود.

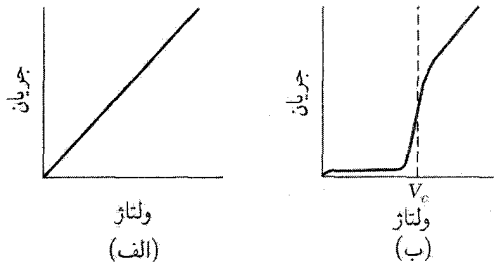
هنگامی که هر دو فلز رسانای عادی باشند، رابطه جریان-ولتاژ در این ساندویچ یا پیوندگاه تونلی در ولتاژهای پایین اهمی است، یعنی جریان با ولتاژ اعمال شده مستقیماً متناسب است. گیاور^۱، در سال ۱۹۶۰، کشف کرد که اگر یکی از این فلزات ابررسانا شود، مشخصه جریان-ولتاژ از خط مستقیم شکل ۲۲ (الف) به منحنی نشان داده شده در شکل ۲۲ (ب) تغییر می‌کند.

شکل ۲۳ (الف) چگالی اوربیتالهای الکترونی را در ابررسانا و فلز عادی در کنار هم مقایسه می‌کند. در ابررسانا یک گاف انرژی وجود دارد که مرکزش در تراز فرمی است. در صفر مطلق هیچ جریانی نمی‌تواند جاری شود تا آنکه ولتاژ اعمال شده برابر $V = E_g/2e = \Delta/e$ گردد.

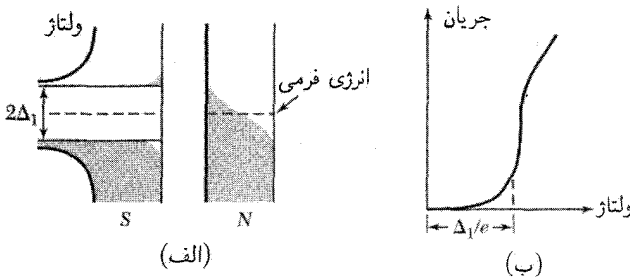
گاف E_g به شکستن یک زوج الکترون در حالت ابررسانش و تشکیل دو الکترون، یا یک الکترون و



شکل ۲۱. تهیه ساندویچ $Al/Al_2O_3/Sn$. (الف) تیغه شیشه‌ای با اتصالات ایندیمی. (ب) یک باریکه آلومینیومی به پهنای ۱mm و ضخامت ۱۰۰۰ تا 3000 \AA بین محل اتصالها نشانده شده است. (ج) این باریکه آلومینیومی اکسید شده است تا لایه Al_2O_3 با ضخامت ۱۰ تا 20 \AA تشکیل شود. (د) لایه‌ای از قلع به صورت قطری روی لایه آلومینیومی نشانده شده است، تا ساندویچ $Al/Al_2O_3/Sn$ تشکیل شود. سیمهای خارجی به اتصالات ایندیمی وصل می‌شوند؛ دو اتصال برای اندازه‌گیری جریان و دوتای دیگر برای اندازه‌گیری ولتاژند.



شکل ۲۲. (الف) رابطه خطی ولتاژ-جریان برای پیوندگاه دو فلز عادی که با لایه اکسیدی از یکدیگر جدا شده‌اند (ب) رابطه جریان-ولتاژ برای فلز عادی و فلز ابررسانا.



شکل ۲۳. چگالی اوربیتالها و مشخصه جریان-ولتاژ برای پیوندگاه تونلی. در (الف) انرژی روی محور قائم و چگالی اوربیتالها روی محور افقی ترسیم شده است. یک فلز در حالت عادی و دیگری در حالت ابررسانا است. (ب) I برحسب V ؛ خط چینها شکست مورد انتظار در $T = 0$ را نشان می‌دهند.

یک حفره در حالت عادی، مربوط است. جریان هنگامی شروع می‌شود که $eV = \Delta$. در دمای متناهی، به دلیل برانگیختگی گرمایی الکترونهاى ابررسانش از پایین به بالای گاف، حتی در ولتاژهای پایین نیز جریان کوچکی جاری است.

تونل‌زنی جوزفسون در ابررسانا

تحت شرایط مناسب آثار جالب توجه مربوط به تونل‌زنی زوج الکترونهاى ابررسانشی را از یک ابررسانا به ابررسانای دیگر از طریق یک لایه عایق مشاهده می‌کنیم. چنین پیوندگاهی را اتصال ضعیف گویند. آثار تونل‌زنی زوجها شامل موارد زیرند:

اثر dc جوزفسون. در غیاب هر میدان الکتریکی یا مغناطیسی، یک جریان dc در عرض پیوندگاه جاری است.

اثر ac جوزفسون. اعمال ولتاژ ac در عرض پیوندگاه باعث می‌شود که نوسانات rf جریان در عرض پیوندگاه ایجاد شود. این اثر در تعیین دقیق مقدار \hbar/e مورد استفاده قرار گرفته است. به علاوه، اعمال ولتاژ rf همراه با ولتاژ dc می‌تواند باعث ایجاد جریان dc در عرض پیوندگاه شود.

تداخل کوانتومی ماکروسکوپی یک بلندبرد. اعمال میدان مغناطیسی dc در یک مدار ابررسانا که شامل دو پیوندگاه است باعث می‌شود که آثار تداخلی، به صورت تابعی از شدت میدان مغناطیسی، در ابرجریان پیشینه مشاهده شود. از این اثر می‌توان در مغناطیس‌سنج‌های حساس استفاده کرد.

اثر dc جوزفسون. بحث ما درباره پدیده‌های مربوط به پیوندگاه جوزفسون به دنبال بحث مربوط به کوانتیدگی شار می‌آید. فرض کنید ψ_1 دامنه احتمال موج الکترونها در یک طرف پیوندگاه و ψ_2 دامنه احتمال زوج الکترونها در طرف دیگر باشد. برای سادگی، دو ابررسانا را یکسان فرض کنید. فعلاً فرض می‌کنیم هر دو ابررسانا در پتانسیل صفر قرار دارند.

با به‌کاربردن معادله وابسته به زمان شرودینگر $i\hbar\partial\psi/\partial t = \mathcal{H}\psi$ در مورد این دو دامنه روابط زیر به دست می‌آیند

$$i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t} = \hbar T\psi_2; \quad i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t} = \hbar T\psi_1 \quad (38)$$

در اینجا $\hbar T$ اثر جفت‌شدگی زوج الکترونها یا برهم‌کنش انتقال در دو طرف عایق را نشان می‌دهد؛ T دارای ابعاد آهنگ یا بسامد است. این کمیت مقیاسی از نشت ψ_1 به ناحیه ۲ و نشت ψ_2 به ناحیه ۱ است. اگر عایق خیلی ضخیم باشد، T صفر خواهد بود و هیچ تونل‌زنی زوجها وجود نخواهد داشت.

فرض کنید $\psi_2 = n_2^{1/2} e^{i\theta_2}$ و $\psi_1 = n_1^{1/2} e^{i\theta_1}$ در این صورت

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \frac{1}{2} n_1^{-1/2} e^{i\theta_1} \frac{\partial n_1}{\partial t} + i \psi_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial t} = -iT \psi_2; \quad (39)$$

$$\frac{\partial \psi_2}{\partial t} = \frac{1}{2} n_2^{-1/2} e^{i\theta_2} \frac{\partial n_2}{\partial t} + i \psi_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial t} = -iT \psi_1 \quad (40)$$

با ضرب کردن رابطه (۳۹) در $n_1^{1/2} e^{-i\theta_1}$ و با در نظر گرفتن $\delta \equiv \theta_2 - \theta_1$ خواهیم داشت

$$\frac{1}{2} \frac{\partial n_1}{\partial t} + i n_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial t} = -iT (n_1 n_2)^{1/2} e^{i\delta} \quad (41)$$

با ضرب کردن رابطه (۴۰) در $n_2^{1/2} e^{-i\theta_2}$ به دست می آوریم

$$\frac{1}{2} \frac{\partial n_2}{\partial t} + i n_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial t} = -iT (n_1 n_2)^{1/2} e^{-i\delta} \quad (42)$$

حال با برابر قراردادن بخشهای حقیقی و موهومی معادله (۴۱) و همچنین رابطه (۴۲) داریم

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} = 2T (n_1 n_2)^{1/2} \sin \delta; \quad \frac{\partial n_2}{\partial t} = -2T (n_1 n_2)^{1/2} \sin \delta \quad (43)$$

$$\frac{\partial \theta_1}{\partial t} = -T \left(\frac{n_2}{n_1} \right)^{1/2} \cos \delta; \quad \frac{\partial \theta_2}{\partial t} = -T \left(\frac{n_1}{n_2} \right)^{1/2} \cos \delta \quad (44)$$

اگر $n_1 \cong n_2$ که برای ابرساناهای ۱ و ۲ چنین است، از رابطه (۴۴) خواهیم داشت

$$\frac{\partial \theta_1}{\partial t} = \frac{\partial \theta_2}{\partial t}; \quad \frac{\partial}{\partial t} (\theta_2 - \theta_1) = 0 \quad (45)$$

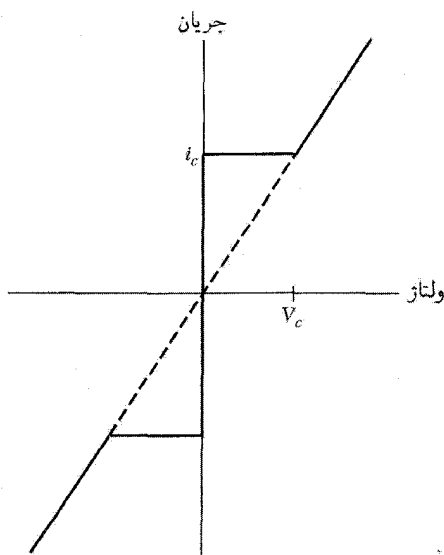
با استفاده از معادله (۴۳) درمی یابیم که

$$\frac{\partial n_2}{\partial t} = -\frac{\partial n_1}{\partial t} \quad (46)$$

جریان از (۱) و (۲) متناسب با $\partial n_2 / \partial t$ یا $-\partial n_1 / \partial t$ خواهد بود. بنابراین از رابطه (۴۳) نتیجه می گیریم که جریان J ی زوجهای ابرسانا در عرض پیوندگاه به صورت زیر به اختلاف فاز δ بستگی دارد:

$$J = J_0 \sin \delta = J_0 \sin(\theta_2 - \theta_1) \quad (47)$$

که در آن J_0 متناسب با برهم کنش انتقال T است. جریان J_0 ، بیشینه جریان در ولتاژ صفر است که می تواند از پیوندگاه بگذرد. بدون اعمال ولتاژ، جریان dc در عرض پیوندگاه برقرار می شود، (شکل ۲۴)، که مقدار آن با توجه به مقدار اختلاف فاز $\theta_2 - \theta_1$ بین J_0 و $-J_0$ است، این اثر dc جوزفسون است.



شکل ۲۴. مشخصه جریان-ولتاژ پیوندگاه جوزفسون. جریانهای dc تحت ولتاژ اعمال شده صفر تا جریان بحرانی i_c جاری می‌شوند. این اثر dc جوزفسون در ولتاژهای بالاتر از V_c ، پیوندگاه دارای مقاومت متناهی است، ولی جریان دارای یک مؤلفه نوسانی با بسامد $\omega = 2eV/\hbar$ است: این اثر با a جوزفسون است.

اثر ac جوزفسون. فرض کنید ولتاژ dc V در عرض پیوندگاه اعمال شود. این عمل را به این علت می‌توان انجام داد که پیوندگاه عایق است. زوج الکترون در عبور از عرض پیوندگاه با اختلاف انرژی پتانسیل qV روبه‌رو می‌شود، که در آن $q = -2e$. می‌توان گفت که یک زوج در یک طرف در انرژی پتانسیل $-eV$ و یک زوج در طرف دیگر در انرژی پتانسیل eV قرار دارد. معادلات حرکت که به جای معادله (۳۸) قرار می‌گیرند عبارت‌اند از

$$i\hbar \partial\psi_1/\partial t = \hbar T\psi_2 - eV\psi_1; \quad i\hbar \partial\psi_2/\partial t = \hbar T\psi_1 + eV\psi_2 \quad (48)$$

مانند حالت قبل عمل می‌کنیم و به جای رابطه (۴۱) این معادله را به دست می‌آوریم

$$\frac{1}{2} \frac{\partial n_1}{\partial t} + in_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial t} = ieVn_1\hbar^{-1} - iT(n_1n_2)^{1/2} e^{i\delta} \quad (49)$$

این معادله به دو بخش تفکیک می‌شود، یکی بخش حقیقی

$$\partial n_1/\partial t = 2T(n_1n_2)^{1/2} \sin \delta \quad (50)$$

که دقیقاً مانند حالت بدون ولتاژ V است، و دیگری بخش موهومی

$$\frac{\partial \theta_1}{\partial t} = \left(\frac{eV}{\hbar} \right) - T \left(\frac{n_2}{n_1} \right)^{1/2} \cos \delta \quad (51)$$

که با رابطه (۴۴) در جمله eV/\hbar اختلاف دارد. از آن گذشته، با گسترش رابطه (۴۲) داریم

$$\frac{1}{2} \frac{\partial n_2}{\partial t} + in_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial t} = -ieVn_2\hbar^{-1} - iT(n_1n_2)^{1/2}e^{-i\delta} \quad (52)$$

بنابراین

$$\partial n_2 / \partial t = -2T(n_1n_2)^{1/2} \sin \delta \quad (53)$$

$$\partial \theta_2 / \partial t = -(eV/\hbar) - T(n_1/n_2)^{1/2} \cos \delta \quad (54)$$

از روابط (۵۱) و (۵۴) با استفاده از $n_1 \cong n_2$ داریم

$$\partial(\theta_2 - \theta_1) / \partial t = \partial \delta / \partial t = -2eV/\hbar \quad (55)$$

با انتگرال‌گیری از معادله (۵۵) مشاهده می‌شود که با اعمال ولتاژ dc در عرض پیوندگاه، فاز نسبی دامنه‌های احتمال به صورت زیر تغییر می‌کند

$$\delta(t) = \delta(0) - (2eVt/\hbar) \quad (56)$$

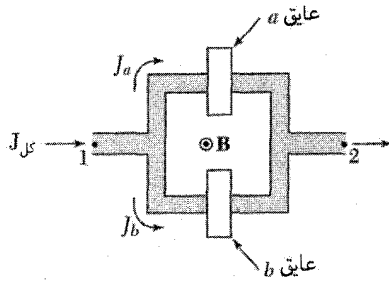
با قراردادن رابطه (۵۶) به جای فاز معادله (۴۷) جریان ابررسانش بیان می‌شود:

$$J = J_0 \sin [\delta(0) - (2eVt/\hbar)] \quad (57)$$

این جریان با بسامد زیر نوسان می‌کند

$$\omega = 2eV/\hbar \quad (58)$$

این اثر ac جوزفسون است. یک ولتاژ dc برابر $1\mu V$ بسامدی برابر 483.6MHz تولید می‌کند. رابطه (۵۸) معلوم می‌کند که به هنگام عبور یک زوج الکترون از سد، فوتونی با انرژی $\hbar\omega = 2eV$ گسیل یا جذب می‌شود. با اندازه‌گیری ولتاژ و بسامد می‌توان مقدار بسیار دقیقی برای e/\hbar به دست آورد.



شکل ۲۵. ترتیب آزمایش دربارهٔ تداخل کوانتومی ماکروسکوپی. شار مغناطیسی Φ از داخل حلقه می‌گذارد.

تداخل کوانتومی ماکروسکوپی. در روابط (۲۴) و (۲۶) دیدیم که اختلاف فاز $\theta_2 - \theta_1$ گرد مدار بسته‌ای که شار مغناطیسی کل Φ را در بر دارد با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\theta_2 - \theta_1 = (2e/\hbar c)\Phi \quad (59)$$

این شار برابر است با مجموع شار ناشی از میدانهای خارجی و شار ناشی از جریانهای داخل خود مدار. دو پیوندگاه جوزفسون را که، مانند شکل ۲۵، به‌طور موازی بسته شده‌اند در نظر می‌گیریم. هیچ ولتاژی اعمال نشده است. فرض کنید اختلاف فاز بین نقاط ۱ و ۲ روی مسیری که از پیوندگاه a می‌گذرد δ_a و روی مسیری که از پیوندگاه b می‌گذرد δ_b باشد. در غیاب میدان مغناطیسی این دو فاز باید با هم برابر باشند. اکنون فرض کنید شار Φ از داخل مدار بگذرد. این کار را با سیمولولهٔ مستقیمی انجام می‌دهیم که بر سطح کاغذ عمود است و داخل مدار قرار دارد. از رابطهٔ (۵۹) داریم، $\delta_b - \delta_a = (2e/\hbar c)\Phi$ ، یا

$$\delta_b = \delta_0 + \frac{e}{\hbar c}\Phi; \quad \delta_a = \delta_0 - \frac{e}{\hbar c}\Phi \quad (60)$$

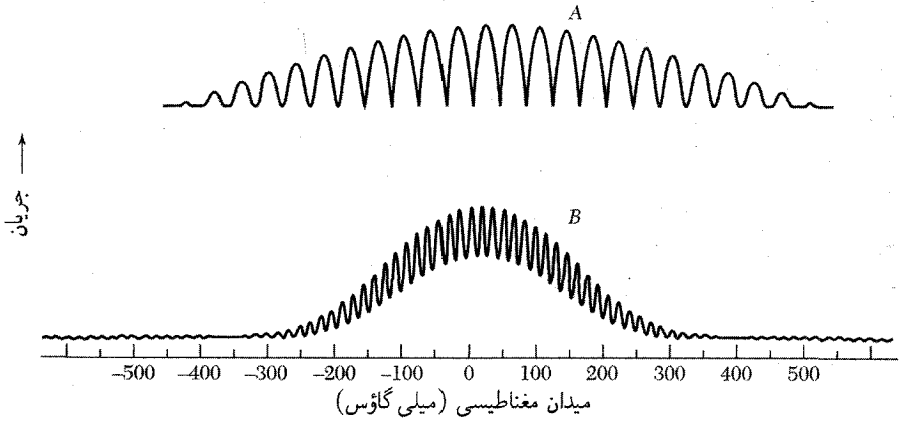
جریان کل برابر است با مجموع J_a و J_b . جریانی که از هر پیوندگاه می‌گذرد به شکل رابطهٔ (۴۷) است، بنابراین

$$J_K = J_0 \left\{ \sin\left(\delta_0 + \frac{e}{\hbar c}\Phi\right) + \sin\left(\delta_0 - \frac{e}{\hbar c}\Phi\right) \right\} = 2(J_0 \sin \delta_0) \cos \frac{e\Phi}{\hbar c}$$

این جریان با Φ تغییر می‌کند، بزرگی جریان هنگامی بیشینه است که

$$e\Phi/\hbar c = s\pi, \quad s = \text{عدد درست} \quad (61)$$

دوره‌ای بودن جریان در شکل ۲۶ نشان داده شده است. تداخل ناشی از دو پیوندگاه تغییر با دورهٔ



شکل ۲۶. نمایش تجربی J_{\max} برحسب میدان مغناطیسی که آثار تداخل و پراش را برای دو پیوندگاه A و B نشان می‌دهد. دورهٔ میدان برای A و B به ترتیب برابر است با 39.5mG و 16mG . جریانهای بیشینهٔ تقریبی به ترتیب برابرند با 1mA و 0.5mA . فاصلهٔ پیوندگاهها از یکدیگر 3mm و پهنای پیوندگاه در هر دو مورد 0.5mm است. تغییر صفر جریان A از میدان مغناطیسی ناشی می‌شود.

کوتاه را تولید می‌کند، که در رابطهٔ (۶۱) پیش‌بینی شده بود. تغییر با دورهٔ بلندتر اثر پراش است و از ابعاد متناهی هر پیوندگاه ناشی می‌شود—این امر باعث می‌شود که Φ به مسیر به‌خصوصی از انتگرال‌گیری بستگی داشته باشد (مسئلهٔ ۶).

ابررساناهای دمای بالا

T_c ی بالا یا HTS^۱ برای نمایش ابررسانایی در مواد، عمدتاً اکسیدهای مس، با دماهای گذار بالا همراه با جریانهای بحرانی بالا و میدانهای مغناطیسی بالاست. در سال ۱۹۸۸، بالاترین T_c که از مدتها پیش در ترکیبات بین فلزی 23K بود به 125K در اکسیدهای ابررسانایی حجیم ارتقا یافته بود؛ این اکسیدها آزمونهای استاندارد را برای ابررسانایی پشت سر گذاشتند. اثر مایسنر، اثر جوزفسون ac، جریانهای ماندگار با دوام طولانی، و مقاومت ویژهٔ dc اصولاً صفر. مراحل فرمواش نشدنی پیشرفت عبارت‌اند از

$\text{BaPb}_{0.75}\text{Bi}_{0.25}\text{O}_3$	$T_c = 12\text{K}$ [BPBO]
$\text{La}_{1.85}\text{Ba}_{0.15}\text{CuO}_4$	$T_c = 36\text{K}$ [LBCO]
$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$	$T_c = 90\text{K}$ [YBCO]
$\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$	$T_c = 120\text{K}$ [TBCO]
$\text{Hg}_{0.8}\text{Tl}_{0.2}\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8.33}$	$T_c = 138\text{K}$

چکیده

(برحسب واحدهای CGS)

- ابررسانا از خود رسانایی نامتناهی نشان می‌دهد.
- یک نمونه حجیم فلزی در حالت ابررسانش از خود خاصیت دیامغناطیسی کامل نشان می‌دهد و برای آن القای مغناطیسی $B = 0$. این اثر مایسنر است. میدان مغناطیسی خارجی در سطح نمونه تا فاصله‌ای نفوذ می‌کند که با عمق نفوذ λ تعیین می‌شود.
- دو نوع ابررسانای I و II وجود دارند. در یک نمونه حجیم از ابررسانای نوع I با اعمال میدان مغناطیسی خارجی که بیش از مقدار بحرانی H_c باشد، حالت ابررسانش از بین می‌رود و حالت عادی دوباره برقرار می‌شود. ابررسانای نوع II دارای دو میدان بحرانی است، $H_{c1} < H_c < H_{c2}$ ؛ حالت گردابی در گستره بین H_{c1} و H_{c2} وجود دارد. چگالی انرژی پایدارسازی حالت ابررسانش خالص در هر دو نوع ابررسانای I و II برابر با $H_c^2 / 8\pi$ است.
- در حالت ابررسانش یک گاف انرژی، برابر $E_g \approx 4k_B T_c$ ، الکترونهای ابررسانش پایین گاف را از الکترونهای عادی آن جدا می‌کند. این گاف در آزمایشهای ظرفیت گرمایی، جذب فروسرخ، و تونل زنی آشکار می‌شود.
- معادله لندن

$$\mathbf{j} = -\frac{c}{4\pi\lambda_L^2} \mathbf{A} \quad \text{یا} \quad \text{curl} \mathbf{j} = -\frac{c}{4\pi\lambda_L^2} \mathbf{B}$$

- از طریق معادله نفوذ $\nabla^2 B = B / \lambda_L^2$ به اثر مایسنر منجر می‌شود، که در اینجا $\lambda_L \approx (mc^2 / 4\pi ne^2)^{1/2}$ عمق نفوذ لندن است.
- در معادله لندن \mathbf{A} یا \mathbf{B} باید یک میانگین وزنی روی طول همدوسی ξ باشد. طول همدوسی ذاتی برابر است با $\xi = \sqrt{2} \hbar v_F / \pi E_g$.
- نظریه BCS، حالت ابررسانشی را که از زوج الکترونهای $\uparrow k$ و $\downarrow -k$ تشکیل می‌شود توجیه می‌کند. این زوجها مانند بوزونها عمل می‌کنند.
- در ابررساناهای نوع II، $\lambda < \xi$. میدانهای بحرانی با روابط $H_{c1} \approx (\xi / \lambda) H_c$ و $H_{c2} \approx (\lambda / \xi) H_c$ به یکدیگر مربوط می‌شوند. پارامتر گینزبرگ-لانداؤ، κ ، به صورت λ / ξ تعریف می‌شود.

مسائل

۱. نفوذ میدان مغناطیسی در ورقه. معادله نفوذ را می‌توان به صورت $\lambda^2 \nabla^2 B = B$ نوشت، که در آن λ عمق نفوذ است. (الف) نشان دهید که $B(x)$ در داخل ورقه ابررسانایی عمود بر محور x به ضخامت δ با رابطه زیر داده می‌شود

$$B(x) = B_a \frac{\cosh(x/\lambda)}{\cosh(\delta/2\lambda)}$$

که در آن B_a میدان در خارج ورقه و موازی با آن است؛ در اینجا $x = 0$ در مرکز ورقه است. (ب) مغناطیدگی مؤثر $M(x)$ در این ورقه با $B(x) - B_a = 4\pi M(x)$ تعریف می‌شود. نشان دهید که، در CGS، برای $\delta \ll \lambda$ داریم $4\pi M(x) = -B_a(1/8\lambda^2)(\delta^2 - 4x^2)$. در SI جای 4π با μ_0 عوض می‌شود.

۲. میدان بحرانی لایه‌های نازک. (الف) با استفاده از نتیجه (ب) از مسئله ۱، نشان دهید که چگالی انرژی در $T = 0\text{K}$ در داخل یک لایه نازک به ضخامت δ در میدان مغناطیسی خارجی B_a در حالت $\delta \ll \lambda$ به صورت زیر داده می‌شود

$$(CGS) \quad F_S(x, B_a) = U_S(0) + (\delta^2 - 4x^2)B_a^2/64\pi\lambda^2$$

در SI ضریب π با $\frac{1}{4}\mu_0$ تعویض می‌شود. از سهم انرژی جنبشی در این مسئله چشم‌پوشی می‌کنیم. (ب) نشان دهید که سهم مغناطیسی در F_S ، هنگامی که میانگین آن روی ضخامت لایه گرفته شود، برابر است با $B_a^2(\delta/\lambda)^2/96\pi$. (ج) نشان دهید که اگر فقط سهم میدان مغناطیسی در U_S منظور شود، میدان بحرانی لایه نازک با $H_c(\lambda/\delta)$ متناسب می‌شود که در آن H_c میدان بحرانی حجیم است.

۳. مدل دوسبالی ابرسانا. در مدل دوسبالی ابرسانا فرض می‌کنیم که در دماهای $0 < T < T_c$ ، چگالی جریان را می‌توان به صورت مجموع سهم‌های الکترونی‌های عادی و ابرسانا نوشت: $\mathbf{j} = \mathbf{j}_N + \mathbf{j}_S$ ، که در آن $\mathbf{j}_N = \sigma_0 \mathbf{E}$ با معادله لندن داده می‌شود. در اینجا σ_0 رسانندگی عادی معمولی است، که در مقایسه با حالت عادی، به علت کاهش تعداد الکترونی‌های عادی در دمای T کاهش می‌یابد. از آثار لختی روی \mathbf{j}_S و \mathbf{j}_N چشم‌پوشی کنید. (الف) با استفاده از معادلات ماکسول نشان دهید که برای امواج الکترومغناطیسی در ابرسانا رابطه پاشیدگی، که در آن بردار موج \mathbf{k} به بسامد ω مربوط می‌شود، چنین است

$$(CGS) \quad k^2 c^2 = 4\pi\sigma_0 \omega i - c^2 \lambda_L^{-2} + \omega^2$$

$$(SI) \quad k^2 c^2 = (\sigma_0 / \epsilon_0) \omega i - c^2 \lambda_L^{-2} + \omega^2$$

که در آن λ_L با (۱۴الف) ارائه می‌شود، که در آن n و n_S تعویض شده باشد. به یاد می‌آوریم که $\text{curl curl B} = -\nabla^2 \mathbf{B}$. (ب) اگر τ زمان واهلش الکترونی‌های عادی و n_N غلظت آنها باشد، با استفاده از رابطه $\sigma_0 = n_N e^2 \tau / m$ نشان دهید که در بسامدهای $\omega \ll 1/\tau$ سهم الکترونی‌های عادی در رابطه پاشیدگی زیاد مهم نیست، و در نتیجه حرکت الکترونها تنها با معادله لندن توصیف می‌شود. ابرجریان الکترونی‌های عادی را اتصال کوتاه می‌کند. خود معادله لندن تنها هنگامی صادق است که $\hbar\omega$ در مقایسه با گاف انرژی کوچک باشد. توجه کنید که بسامدهای مورد نظر به گونه‌ای‌اند که $\omega \ll \omega_p$ و ω_p بسامد پلاسماست.

۴*. ساختار گرداب. (الف) پاسخی برای معادله لندن پیدا کنید که دارای تقارن استوانه‌ای و در خارج مغز خطی صادق باشد. در مختصات قطبی استوانه‌ای، در پی پاسخی از معادله زیر هستیم

$$B - \lambda^2 \nabla^2 B = 0$$

که در مبدأ تکین و برای آن شار کل برابر با کوانتوم شار باشد، یعنی

$$2\pi \int_0^\infty d\rho \rho B(\rho) = \Phi_0$$

این معادله در حقیقت تنها در خارج مغز عادی، به شعاع ξ ، معتبر است. (ب) نشان دهید که این پاسخ دارای حدهای زیر است

$$B(\rho) \simeq (\Phi_0 / 2\pi\lambda^2) \ln(\lambda/\rho) \quad (\xi \ll \rho \ll \lambda)$$

$$B(\rho) \simeq (\Phi_0 / 2\pi\lambda^2) (\pi\lambda/2\rho)^{1/2} \exp(-\rho/\lambda) \quad (\rho \gg \lambda)$$

۵. عمق نفوذ لندن. (الف) با مشتق‌گیری زمانی معادله لندن (۱) نشان دهید که $\partial \mathbf{j} / \partial t = (c^2 / 4\pi\lambda_L^2) \mathbf{E}$ (ب) اگر، همان‌گونه که در مورد حامله‌های آزاد با بار q و جرم m داریم، $m d\mathbf{v} / dt = q\mathbf{E}$ ، نشان دهید $\lambda_L^2 = mc^2 / 4\pi nq^2$

۶*. اثر پراش در پیوندگاه جوزفسون. پیوندگاهی با سطح مقطع مستطیلی در نظر بگیرید. فرض کنید میدان مغناطیسی B در صفحه پیوندگاه و عمود بر لبه‌ای به پهنای w اعمال شود. فرض کنید ضخامت پیوندگاه T باشد. برای راحتی فرض کنید اختلاف فاز دو برابر رسانا برای $B = 0$ برابر $\pi/2$ باشد. نشان دهید که جریان dc در حضور میدان مغناطیسی برابر است با

$$J \approx J_0 \frac{\sin(wTBe/\hbar c)}{(wTBe/\hbar c)}$$

۷. اثر مایسنر در کره. کره‌ای از ابررسانای نوع I با میدان بحرانی H_c در نظر بگیرید. (الف) نشان دهید که در رژیم مایسنر مغناطیدگی مؤثر M در داخل کره با $B_a = -\lambda\pi M/3$ داده می‌شود، (ب) نشان دهید که میدان مغناطیسی در سطح کره در صفحه استوار برابر است با $3B_a/2$. (این نتیجه به دست می‌آید که میدان اعمال‌شده‌ای که در آن فروریزش اثر مایسنر شروع می‌شود برابر است با $2H_c/3$). یادآوری: میدان واغناطیدگی کره‌ای که به صورت یکنواخت مغناطیسی شده باشد برابر است با $-4\pi M/3$.

منبع

مروری عالی بر ابررسانایی در شبکه اینترنتی superconductors.org وجود دارد.

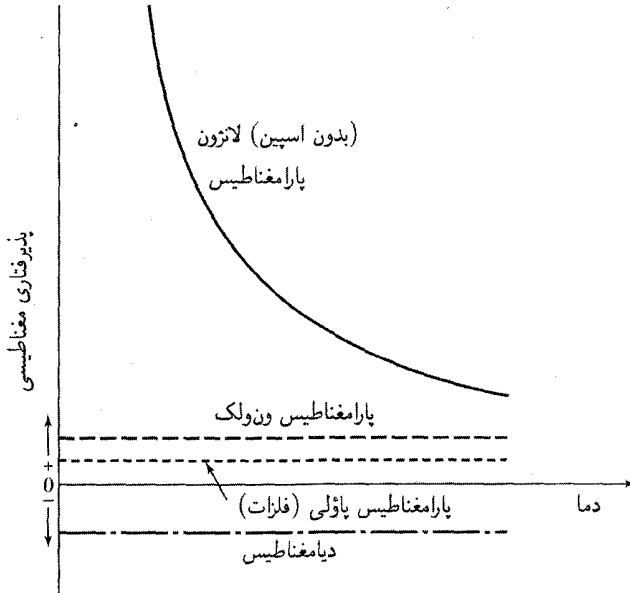
* این مسئله تا حدودی مشکل است.

دیامغناطیس و پارامغناطیس^۱

علم مغناطیس از مکانیک کوانتومی جدایی ناپذیر است. زیرا یک دستگاه کاملاً کلاسیکی در تعادل گرمایی حتی در میدان مغناطیسی هم نمی‌تواند هیچ گشتاور مغناطیسی از خود نشان دهد. گشتاور مغناطیسی اتم آزاد دارای سه منشأ اساسی است: اسپین که منسوب به الکترونهاست؛ تکانه زاویه‌ای مداری الکترونها به گرد هسته؛ و تغییری که میدان مغناطیسی خارجی در گشتاور مداری القا می‌کند.

از دو اثر نخست سهمهای پارامغناطیسی در مغناطیدگی حاصل می‌شود و از اثر سوم سهم دیامغناطیسی. در حالت پایه^{۱۸} اتم هیدروژن، گشتاور مداری صفر است و گشتاور مغناطیسی از اسپین الکترون و گشتاور دیامغناطیسی القا شده کمی حاصل می‌شود. در حالت^{۱۸۲} هلیوم، گشتاورهای اسپینی و مداری صفرند و تنها گشتاور القا شده وجود دارد. در اتمهایی که پوسته‌های الکترونی شان پر است، گشتاورهای اسپینی و مداری هر دو صفرند: گشتاورهای متناهی به پوسته‌های پرنشده مربوط‌اند.

۱. نمادگذاری: در مسئله‌هایی که در این فصل مورد بررسی قرار می‌گیرند، میدان مغناطیسی B همواره برابری نزدیکی با میدان اعمال شده B_a دارد، به‌گونه‌ای که در اغلب موارد به جای B_a می‌نویسیم B .



شکل ۱. پذیرفتاریهای مغناطیسی مشخصه مواد دیا مغناطیسی و پارامغناطیسی.

مغناطیدگی M به صورت گشتاور مغناطیسی در واحد حجم تعریف می شود. پذیرفتاری مغناطیسی در واحد حجم به این صورت تعریف می شود

$$\chi = \frac{M}{B}; \quad \text{(CGS)} \quad \boxed{\text{(SI)} \chi = \frac{\mu_0 M}{B}} \quad (1)$$

که در آن B شدت میدان مغناطیسی ماکروسکوپی است. χ در هر دو دستگاه بدون بعد است. گاهی، برای راحتی، بدون آنکه دستگاه واحدها را مشخص کنیم M/B را پذیرفتاری مغناطیسی در نظر می گیریم. پذیرفتاری غالباً برای واحد جرم یا یک مول از ماده تعریف می شود. پذیرفتاری مولی را به صورت χM و گشتاور مغناطیسی یک گرم از ماده را گاهی به صورت σ می نویسند. موادی که دارای پذیرفتاری منفی اند دیا مغناطیس و موادی که پذیرفتاری مثبت دارند پارامغناطیس می نامند. (شکل ۱)

آرایه های منظم گشتاورهای مغناطیسی در فصل ۱۲ مورد بحث قرار می گیرند؛ این آرایه ها ممکن است فرومغناطیسی، فری مغناطیسی، پادفرومغناطیسی، ماریپیچی، یا به شکل پیچیده تری باشند. گشتاورهای مغناطیسی هسته ای منجر به پارامغناطیسی هسته ای می شوند. گشتاور مغناطیسی هسته ها از مرتبه 10^{-3} برابر گشتاور مغناطیسی الکترون است.

معادله لانژون در مورد دیامغناطیس

ویژگی دیامغناطیسی، مربوط به این امر است که بارهای الکتریکی گرایش دارند درون جسم را تا حدی در مقابل میدان خارجی اعمال شده استتار کنند. در الکترومغناطیس با قانون لنز آشناییم: هرگاه شاری در مدار الکتریکی تغییر کند، جریان القایی در جهتی برقرار می‌شود که با تغییر شار مخالفت کند.

در ابررسانا یا در مدار الکترون درون اتم، جریان القایی تا زمانی که میدان برقرار است، ادامه می‌یابد. میدان مغناطیسی ناشی از جریان القایی در جهت مخالف میدان اعمال شده است و گشتاور مغناطیسی مربوط به این جریان، گشتاور دیامغناطیسی است. حتی در فلزات عادی یک سهم دیامغناطیسی وجود دارد که از الکترونهاى رسانش ناشی می‌شود و برخورد الکترونها این ویژگی دیامغناطیسی را از بین نمی‌برد. در بررسی معمولی خاصیت دیامغناطیسی اتمها و یونها از فرضیه لامور استفاده می‌شود: حرکت الکترونها به گرد هسته مرکزی در میدان مغناطیسی، تا مرتبه اول برحسب B ، همانند یک حرکت ممکن در غیاب B است، با این تفاوت که در این حالت باید برهم‌نهی این حرکت با حرکت تقدیمی الکترونها با بسامد زاویه‌ای زیر نیز منظور شود

$$(CGS) \quad \omega = eB/\gamma mc; \quad (SI) \quad \omega = eB/\gamma m \quad (2)$$

اگر میدان به آرامی اعمال شود، حرکت در دستگاه مرجع دوار مانند حرکت اصلی در دستگاه ساکن قبل از اعمال میدان خواهد بود.

اگر در آغاز میانگین جریان الکترونها به گرد هسته صفر باشد، اعمال میدان مغناطیسی باعث یک جریان متناهی به گرد هسته خواهد شد. این جریان معادل با یک گشتاور مغناطیسی در جهت مخالف میدان اعمال شده است. فرض می‌شود که بسامد لامور (۲) از بسامد حرکت اصلی در میدان مرکزی بسیار کمتر باشد. این شرط در تشدید سیکلوترونی حاملهای آزاد صدق نمی‌کند، و بسامد سیکلوترونی حاملها دوبرابر بسامد (۲) است. حرکت تقدیمی لامور Z الکترون معادل با جریان الکتریکی زیر است

$$(SI) \quad I = (-Ze) \left(\frac{1}{2\pi} \cdot \frac{eB}{\gamma m} \right) \quad (3)$$

گشتاور مغناطیسی μ یک حلقه جریان با حاصلضرب (جریان) \times (مساحت حلقه) داده می‌شود. مساحت حلقه‌ای به شعاع ρ برابر است با $\pi\rho^2$. داریم

$$(SI) \quad \mu = -\frac{Ze^2 B}{4m} \langle \rho^2 \rangle, \quad (CGS) \quad \mu = -\frac{Ze^2 B}{4mc^2} \langle \rho^2 \rangle \quad (4)$$

در اینجا $\langle \rho^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle$ میانگین مربع فاصله عمودی الکترون از محوری است که با میدان موازی است

و از هسته می‌گذرد. میانگین مربع فاصله الکترونها از هسته برابر است با $\langle z^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle = \langle r^2 \rangle$.
 برای یک توزیع متقارن کروی بار داریم $\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle$ ، بنابراین $\langle r^2 \rangle = \frac{3}{2} \langle \rho^2 \rangle$.
 در صورتی که تعداد اتمها در واحد حجم N باشد، با استفاده از (۴)، پذیرفتاری دیامغناطیسی در واحد حجم برابر است با

$$\begin{aligned} \text{(CGS)} \quad \chi &= \frac{N\mu}{B} = -\frac{NZe^2}{6mc^2} \langle r^2 \rangle; \\ \text{(SI)} \quad \chi &= \frac{\mu_0 N\mu}{B} = -\frac{\mu_0 NZe^2}{6m} \langle r^2 \rangle \end{aligned} \quad (5)$$

این نتیجه کلاسیکی لانژون است.

مسئله محاسبه پذیرفتاری دیامغناطیسی اتم منزوی به محاسبه $\langle r^2 \rangle$ برای توزیع الکترونی در داخل اتم کاهش می‌یابد. این توزیع را می‌توان با استفاده از مکانیک کوانتومی محاسبه کرد.
 مقادیر تجربی را برای اتمهای خنثی می‌توان به ساده‌ترین وجه برای گازهای بی‌اثر به‌دست آورد. مقادیر نوعی تجربی پذیرفتاری مولی عبارت‌اند از:

Xe	Kr	Ar	Ne	He
-43°	-28°	-19.4	-7.2	-1.9

CGS در χ_M برحسب cm^3/mol : 10^{-6}

سهم دیامغناطیسی مغزهای یونی در جامدهای دی‌الکتریک، تقریباً با نتیجه لانژون توصیف می‌شود. همان‌گونه که از اثر دوهااس-ون آلفن، که در فصل ۹ مورد بحث قرارگفت، آشکار است که سهم الکترونیهای رسانش پیچیده‌تر است

نظریه کوانتومی دیامغناطیس در مورد دستگاههای تک‌هسته‌ای

در اینجا بررسی کوانتومی نتیجه کلاسیکی لانژون را ارائه می‌دهیم. از اپوست (ز-۱۸)، تأثیر میدان مغناطیسی به اضافه شدن جملات هامیلتونی زیر منجر می‌شود

$$\mathcal{H} = \frac{ie\hbar}{2mc} (\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla) + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 \quad (6)$$

برای یک الکترون اتمی، این جملات را معمولاً می‌توان به صورت یک اختلال کوچک بررسی کرد. اگر میدان مغناطیسی یکنواخت در جهت z باشد، می‌توان نوشت

$$A_x = -\frac{1}{c} yB, \quad A_y = \frac{1}{c} xB, \quad A_z = 0 \quad (7)$$

و رابطه (۶) به این صورت در می آید

$$\mathcal{H} = \frac{ie\hbar B}{2mc} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{e^2 B^2}{4mc^2} (x^2 + y^2) \quad (۸)$$

جمله اول در سمت راست، اگر r از هسته اندازه گیری شود، با مؤلفه تکانه زاویه ای مداری L_z متناسب است. در دستگاههای تک هسته ای، این جمله فقط به خاصیت پارامغناطیسی می انجامد. جمله دوم برای یک دستگاه متقارن کروی، سهم زیر را

$$E' = \frac{e^2 B^2}{4mc^2} \langle r^2 \rangle \quad (۹)$$

توسط نظریه اختلال مرتبه اول ارائه می دهد. گشتاور مغناطیسی مربوطه دیامغناطیسی است:

$$\mu = -\frac{\partial E'}{\partial B} = -\frac{e^2 \langle r^2 \rangle}{6mc^2} B \quad (۱۰)$$

که با نتیجه کلاسیکی (۵) سازگار است.

پارامغناطیس

پارامغناطیس الکترونی (سهم مثبت در χ) در موارد زیر یافت می شود:

۱. نقص اتمها، مولکولها، و شبکه هایی با تعداد الکترونها فرد، زیرا در این صورت اسپین کل سیستم نمی تواند صفر باشد. مثالها: اتمهای آزاد سدیم؛ اکسیدنیتریک گازی (NO)؛ رادیکالهای آلی آزاد مانند تری فنیل متیل $C(C_6H_5)_3$ ؛ مراکز F در هالیدهای قلیایی.
۲. اتمهای آزاد و یونهایی که فقط بخشی از یک پوسته داخلی آنها پر باشد؛ عناصر واسط؛ یونهایی که تعداد الکترونها آنها با تعداد الکترونها عناصر واسط برابر است؛ عناصر کمیاب خاکی و اکتینیدها. مثالها: U^{4+} ، Gd^{3+} ، Mn^{2+} . بسیاری از این یونها وقتی در جامد قرار می گیرند از خود خاصیت پارامغناطیسی نشان می دهند، ولی این امر مطلق نیست.
۳. ترکیبات معدودی که تعداد الکترونهایشان زوج باشد، شامل اکسیژن مولکولی و دو رادیکالهای آلی.
۴. فلزات

نظریه کوانتومی پارامغناطیس

گشتاور مغناطیسی اتم یا یون در فضای آزاد با رابطه زیر داده می شود

$$\mu = \gamma \hbar J = -g \mu_B J \quad (۱۱)$$

که در آن تکانه زاویه ای کل $\hbar J$ برابر است با حاصل جمع تکانه های مداری $\hbar L$ و اسپینی $\hbar S$.

ثابت γ نسبت گشتاور مغناطیسی به تکانه زاویه‌ای است؛ γ را نسبت ژیرومغناطیسی یا نسبت مغناطوژیتری می‌نامند. برای دستگاه‌های الکترونی یک کمیت g ، به نام ضریب g یا ضریب شکافتگی طیف‌نمایی. به این صورت تعریف می‌شود

$$g\mu_B \equiv -\gamma\hbar \quad (12)$$

برای اسپین الکترون $g = 2.0023$ ، معمولاً به صورت 2.00 در نظر گرفته می‌شود. برای اتم آزاد ضریب g با معادله لاندیه داده می‌شود

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (13)$$

مگنتون بور μ_B به صورت $e\hbar/2mc$ در CGS و $e\hbar/2m$ در SI تعریف می‌شود. مقدار آن به مقدار گشتاور مغناطیسی اسپینی الکترون آزاد بسیار نزدیک است. ترازهای انرژی در میدان مغناطیسی عبارت‌اند از

$$U = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = m_J g \mu_B B \quad (14)$$

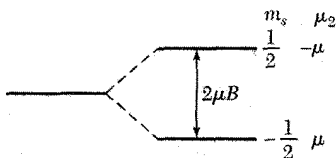
که در آن m_J عدد کوانتومی سمتی و دارای مقادیر $J, J-1, \dots, -J$ است. برای یک تک‌اسپین، بدون گشتاور مداری، داریم $m_J = \pm \frac{1}{2}$ و $g = 2$ ، بنابراین $U = \pm \mu_B B$. این شکافتگی در شکل ۲ نشان داده شده است.

اگر دستگاهی فقط شامل دو تراز باشد، با $\tau \equiv k_B T$ ، جمعیت‌های تعادلی، چنین‌اند

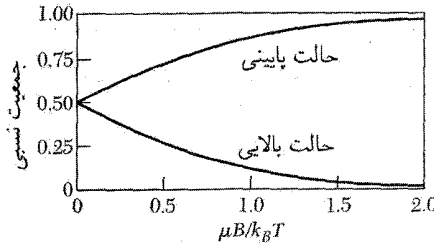
$$\frac{N_1}{N} = \frac{\exp(\mu_B B/\tau)}{\exp(\mu_B B/\tau) + \exp(-\mu_B B/\tau)}; \quad (15)$$

$$\frac{N_2}{N} = \frac{\exp(-\mu_B B/\tau)}{\exp(\mu_B B/\tau) + \exp(-\mu_B B/\tau)} \quad (16)$$

در اینجا N_1 و N_2 جمعیت ترازهای پایینی و بالایی‌اند و $N = N_1 + N_2$ تعداد کل اتم‌هاست. جمعیت‌های نسبی در شکل ۳ ترسیم شده‌اند.



شکل ۲. شکافتگی تراز انرژی برای الکترون در میدان مغناطیسی B در جهت مثبت محور z . برای الکترون، علامت گشتاور مغناطیسی μ مخالف با اسپین S است، بنابراین $\mu = -g\mu_B S$. در حالت‌های B انرژی پایین، گشتاور مغناطیسی با میدان مغناطیسی موازی است.



شکل ۳. جمعیت‌های نسبی دستگاه دوترازی در تعادل گرمایی، در دمای T و در میدان مغناطیسی B . گشتاور مغناطیسی با تفاضل بین دو منحنی متناسب است.

تصویر گشتاور مغناطیسی حالت بالایی در جهت میدان برابر با $-\mu$ و تصویر گشتاور مغناطیسی حالت پایینی برابر با μ است. برآیند مغناطیدگی برای N اتم در واحد حجم، با $x = \mu B/k_B T$ ، چنین است.

$$M = (N_1 - N_2)\mu = N\mu \cdot \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} = N\mu \tanh x \quad (17)$$

برای $x \ll 1$ مقدار $\tanh x \cong x$ خواهیم داشت

$$M \cong N\mu(\mu B/k_B T) \quad (18)$$

اتمی که عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای آن J است، در میدان مغناطیسی دارای $2J + 1$ تراز انرژی هم‌فاصله است. مغناطیدگی این اتم (شکل ۴) با رابطه زیر داده می‌شود.

$$M = NgJ\mu_B B_J(x), \quad (x = gJ\mu_B B/k_B T) \quad (19)$$

که در آن تابع بریلوئن B_J به صورت زیر تعریف می‌شود

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \operatorname{ctnh} \left(\frac{(2J+1)x}{2J} \right) - \frac{1}{2J} \operatorname{ctnh} \left(\frac{x}{2J} \right) \quad (20)$$

معادله (۱۷) حالت خاصی از (۲۰) برای $J = \frac{1}{2}$ است.

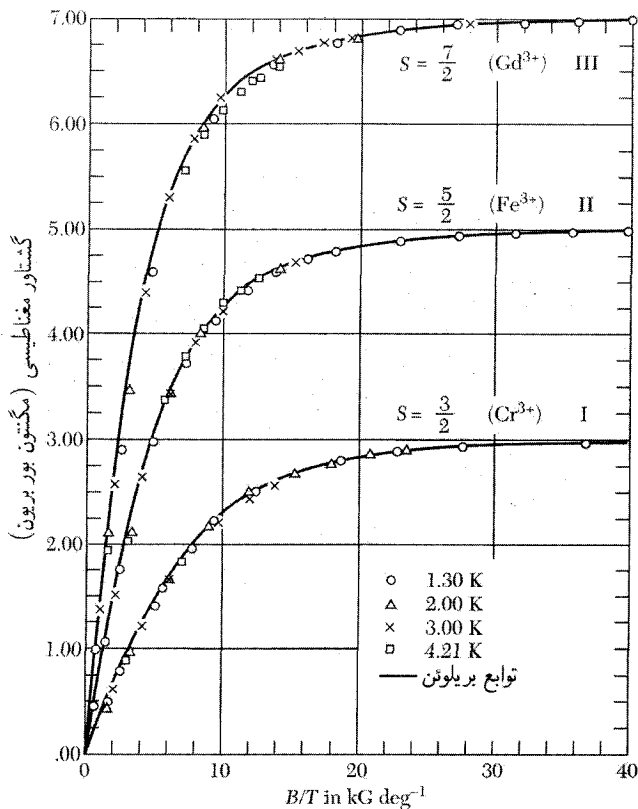
برای $x = \mu B/k_B T \ll 1$ داریم

$$\operatorname{ctnh} x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45} + \dots \quad (21)$$

و پذیرفتاری مغناطیسی برابر است با

$$\frac{M}{B} \cong \frac{NJ(J+1)g^2\mu_B^2}{2k_B T} = \frac{Np^2\mu_B^2}{2k_B T} = \frac{C}{T} \quad (22)$$

در اینجا p تعداد مؤثر مگنتونهای بور است و به صورت زیر تعریف می‌شود



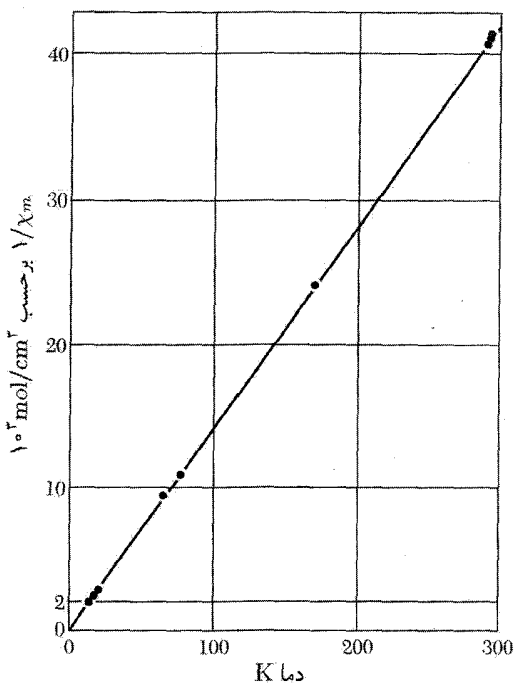
شکل ۴. منحنی گشتاور مغناطیسی برحسب B/T برای نمونه‌های کروی (I) زاج پتاسیم کرم، (II) زاج آهن آمونیم، و (II) گادولینیم سولفات با هشت مولکول آب بیش از ۹۹٫۵ درصد اشباع مغناطیسی در دمای ۱٫۳ K و در میدانی در حدود ۵۰۰۰۰ گاوس (ΔT) حاصل می‌شود.

$$p \equiv g [J(J + 1)]^{1/2} \quad (23)$$

ثابت C به ثابت کوری معروف است. شکل (۱۹) به قانون کوری-بریلوئن و (۲۲) به قانون کوری معروف است. نتایج مربوط به یونهای پارامغناطیسی در نمک گادولینیم در شکل ۵ نشان داده شده است.

یونهای خاکی کمیاب

یونهای عناصر خاکی کمیاب (جدول ۱) ویژگیهای شیمیایی تقریباً یکسانی دارند، و تفکیک شیمیایی شان به شکل نسبتاً خالص مدتی طولانی پس از کشف آنها انجام گرفت. ویژگیهای مغناطیسی آنها بسیار جالب توجه است. این یونها تنوع سازمان‌یافته و پیچیدگی قابل درکی از خود نشان می‌دهند. ویژگیهای



شکل ۵. منحنی $1/\chi$ بر حسب T برای نمک گادولینیم، $Gd(C_2H_3SO_4)_3 \cdot 9H_2O$. خط مستقیم قانون کوری است.

شیمیایی یونهای سه ظرفیتی به این دلیل با یکدیگر مشابه‌اند که پیکربندی بیرونیترین پوسته‌های الکترونی آنها، مانند زنون خنثی، به صورت $5s^2 5p^6$ است. در لاتان، که درست قبل از گروه خاکی کمیاب قرار گرفته است، پوسته $4f$ خالی است؛ در سریم یک الکترون $4f$ وجود دارد، و تعداد الکترونهای $4f$ در این گروه به تدریج اضافه می‌شود تا اینکه به $4f^{13}$ برای ایتربیم و به پوسته $4f^{14}$ برای لوتسیم می‌رسیم. شعاع یونهای سه ظرفیتی در این گروه به گونه نسبتاً همواری به تدریج منقبض می‌شود و از 1.11 \AA برای سریم به 0.94 \AA برای ایتربیم می‌رسد. این همان انقباض معروف به «انقباض لاتانیدها» است. آنچه رفتار مغناطیسی یک نوع یون را از نوع دیگر متمایز می‌کند، تعداد الکترونهای $4f$ است که در پوسته داخلی با شعاعی در حدود 0.3 \AA فشرده شده‌اند. حتی در فلزات، مغز یونی $4f$ ویژگیهای اتمی و یکپارچگی خود را حفظ می‌کند: هیچ گروه دیگری از عناصر جدول دوره‌ای این چنین جالب توجه نیستند.

بحث قبلی در مورد پارامغناطیسی در اتمهایی صادق است که حالت پایه آنها $(2J + 1)$ مرتبه واگن باشد. میدان مغناطیسی این واگنی را از بین می‌برد. از تأثیر تمام حالت‌های انرژی بالاتر دست‌گاه چشم‌پوشی می‌شود. به نظر می‌رسد که این فرضیات در مورد تعدادی از یونهای خاکی کمیاب (جدول ۱) صادق است.

جدول ۱. تعداد مؤثر مگنتونها، p ، برای یونهای گروه لاتانید سه ظرفیتی (در حدود دمای اتاق)

یون	پیکربندی	تراز اصلی	$p =$ (محاسبه شده)	p (تجربی)
			$g[J(J+1)]^{1/2}$	تقریبی
Ce ³⁺	$4f^1 5s^2 p^6$	$^2F_{5/2}$	۲٫۵۴	۲٫۴
Pr ³⁺	$4f^2 5s^2 p^6$	3H_4	۳٫۵۸	۳٫۵
Nd ³⁺	$4f^3 5s^2 p^6$	$^4I_{9/2}$	۳٫۶۲	۳٫۵
Pm ³⁺	$4f^4 5s^2 p^6$	5I_4	۲٫۶۸	—
Sm ³⁺	$4f^5 5s^2 p^6$	$^6H_{5/2}$	۰٫۸۴	۱٫۵
Eu ³⁺	$4f^6 5s^2 p^6$	7F_0	۰	۳٫۴
Gd ³⁺	$4f^7 5s^2 p^6$	$^8S_{7/2}$	۷٫۹۴	۸٫۰
Tb ³⁺	$4f^8 5s^2 p^6$	7F_6	۹٫۷۲	۹٫۵
Dy ³⁺	$4f^9 5s^2 p^6$	$^6H_{15/2}$	۱۰٫۶۳	۱۰٫۶
Ho ³⁺	$4f^{10} 5s^2 p^6$	5I_8	۱۰٫۶۰	۱۰٫۴
Er ³⁺	$4f^{11} 5s^2 p^6$	$^4I_{15/2}$	۹٫۵۹	۹٫۵
Tm ³⁺	$4f^{12} 5s^2 p^6$	3H_6	۷٫۵۷	۷٫۳
Yb ³⁺	$4f^{13} 5s^2 p^6$	$^2F_{7/2}$	۴٫۵۴	۴٫۵

تعداد محاسبه شده مگنتونها را می توان با استفاده از مقادیر g ، حاصل از نتیجه لانده (۱۳)، و تراز حالت پایه، حاصل از نظریه هوند در مورد جمله های طیفی، به دست آورد. اختلاف بین تعداد تجربی مگنتونها و تعدادی که براساس این فرضیات محاسبه شده است در مورد یونهای Eu^{3+} و Sm^{3+} کاملاً قابل ملاحظه است. برای این یونها لازم است تأثیر حالتهای بالای چندتایی $L - S$ را مورد توجه قرار داد، زیرا در اینجا فواصل بین حالتهای متوالی چندتایی در مقایسه با $k_B T$ در دمای اتاق زیاد نیست. یک چندتایی مجموعه ای از ترازهاست که دارای مقادیر متفاوت J اند و از یک L و S معین ناشی می شوند. ترازهای یک چندتایی در اثر برهم کنش اسپین-مدار شکافته می شوند.

قواعد هوند

بر طبق قواعد هوند، در مورد الکترونهاى موجود در پوسته معینی از اتم، الکترونها به گونه ای اوربیتالها را اشغال می کنند که حالت پایه با مقادیر زیر مشخص شود:

۱. مقدار بیشینه اسپین کل S ، تا جایی که اصل طرد اجازه می دهد؛

۲. مقدار بیشینه تکانه زاویه‌ای مداری L که با این مقدار S سازگار باشد؛

۳. مقدار تکانه زاویه‌ای کل J هنگامی که پوسته کمتر از نصف پر است برابر با $|L - S|$ و هنگامی که بیشتر از نصف پر باشد برابر با $L + S$ است. هنگامی که پوسته درست تا نیمه پر باشد، با استفاده از قاعده نخست $L = 0$ و در نتیجه $J = S$.

منشأ قاعده نخست هوند در اصل طرد و در دافعه کولنی بین الکترونها نهفته است. اصل طرد از این مانع می‌شود که دو الکترون با اسپینهای یکسان به‌طور همزمان در یک مکان باشند. بنابراین الکترونهايي که اسپین یکسان دارند از یکدیگر دور نگه می‌دارد، دورتر از فاصله بین الکترونهايي با اسپین مخالف. به دلیل برهم‌کنش کولنی، انرژی الکترونهايي با اسپین یکسان پایینتر است—میانگین انرژی پتانسیل برای اسپینهای موازی از میانگین انرژی پتانسیل برای اسپینهای پادموازی کمتر مثبت است. یون Mn^{2+} برای این موضوع مثال خوبی است. این یون دارای ۵ الکترون در پوسته $3d$ است، بنابراین تا نیمه پر است. اگر هر الکترون به اوربیتال مجزایی وارد شود، اسپینها همه می‌توانند موازی باشند. درست پنج اوربیتال مختلف موجود است که با اعداد کوانتومی مداری $-2, -1, 0, 1, 2$ مشخص می‌شوند. هر یک از این اوربیتالها با یک الکترون اشغال می‌شود. انتظار می‌رود که $S = \frac{5}{2}$ ، همان‌گونه که تجربه نشان می‌دهد، چون $\sum m_L = 0$ ، تنها مقدار ممکن L ، برابر با صفر است.

بهترین راه برای رسیدن به قاعده دوم هوند محاسبات مدلی است. برای مثال پاولینگ و ویلسون^۱ محاسباتی را در مورد جمله‌های طیفی ناشی از پیکربندی p^2 ارائه می‌دهند. قاعده سوم هوند علامت برهم‌کنش اسپین-مدار را نشان می‌دهد: انرژی یک تک‌الکترون هنگامی که اسپین با تکانه زاویه‌ای مداری پادموازی باشد دارای پایینترین مقدار است. ولی زوجهای با انرژی پایین m_L و m_S با افزایش الکترونها به پوسته به تدریج مصرف و تمام می‌شوند؛ هنگامی که پوسته بیش از نصف پر است، بنابر اصل طرد، حالت با پایینترین انرژی لزوماً دارای اسپینی به موازات مدار است.

به دو مثال از قواعد هوند توجه کنید: یون Ce^{3+} یک تک‌الکترون f دارد؛ الکترون f دارای $l = 3$ و $s = \frac{1}{2}$ است. از آنجا که پوسته f کمتر از نصف پر است، مقدار J به کمک قاعده قبلی برابر است با $\frac{5}{2} = L - S = 3 - \frac{1}{2}$. یون Pr^{3+} دارای دو الکترون f است؛ یکی از قواعد حاکی از آن است که اسپینها جمع می‌شوند تا $S = 1$ حاصل شود. هر دو الکترون f بدون آنکه اصل طرد پاولی را نقض کنند، نمی‌توانند دارای $m_l = 3$ باشند، در نتیجه بیشینه L که با اصل پاولی سازگار باشد، ۶ نیست، بلکه ۵ است. مقدار J برابر است با $4 = L - S = 5 - 1$.

1. L. Pauling and E. B. Wilson, *Introduction to quantum mechanics*, McGraw-Hill, 1935, pp. 239-246.

جدول ۲. تعداد مگنتونهای مؤثر برای یونهای گروه آهن

یون	پیکربندی	تراز اصلی	p محاسبه شده $g[J(J+1)]^{1/2}$	p محاسبه شده $2[S(S+1)]^{1/2}$	p تجربی*
Ti ^{۳+} , V ^{۴+}	۳d ^۱	^۲ D _{۳/۲}	۱٫۵۵	۱٫۷۳	۱٫۸
V ^{۳+}	۳d ^۲	^۳ F _۲	۱٫۶۳	۲٫۸۳	۲٫۸
Cr ^{۳+} , V ^۲	۳d ^۳	^۴ F _{۳/۲}	۰٫۷۷	۳٫۸۷	۳٫۸
Mn ^{۳+} , Cr ^{۲+}	۳d ^۴	^۵ D _۰	۰	۴٫۹۰	۴٫۹
Fe ^{۳+} , Mn ^{۲+}	۳d ^۵	^۶ S _{۵/۲}	۵٫۹۲	۵٫۹۲	۵٫۹
Fe ^{۲+}	۳d ^۶	^۵ D _۴	۶٫۷۰	۴٫۹۰	۵٫۴
Co ^{۲+}	۳d ^۷	^۴ F _{۳/۲}	۶٫۶۳	۳٫۸۷	۴٫۸
Ni ^{۲+}	۳d ^۸	^۳ F _۴	۵٫۵۹	۲٫۸۳	۳٫۲
Cu ^{۲+}	۳d ^۹	^۲ D _{۵/۲}	۳٫۵۵	۱٫۷۳	۱٫۹

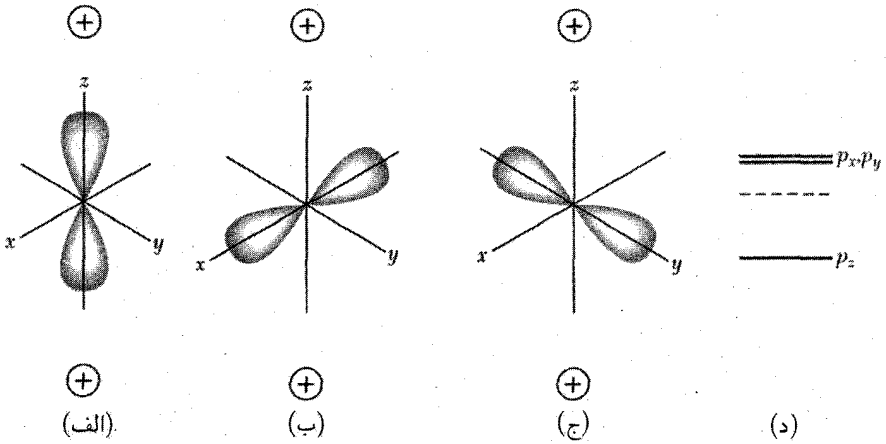
* مقادیر نوعی.

یونهای گروه آهن

جدول ۲ نشان می‌دهد که تعداد تجربی مگنتونها برای نمکهای گروه واسط آهن در جدول دوره‌ای سازگاری ضعیفی با رابطه (۲۳) دارد. این مقادیر غالباً با تعداد مگنتونهای $p = 2[S(S+1)]^{1/2}$ توافق کاملاً خوبی دارند، گویی گشتاور مداری اصلاً وجود ندارد.

شکافتگی ناشی از میدان بلور

اختلاف بین رفتار نمکهای خاکی کمیاب و گروه آهن این است که پوسته $4f$ ، که مسبب خاصیت پارامغناطیسی در یونهای خاکی کمیاب است، در ژرفای یونها، درون پوسته‌های $5s$ و $5p$ نهفته است، در حالی که در یونهای گروه آهن پوسته $3d$ ، که باعث خاصیت پارامغناطیسی است، بیرونیترین پوسته است. پوسته $3d$ تحت تأثیر میدان الکتریکی ناهمگن و شدید حاصل از یونهای همسایه قرار می‌گیرد. این میدان الکتریکی ناهمگن را میدان بلور گویند. برهم‌کنش یونهای پارامغناطیسی با میدان بلور دارای دو اثر مهم است: جفت‌شدگی بردارهای L و S به‌طور گسترده‌ای شکسته می‌شود، بنابراین حالتها دیگر با مقدار J مشخص نمی‌شوند. از آن گذشته، $2L + 1$ زیرتراز متعلق به یک L معلوم، که در یون آزاد واگن‌اند، ممکن است، مانند شکل ۶، توسط میدان بلور شکافته شوند. این شکافتگی سهم حرکت مداری را در گشتاور مغناطیسی از بین می‌برد.



شکل ۶. اتمی با تکانه زاویه‌ای مداری $L = 1$ در نظر بگیرید که در میدان الکتریکی بلورین تک‌محوری ناشی از دو یون مثبت، در امتداد محور z ، قرار گرفته است. در اتم آزاد حالت‌های $m_l = \pm 1, 0$ انرژی‌های یکسان دارند؛ این حالتها واگن‌اند. هنگامی که در بلور، ابرالکترونی، مانند (الف)، نزدیک به یونهای مثبت باشد، انرژی اتم پایینتر از وقتی است که این ابر، مانند (ب) و (ج)، در نیمه راه بین یونها سمتگیری شده باشد. این چگالیهای بار از توابع موجی به شکل $f(r)$ ، $xf(r)$ و $yf(r)$ ناشی می‌شوند، که به ترتیب اوربیتالهای p_z ، p_x و p_y نامیده می‌شوند. در میدان متقارن محوری، همان‌گونه که نشان داده شده است، اوربیتالهای p_x و p_y واگن‌اند. ترازهای انرژی مربوط به اتم آزاد (خط‌چین) در شکلی (د) نشان داده شده‌اند. اگر میدان الکتریکی دارای تقارن محوری نباشد، هر سه حالت دارای انرژیهای مختلف خواهند بود.

فرونشانی تکانه زاویه‌ای مداری

در میدانی الکتریکی که جهتش به طرف یک هسته ثابت باشد، صفحه مدار کلاسیکی در فضا ثابت است، بنابراین تمام مؤلفه‌های L_x ، L_y ، L_z ، تکانه زاویه‌ای مداری ثابت‌اند. در نظریه کوانتومی یکی از مؤلفه‌های تکانه زاویه‌ای، که معمولاً L_z در نظر گرفته می‌شود، و مربع تکانه زاویه‌ای مداری کل L^2 در میدان مرکزی ثابت‌اند. در میدان غیرمرکزی، صفحه مدار پیوسته تغییر می‌کند و مؤلفه‌های تکانه زاویه‌ای دیگر ثابت نیستند و میانگینشان ممکن است صفر شود. در بلور، L_z دیگر ثابت حرکت نیست، هر چند L^2 ممکن است با تقریب خوبی همچنان ثابت بماند. هنگامی که میانگین L_z صفر شود، گویند تکانه زاویه‌ای مداری فرو نشانده شده است. گشتاور مغناطیسی هر حالت، با مقدار میانگین عملگر گشتاور مغناطیسی $\mu_B(L + 2S)$ داده می‌شود. در یک میدان مغناطیسی در جهت z ، سهم مداری در گشتاور مغناطیسی متناسب با مقدار انتظاری کوانتومی L_z است؛ اگر گشتاور مکانیکی L_z فرو نشانده شود، گشتاور مغناطیسی مداری نیز فرو نشانده خواهد شد.

برای مثال الکترونی با عدد کوانتومی مداری $L = 1$ ، که به گرد هسته‌ای حرکت می‌کند، در میدان الکتریکی بلورین ناهمگن در نظر بگیرید. اسپین الکترون را حذف می‌کنیم.

در یک بلور متقارن اورتورومبیک بار یونهای همسایه منجر به پتانسیل الکتروستاتیکی φ حول هسته به شکل زیر خواهد شد

$$e\varphi = Ax^2 + By^2 - (A + B)z^2 \quad (24)$$

که در آن A و B ثابت اند. این رابطه کمترین درجه چندجمله‌ای برحسب x , y , و z است که پاسخی از معادله لاپلاس $\nabla^2 \varphi = 0$ است و با تقارن بلور همخوانی دارد.

در فضای آزاد، حالت پایه، با اعداد کوانتومی مغناطیسی $-1, 0, 1$ و $m_L = 1, 0, -1$ واگنی سه تایی دارد. در میدان مغناطیسی، این ترازها به انرژیهای شکافته می‌شوند که با میدان B متناسب اند، و همین شکافتگی متناسب با میدان است که باعث پذیرفتاری پارامغناطیسی عادی یون می‌شود. این تصویر ممکن است بلور متفاوت باشد. سه تابع موج زیر را حالت پایه بدون اختلال یون اختیار می‌کنیم

$$U_x = xf(r); \quad U_y = yf(r); \quad U_z = zf(r) \quad (25)$$

این توابع موج متعامدند، و فرض می‌شود که بهنجار شده‌اند. می‌توان نشان داد که هر U از این ویژگی برخوردار است:

$$\mathcal{L}^2 U_i = L(L + 1)U_i = 2U_i \quad (26)$$

که در آن \mathcal{L}^2 عملگر مربع تکانه زاویه‌ای مداری برحسب واحدهای \hbar است. نتیجه (۲۶) تأیید می‌کند که در واقع توابع موج انتخاب شده توابع p ، با $L = 1$ اند.

اکنون مشاهده می‌کنیم که U ها نسبت به اختلال قطری اند، زیرا تقارن عناصر غیرقطری آنها را صفر می‌کند:

$$\langle U_x | e\varphi | U_y \rangle = \langle U_x | e\varphi | U_z \rangle = \langle U_y | e\varphi | U_z \rangle = 0 \quad (27)$$

برای مثال انتگرال زیر را در نظر بگیرید

$$\langle U_x | e\varphi | U_y \rangle = \int xy |f(r)|^2 \{Ax^2 + By^2 - (A + B)z^2\} dx dy dz \quad (28)$$

انتگرال تابع فردی از x (و نیز y) است و بنابراین باید صفر باشد. در این صورت عناصر ماتریس قطری ترازهای انرژی را ارائه می‌کنند:

$$\begin{aligned} \langle U_x | e\varphi | U_x \rangle &= \int |f(r)|^2 \{Ax^4 + By^2 x^2 - (A + B)z^2 x^2\} dx dy dz \\ &= A(I_1 - I_2) \end{aligned} \quad (29)$$

که در آن

$$I_1 = \int |f(r)|^2 x^2 dx dy dz; \quad I_2 = \int |f(r)|^2 x^2 y^2 dx dy dz$$

علاوه بر آن،

$$\langle U_y | e\varphi | U_y \rangle = B(I_1 - I_2); \quad \langle U_z | e\varphi | U_z \rangle = -(A + B)(I_1 - I_2)$$

سه ویژه حالت در میدان بلور توابع p اند که برشهای زاویه‌ای آنها در امتداد هر یک از محورهای x ، y ، و z است. گشتاور مداری هر تراز صفر است، زیرا

$$\langle U_x | L_z | U_x \rangle = \langle U_y | L_z | U_y \rangle = \langle U_z | L_z | U_z \rangle = 0$$

تراز هنوز دارای یک شکافه زاویه‌ای کل مشخص است، زیرا L^2 قطری است و $L = 1$ را می‌دهد، ولی مؤلفه‌های فضایی تکانه زاویه‌ای ثابت‌های حرکت نیستند و میانگین زمانی آنها در تقریب اول صفر است. بدین ترتیب مؤلفه‌های گشتاور مغناطیسی مداری نیز تحت همین تقریب صفر می‌شوند. نقش میدان بلور در فرایند فرونشانی آن است که ترازهای واگن اصلی را به ترازهای غیرمغناطیسی با بازه انرژیهای بزرگتر از μH از یکدیگر جدا سازد. در نتیجه میدان مغناطیسی در مقایسه با میدان بلور اختلال کوچکی است. در یک جایگاه شبکه‌ای با تقارن مکعبی هیچ جمله درجه چهاری برحسب مختصات الکترون در پتانسیل شکل (۲۴) وجود ندارد. اکنون حالت پایه یون با الکترون p (یا حفره در پوسته p) به صورت سه تاییه واگن است. در هر حال اگر این یون نسبت به محیط اطرافش جابه‌جا شود انرژی آن پایین خواهد آمد، در نتیجه یک پتانسیل غیرمکعبی مثل معادله (۲۴) خواهیم داشت. چنین جابه‌جایی خودبه‌خودی‌ای به اثر یان-تلر معروف است که غالباً اثر بزرگ و مهمی است، به‌ویژه برای یونهای Mn^{3+} و Cu^{2+} و برای حفره‌های موجود در هالیدهای قلیایی و نقره.

عامل شکافتگی طیف‌نمایی

برای راحتی فرض می‌کنیم که ثابتهای میدان بلور، A ، B به‌گونه‌ای اند که $U_x = xf(r)$ تابع موج مداری حالت زمینه‌ای در بلور باشد. برای اسپین $S = \frac{1}{2}$ دو حالت اسپینی ممکن $S_z = \pm \frac{1}{2}$ وجود دارد که با تابعهای اسپینی α و β ، که در غیاب میدان مغناطیسی در تقریب مرتبه صفر واگن اند، نمایش داده می‌شود. مسئله آن است که انرژی برهم‌کنش اسپین-مدار $\lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ را به حساب آوریم.

اگر تابع حالت پایه در تقریب مرتبه صفر $U_x \alpha = xf(r)\alpha$ باشد، در این صورت در تقریب مرتبه اول، با در نظر گرفتن برهم‌کنش $\lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ و استفاده از نظریه اختلال استاندارد داریم

$$\psi = [U_x - i(\lambda/2\Delta_1)U_y]\alpha - i(\lambda/2\Delta_2)U_z\beta \quad (30)$$

که در آن Δ_1 اختلاف انرژی بین حالت‌های U_x و U_y ، و Δ_2 اختلاف بین حالت‌های U_x و U_z است. جمله بر حسب $U_z \beta$ در واقع بر این نتیجه تنها یک اثر مرتبه دوم دارد و می‌توان آن را حذف کرد. مقدار انتظاری تکانه زاویه‌ای مداری با تقریب مرتبه اول مستقیماً با رابطه زیر داده می‌شود

$$\langle \psi | L_z | \psi \rangle = -\lambda / \Delta_1$$

و گشتاور مغناطیسی این حالت وقتی در جهت z اندازه‌گیری شود برابر است با

$$\mu_B \langle \psi | L_z + 2S_z | \psi \rangle = [-(\lambda / \Delta_1) + 1] \mu_B$$

از آنجا که جدایی بین ترازها $S_z = \pm \frac{1}{2}$ در میدان H برابر است با

$$\Delta E = g \mu_B H = 2[1 - (\lambda / \Delta_1)] \mu_B H$$

مقدار g یا عامل شکافتگی طیف‌نمایی رابطه (۱۲) در جهت z برابر است با

$$g = 2[1 - (\lambda / \Delta_1)] \quad (31)$$

پارامغناطیس مستقل از دمای ون ولک^۱

یک سیستم اتمی یا مولکولی که دارای هیچ گشتاور مغناطیسی در حالت پایه نیست در نظر بگیرید، به این معنی که عنصر قطری ماتریس عملگر گشتاور مغناطیسی μ_z صفر است.

فرض کنید یک عنصر ماتریسی غیرقطری $\langle s | \mu_z | 0 \rangle$ عملگر گشتاور مغناطیسی وجود دارد که حالت پایه صفر را به حالت برانگیخته s انرژی $E_s - E_0 = \Delta$ در بالای حالت پایه وصل می‌کند. در این صورت نظریه اختلال استاندارد تابع موج حالت پایه در یک میدان ضعیف ($\mu_2 B \ll \Delta$) به صورت زیر می‌شود

$$\psi'_0 = \psi_0 + (B/\Delta) \langle s | \mu_z | 0 \rangle \psi_s \quad (32)$$

و تابع موج حالت برانگیخته به این صورت در می‌آید

$$\psi'_s = \psi_s - (B/\Delta) \langle 0 | \mu_z | s \rangle \psi_0 \quad (33)$$

اکنون حالت زمینه اختلال یافته دارای گشتاور

$$\langle 0' | \mu_z | 0' \rangle \cong 2B |\langle s | \mu_z | 0 \rangle|^2 / \Delta \quad (34)$$

و حالت بالاتر دارای گشتاور

$$\langle s' | \mu_z | s' \rangle \cong -2B |\langle s | \mu_z | 0 \rangle|^2 / \Delta \quad (35)$$

است. دو مورد جالب توجه برای بررسی وجود دارد:

مورد (الف) $\Delta \ll k_B T$. جمعیت در حالت پایه نسبت به حالت برانگیخته تقریباً برابر با $N\Delta/2k_B T$ است، طوری که مغناطیدگی برآیند برابر است با

$$M = \frac{2B|\langle s|\mu_z|0\rangle|^2}{\Delta} \cdot \frac{N\Delta}{2k_B T} \quad (36)$$

که منجر به پذیرفتاری زیر می‌شود

$$\chi = N|\langle s|\mu_z|0\rangle|^2/k_B T \quad (37)$$

در اینجا N تعداد مولکولها در واحد حجم است. این سهم به شکل متداول قانون کوری است، هر چند در اینجا سازوکار مغناطیدگی از قطیدگی حالت‌های سیستم ناشی می‌شود، در حالی که سازوکار مغناطیدگی با اسپینهای آزاد عبارت است از توزیع مجدد یونها در بین حالت‌های اسپینی. می‌بینیم که شکافتگی Δ در رابطه (۳۷) وارد نمی‌شود.

مورد (ب) $\Delta \gg k_B T$. در اینجا جمعیت تقریباً تماماً در حالت پایه است، به طوری که

$$M = \frac{2NB|\langle s|\mu_z|0\rangle|^2}{\Delta} \quad (38)$$

پذیرفتاری برابر است با

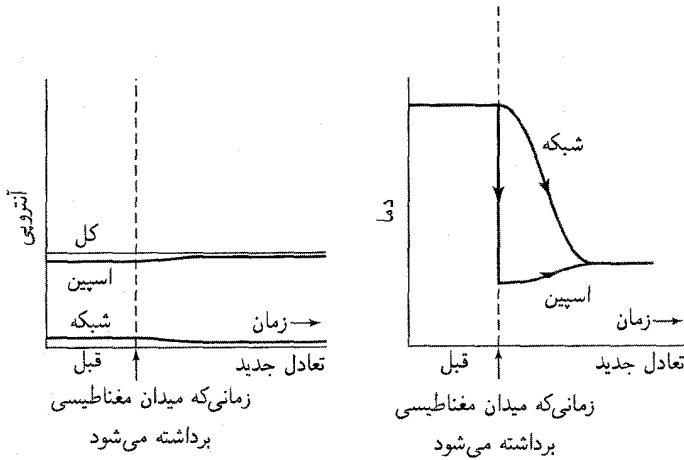
$$\chi = \frac{2N|\langle s|\mu_z|0\rangle|^2}{\Delta} \quad (39)$$

که مستقل از دماست. این نوع سهم به پارامغناطیس ون ولک معروف است.

سرمایش به وسیلهٔ وامغناطیدگی آیزنتروپیک

نخستین روش برای دستیابی به دماهای بسیار پایینتر از ۱K، روش وامغناطیدگی آیزنتروپیک یا بی‌درروی نمک پارامغناطیس بود. با کاربرد این روش، دماهای 10^{-3} K و پایینتر به دست آمده است. این روش بر این واقعیت استوار است که در دمای ثابت، آنتروپی دستگاهی از گشتاورهای مغناطیسی با اعمال میدان مغناطیسی پایین می‌آید.

آنتروپی مقیاسی از بی‌نظمی دستگاه است: هر چه بی‌نظمی بیشتر باشد، آنتروپی بیشتر است. در میدان مغناطیسی بخشی از گشتاورها به صف می‌شوند (یعنی بخشی از آنها منظم می‌شوند)، در نتیجه میدان آنتروپی را کاهش می‌دهد. با کاهش دما نیز آنتروپی کم می‌شود، زیرا گشتاورهای بیشتری به صف می‌شوند. حال اگر بتوان میدان مغناطیسی را بدون تغییر آنتروپی دستگاه اسپینی حذف کرد، نظم دستگاه اسپینی در غیاب میدان، در مقایسه با حالتی که دستگاه همین درجهٔ نظم را در حضور میدان داشته باشد، به دمای



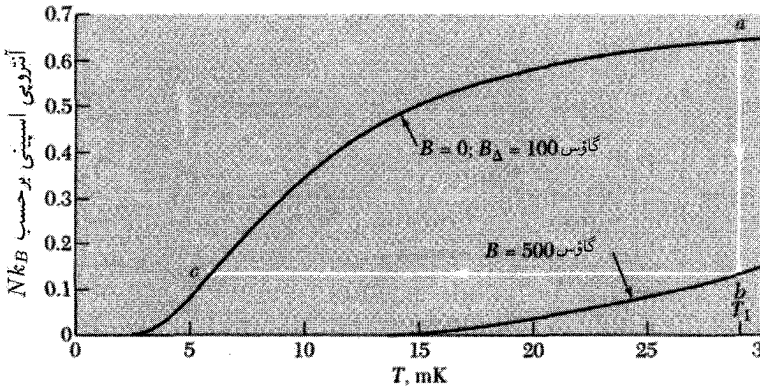
شکل ۷. آنتروپی کل نمونه در حین وامغانطیدگی بی دررو ثابت است. برای سرمایش مؤثر، آنتروپی اولیهٔ شبکه باید در مقایسه با آنتروپی دستگاه اسپینی کم باشد.

پایینتری مربوط می‌شود. هنگامی که نمونه در آنتروپی ثابتی وامغانطیده می‌شود، آنتروپی فقط می‌تواند، مانند شکل ۷، از دستگاه ارتعاشات شبکه به داخل دستگاه اسپینی وارد شود. در دماهای مورد نظر، آنتروپی ارتعاشات شبکه معمولاً چشم‌پوشیدنی است؛ لذا آنتروپی دستگاه اسپینی در حین وامغانطیدگی بی درروی نمونه اساساً ثابت است. سرمایش مغناطیسی یک مرحله‌ای است، نه چرخه‌ای.

ابتدا عبارتی برای آنتروپی اسپینی دستگاهی شامل N یون به دست می‌آوریم، که اسپین هر یک S است. فرض می‌کنیم دما آن قدر بالا است که دستگاه اسپینی کاملاً بی‌نظم است. یعنی، فرض می‌کنیم که T بسیار بیشتر از دمای Δ است. این دما انرژی برهم‌کنشهایی ($E_{int} \equiv k_B \Delta$) را مشخص می‌کند، که سعی دارند اسپینها را در جهت مرجحی قرار دهند. بعضی از این برهم‌کنشها در فصل ۱۲ مورد بحث قرار می‌گیرند. تعریف آنتروپی σ دستگاهی شامل G حالت موجود به صورت $\sigma = k_B \ln G$ است. در دمایی که آن قدر زیاد است که همهٔ $2S + 1$ حالت هر یون تقریباً دارای جمعیت یکسانی باشند، G برابر است با تعداد راههایی که می‌توان N اسپین را در $2S + 1$ حالت قرار داد. بنابراین $G = (2S + 1)^N$ ، و از آنجا آنتروپی اسپینی σ_S چنین است

$$\sigma_S = k_B \ln(2S + 1)^N = N k_B \ln(2S + 1) \quad (40)$$

اگر جمعیت ترازهای پایینتر، وقتی میدان $2S + 1$ حالت انرژی را از یکدیگر جدا می‌کند، افزایش یابد، آنتروپی اسپینی به وسیلهٔ میدان مغناطیسی کاهش می‌یابد.



شکل ۸. آنتروپی دستگاهی با اسپین $\frac{1}{2}$ به صورت تابعی از دما، با فرض اینکه یک میدان مغناطیسی داخلی کاتوره‌ای B_{Δ} برابر با 10^5 گاوس وجود دارد. نمونه در طول ab به طور تکدما مغناطیده و سپس از نظر گرمایی عایق‌بندی می‌شود. میدان مغناطیسی خارجی در طول bc قطع می‌شود. برای آنکه بتوان شکل را در مقیاس قابل قبولی رسم کرد، دمای اولیه T_1 و نیز میدان مغناطیسی خارجی از آنچه عملاً به‌کار می‌رود پایینتر است.

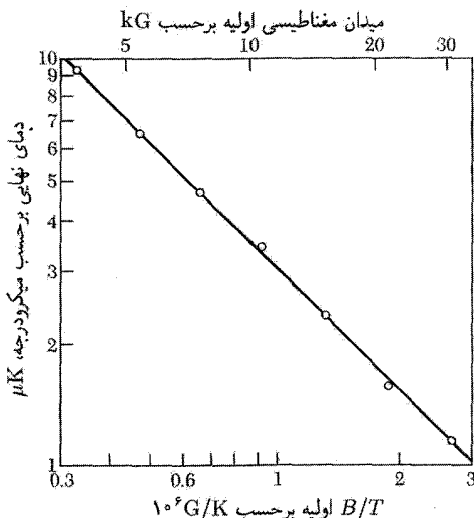
مراحلی که در فرایند سرمایش به‌کار می‌رود در شکل ۸ نشان داده شده است. میدان در دمای T_1 به نمونه، که تماس گرمایی آن با محیط خوب است، اعمال می‌شود، و مسیر تکدمای ab را می‌دهد. سپس، نمونه عایق‌بندی ($\Delta\sigma = 0$) و میدان برداشته می‌شود؛ در این صورت نمونه مسیر آنتروپی ثابت ab را می‌پیماید و به دمای T_2 می‌انجامد. تماس گرمایی در T_2 از طریق گاز هلیوم فراهم و با خارج کردن گاز توسط پمپ قطع می‌شود. جمعیت زیرترزهای مغناطیسی فقط تابعی از $\mu B/k_B T$ ، و در نتیجه از B/T است. آنتروپی دستگاه اسپینی فقط تابعی از توزیع جمعیت است؛ بنابراین آنتروپی اسپینی فقط تابعی از B/T است. اگر B_{Δ} میدان مؤثر مربوط به برهم‌کنشهای موضعی باشد، دمای نهایی T_2 که در آزمایش وامغناطش بی‌دررو به دست می‌آید برابر است با

$$T_2 = T_1 (B_{\Delta}/B) \quad (41)$$

که در آن B میدان اولیه و T_1 دمای اولیه است.

وامغناطیدگی هسته‌ای

از آنجا که گشتاورهای مغناطیسی هسته‌ای ضعیف‌اند، برهم‌کنشهای مغناطیسی هسته‌ای از برهم‌کنشهای الکترونی مشابه خیلی ضعیف‌ترند. انتظار می‌رود که با پارامغناطیس هسته‌ای به دمایی که 10^5 بار پایینتر از دمای حاصل از پارامغناطیس الکترونی است برسیم—در آزمایش سرمایش اسپینی هسته‌ای، دمای اولیه T_1 مرحله هسته‌ای باید از دمای اولیه در آزمایش سرمایش اسپینی الکترونی پایینتر باشد. اگر از



شکل ۹. وامغناطیدگی هسته‌های مس در فلز، که از ۱۲K^o و میدانهای گوناگون آغاز شده است.

مغناطیدگی بالغ بر ۱۰ درصد بیشینه آنتروپی اسپینی خواهد بود. این کاهش برای تحت‌الشعاع قراردادن شبکه کافی است و از رابطه (۴۱) دمای نهایی $T_2 \approx 10^{-7} K$ برآورد می‌شود. اولین آزمایش سرمایش هسته‌ای روی هسته‌های Cu در این فلز انجام گرفت. اولین مرحله در دمایی در حدود ۲K^o آغاز شد، که با سردکردن الکترونی حاصل شده بود. پایینترین دمایی که به دست آمد $10^{-6} K \times 1.2$ بود. نتایج شکل ۹ با خطی به صورت رابطه (۴۱): $T_2 = T_1(31/B)$ برازش می‌کند، که در آن B برحسب گاوس است، بنابراین $B_{\Delta} \cdot B_{\Delta} = 31 G$ میدان برهم‌کنش مؤثر گشاورهای مغناطیسی هسته‌های مس است. انگیزه کاربرد هسته‌ها در فلز این است که الکترونیهای رسانش تماس گرمایی سریعی را بین شبکه و هسته‌ها در دمای مرحله نخست تضمین می‌کند.

پذیرفتاری پارامغناطیسی الکترونیهای رسانش

کوشش ما بر این است که نشان دهیم چگونه می‌توان بر مبنای این آمارها واقعیت دیامغناطیس‌بودن یا فقط پارامغناطیس‌بودن ضعیف بسیاری از فلزات را با وجود گشاور مغناطیسی الکترونها توضیح داد.

و. پاؤلی، ۱۹۲۷

نظریه کلاسیک الکترون آزاد، پذیرفتاری پارامغناطیسی الکترونیهای رسانش را به گونه رضایت‌بخش توجیه نمی‌کند. به الکترون گشاور مغناطیسی برابر با یک مگنتون بور، μ_B ، وابسته است. می‌توان

انتظار داشت که الکترونهاى رسانش یک سهم پارامغناطیسی از نوع کوری معادله (۲۲) در مغناطیدگی فلز داشته باشند: $M = N\mu_B^2 B/k_B T$. ولی مشاهده شده است که مغناطیدگی بیشتر فلزات غیر فرومغناطیسی عادى مستقل از دماست.

پاؤلى نشان داد که کاربرد توزیع فرمى-دیراک (فصل ۶) این نظریه را آن طور که لازم است تصحیح می کند. نخست این وضعیت را به طور کیفی توجیه می کنیم. نتیجه (۱۸) بیانگر این است که احتمال اینکه اتمی به موازات میدان B به صف درآید تقریباً به اندازه $\mu_B/k_B T$ از احتمال جهتگیری پادموازی آن بیشتر است. برای N اتم در واحد حجم، این مقدار یک مغناطیدگی کل در حدود $N\mu_B^2 B/k_B T \approx$ ارائه می دهد، که همان نتیجه استاندارد است.

ولی، اکثر الکترونهاى رسانش در فلز، هنگامی که میدان اعمال می شود، امکان وارون شدن ندارند. زیرا، بیشتر اوربیتالهای موجود در دریای فرمى که دارای اسپین موازی اند قبلاً اشغال شده اند. فقط الکترونهاىی که در بالای توزیع فرمى در گستره $k_B T$ قرار دارند شانس وارونه شدن در این میدان را دارند؛ بدین ترتیب فقط کسر T/T_F از تعداد کل الکترونها در پذیرفتاری شرکت می جویند. بنابراین

$$M \approx \frac{N\mu_B^2 B}{k_B T} \cdot \frac{T}{T_F} = \frac{N\mu_B^2}{k_B T_F} B \quad (42)$$

که مستقل از دما و از مرتبه بزرگی مغناطیدگی مشاهده شده است.

اکنون عبارت مربوط به پذیرفتاری پارامغناطیسی گاز الکترون آزاد را در $T \ll T_F$ محاسبه می کنیم. روش محاسبه پیشنهاد شده در شکل ۱۰ را دنبال می کنیم. روش دیگر برای به دست آوردن پذیرفتاری پارامغناطیسی موضوع مسئله ۵ است.

غلظت الکترونهاىی که گشتاور مغناطیسی آنها موازی با میدان مغناطیسی است برابر است با

$$N_+ = \frac{1}{V} \int_{-\mu_B}^{\epsilon_F} d\epsilon D(\epsilon + \mu_B) \cong \frac{1}{V} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon D(\epsilon) + \frac{1}{V} \mu_B D(\epsilon_F) \quad (43)$$

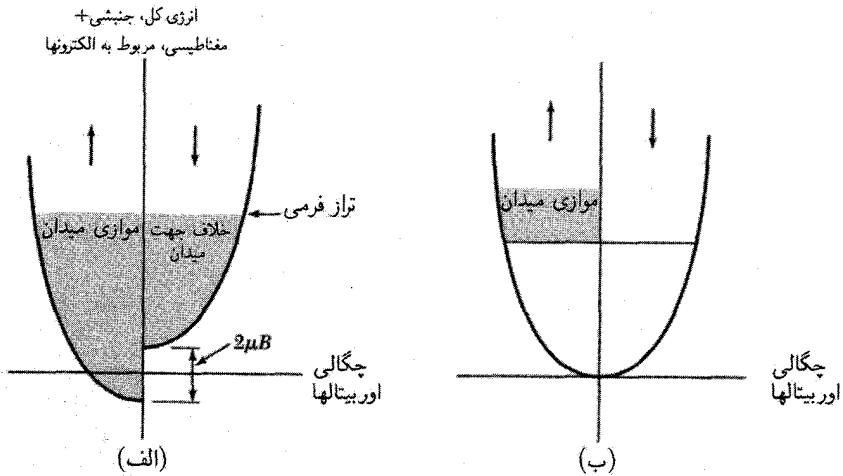
که در صفر مطلق نوشته شده است. در اینجا $\frac{1}{V} D(\epsilon + \mu_B)$ چگالی اوربیتالهایی است که دارای یک جهت اسپینی اند. این چگالی با انتقال انرژی به اندازه $-\mu_B$ به طرف پایین به دست آمده است. این تقریب برای $k_B T \ll \epsilon_F$ نوشته شده است.

غلظت الکترونهاىی که گشتاور مغناطیسی آنها با میدان مغناطیسی پادموازی است برابر است با

$$N_- = \frac{1}{V} \int_{\mu_B}^{\epsilon_F} d\epsilon D(\epsilon - \mu_B) \cong \frac{1}{V} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon D(\epsilon) - \frac{1}{V} \mu_B D(\epsilon_F) \quad (44)$$

مغناطیدگی با $M = \mu(N_+ - N_-)$ داده می شود، در نتیجه با استفاده از

$$D(\epsilon_F) = \frac{3N}{2\epsilon_F} = \frac{3N}{2k_B T_F}$$



شکل ۱۰. پارامغناطیس پاولی در صفر مطلق؛ اوربیتالها در نواحی سایه‌دار در (الف) اشغال شده‌اند. تعداد الکترونها در نوارهای «بالا» و «پایین» به‌گونه‌ای تنظیم می‌شوند که انرژیها در تراز فرمی برابر شوند. پتانسیل شیمیایی (تراز فرمی) الکترونها با اسپین بالا برابر است با پتانسیل شیمیایی الکترونها با اسپین پایین. در (ب) فزونی الکترونها با اسپین بالا را در میدان مغناطیسی نشان داده‌ایم.

از فصل ۶، داریم

$$M = \mu^{\uparrow} D(\epsilon_F) B = \frac{3N\mu^{\uparrow}}{2k_B T_F} B \quad (45)$$

نتیجه (۴۵) مغناطیدگی اسپینی پاولی الکترونها رسانش را ارائه می‌دهد.

در دستیابی به پذیرفتاری پارامغناطیسی فرض کرده‌ایم که حرکت فضایی الکترونها تحت تأثیر میدان مغناطیسی قرار نمی‌گیرد. ولی میدان مغناطیسی توابع موج را تغییر می‌دهد؛ لاندائو نشان داده است که برای الکترونها آزاد این امر باعث ایجاد گشتاور دیامغناطیسی می‌شود که برابر با $\frac{1}{3}$ - گشتاور پارامغناطیسی است. بدین ترتیب مغناطیدگی کل گاز الکترون آزاد برابر است با

$$M = \frac{N\mu_B^{\uparrow}}{k_B T_F} B \quad (46)$$

قبل از مقایسه رابطه (۴۶) با آزمایش، باید خاصیت دیامغناطیسی مغزهای یونی، آثار نواری، و برهم‌کنشهای الکترون-الکترون را به حساب آورد. در سدیم اثر این برهم‌کنشها، پذیرفتاری اسپینی را شاید تا ۷۵ درصد افزایش می‌دهد.

پذیرفتاری مغناطیسی در اغلب فلزات واسط (با پوسته‌های الکترونی داخل پر نشده) به مراتب بیشتر از فلزات قلیایی است. این مقادیر بزرگ حاکی از آن‌اند که چگالی اوربیتالها برای فلزات واسط به‌طور

غیرعادی بالاست، و این امر به اندازه‌گیریهای ظرفیت گرمایی الکترونی توافقی دارد. در فصل ۹ دیدیم که چگونه چنین نتیجه‌ای از نظریهٔ نواری ناشی می‌شود.

چکیده

(در دستگاه CGS)

- پذیرفتاری دیامغناطیسی N اتم با عدد اتمی Z برابر است با $\chi = -Ze^2 N \langle r^2 \rangle / 6mc^2$ که در آن $\langle r^2 \rangle$ میانگین مربع شعاع اتم است. (لاتزون)
- اتمهایی که دارای گشتاور مغناطیسی دائمی μ هستند، به‌ازای $\mu B \ll k_B T$ پذیرفتاری پارامغناطیسی $\chi = N\mu^2 / 3k_B T$ (کوری-لاتزون) را دارند.
- برای دستگاهی با اسپینهای $\frac{1}{2}$ ، $S = \frac{1}{2} N \mu \tanh(\mu B / k_B T)$ مغناطیدگی دقیق برابر است با $M = N \mu \tanh(\mu B / k_B T)$ که در آن $\mu = \frac{1}{2} g \mu_B$ است. (بریلوئن)
- در حالت پایهٔ الکترونیایی که در یک پوسته هستند، S دارای بیشترین مقداری است که اصل پاولی اجازه می‌دهد و L بیشترین مقدار سازگار با این S را دارد. در صورتی که پوسته بیشتر از نصف پر باشد، مقدار J برابر با $L + S$ و اگر پوسته کمتر از نصف پر باشد، J برابر با $|L - S|$ است.
- در فرایند سرمایش از وامغناطش نمک پارامغناطیسی در آنتروپی ثابت استفاده می‌شود. دمای نهایی به‌دست‌آمده از مرتبهٔ اولیه $(B_\Delta / B) T$ است که در آن B_Δ میدان موضعی مؤثر و B میدان مغناطیسی اعمال‌شدهٔ اولیه است.
- پذیرفتاری پارامغناطیسی گاز فرمی الکترونی رسانش برابر است با $\chi = 3N\mu^2 / 2\epsilon_F$ که برای $k_B T \ll \epsilon_F$ مستقل از دماست. (پاولی)

مسائل

۱. پذیرفتاری دیامغناطیسی هیدروژن اتمی. تابع موج اتم هیدروژن در حالت پایه ($1s$) به‌صورت $a_0 = \hbar^2 / me^2 = 0.529 \times 10^{-8} \text{ cm}$ است، که در آن $\psi = (\pi a_0^3)^{-1/2} \exp(-r/a_0)$ چگالی بار، برطبق تعبیر آماری تابع موج، برابر است با $\rho(x, y, z) = -e|\psi|^2$. نشان دهید که برای این حالت $\langle r^2 \rangle = 3a_0^2$ و پذیرفتاری دیامغناطیسی مولی هیدروژن اتمی را محاسبه کنید. ($-2.36 \times 10^{-6} \text{ cm}^3 / \text{mole}$).
۲. (قواعد هوند). قواعد هوند را به‌کار برید تا حالت پایهٔ (تراز اصلی در نمادگذاری جدول ۱) (الف) Eu^{++} ، با پیکربندی $4f^7 5s^2 p^2$ ؛ (ب) Yb^{3+} ؛ و (ج) Tb^{3+} را به‌دست آورید. نتایج (ب) و (ج)

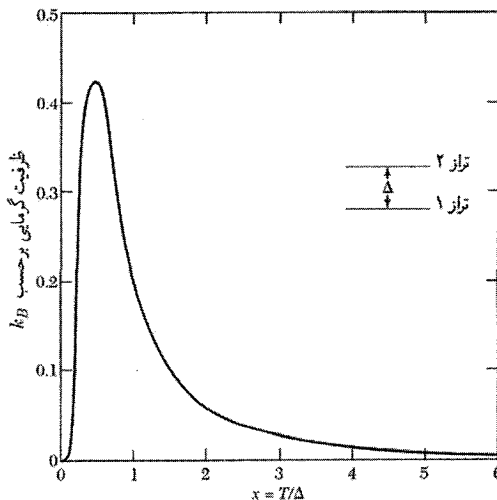
در جدول ۱ داده شده‌اند، ولی باید مراحل متفاوت در استفاده از این قواعد را به‌طور جداگانه ارائه دهید.

۳. **حالت‌های برانگیخته سه‌گانه.** بعضی از مولکول‌های آلی دارای یک حالت برانگیخته سه‌گانه ($S = 1$) در انرژی $k_B \Delta$ بالای حالت پایه یگانه ($S = 0$) اند. (الف) عبارتی برای گشتاور مغناطیسی $\langle \mu \rangle$ در یک میدان B به‌دست آورید. (ب) نشان دهید که پذیرفتاری برای $\Delta \gg T$ تقریباً مستقل از Δ است. (ج) به کمک نمودار ترازهای انرژی برحسب میدان و ترسیم تقریبی آنتروپی برحسب میدان، شرح دهید که چگونه می‌توان این دستگاه را به‌وسیله مغناطش (و نه وامغناطش) بی‌دررو سرد کرد.

۴. **ظرفیت گرمایی ناشی از درجات آزادی داخلی.** (الف) یک دستگاه دوترازی را با شکافتگی انرژی $k_B \Delta$ بین حالت‌های بالایی و پایینی در نظر بگیرید؛ این شکافتگی ممکن است از میدان مغناطیسی یا راه‌های دیگر ناشی شود. نشان دهید که ظرفیت گرمایی این دستگاه برابر است با:

$$C = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{\Delta} = k_B \frac{(\Delta/T)^2 e^{\Delta/T}}{(1 + e^{\Delta/T})^2}$$

این تابع در شکل ۱۱ ترسیم شده است، قله‌هایی از این نوع را در ظرفیت گرمایی غالباً نابهنجاریهای شوتکی می‌نامند. بیشینه ظرفیت گرمایی کاملاً بزرگ است، ولی برای $T \ll \Delta$ و $T \gg \Delta$ ظرفیت



شکل ۱۱. ظرفیت گرمایی یک دستگاه دوترازی به‌صورت تابعی از T/Δ ، که در آن Δ شکافتگی تراز است. نابهنجاری شوتکی وسیله بسیار مفیدی است برای تعیین شکافتگیهای تراز انرژی یونها در آلایزها، ترکیبات، و فلزات گروه واسط و خاکی کمیاب.

گرمایی کوچک است. (ب) نشان دهید که برای $T \gg \Delta$ داریم $C \cong k_B(\Delta/2T)^2 + \dots$. برهم‌کشش فوق ریز بین گشتاورهای مغناطیسی الکترونی و هسته‌ای در نمکهای پارامغناطیسی (و در دستگانهایی که دارای نظم اسپینی الکترونی‌اند) باعث شکافتگیهایی با Δ در حدود ۱ تا 10^5 میلی‌کلون می‌شود. این شکافتگیها غالباً به‌گونهٔ تجربی با حضور جمله‌ای برحسب $1/T^2$ در ظرفیت گرمایی، در ناحیهٔ $T \gg \Delta$ آشکار می‌شوند. برهم‌کنشهای چهارقطبی الکتریکی هسته‌ای با میدانهای بلوری، مانند شکل ۱۲، نیز باعث شکافتگیهایی می‌شوند.

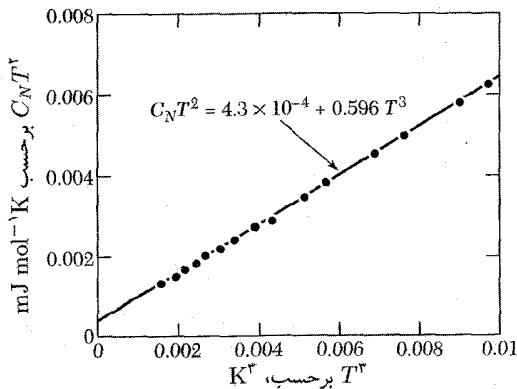
۵. پذیرفتاری اسپینی پاؤلی. پذیرفتاری اسپینی گاز الکترون رسانش را در صفر مطلق می‌توان به روش دیگری بیان کرد. فرض کنید

$$N^+ = \frac{1}{2}N(1 + \zeta); \quad N^- = \frac{1}{2}N(1 - \zeta)$$

غلظتهای الکترونها با اسپین بالا و پایین باشند. (الف) نشان دهید که در میدان مغناطیسی B انرژی کل نوار با اسپین بالا در گاز الکترون آزاد برابر است با

$$E^+ = E_0(1 + \zeta)^{5/2} - \frac{1}{2}N\mu B(1 + \zeta)$$

که در آن E_0 برحسب انرژی فرمی ϵ_F در میدان مغناطیسی صفر برابر است با $E_0 = \frac{2}{3}N\epsilon_F$. عبارت مشابهی برای E^- به دست آورید. (ب) $E = E^+ + E^-$ را نسبت به ζ کمینه کنید و مقدار تعادلی ζ را با تقریب $1 \ll \zeta$ به دست آورید. عملیات را ادامه دهید، و نشان دهید که مغناطیدگی برابر است با $M = 3N\mu^2 B / 2\epsilon_F$ که با معادلهٔ (۴۵) سازگار است.



شکل ۱۲. ظرفیت گرمایی حالت عادی گالیم در $20^\circ\text{K} < T$. در دماهای بسیار پایین سهم چهارقطبی هسته‌ای ($C \propto T^{-2}$) و سهم الکترونها رسانش ($C \propto T$) در ظرفیت گرمایی نقش عمده ایفا می‌کنند.

۶. خاصیت فرومغناطیسی الکترونیهای رسانش. فرض کنید که الکترونیهای با اسپین موازی با انرژی با $-V$ ، که V مثبت است، با یکدیگر برهم‌کنش می‌کنند، و الکترونیهای با اسپین پادموازی با یکدیگر برهم‌کنش نمی‌کنند، بدین ترتیب می‌توان اثر برهم‌کنشهای تبادلی میان الکترونیهای رسانش را با تقریب در نظر گرفت. (الف) با استفاده از مسئله ۵ نشان دهید که انرژی کل نوار با اسپین بالا برابر است با

$$E^+ = E_0 (1 + \zeta)^{5/2} - \frac{1}{8} V N^2 (1 + \zeta)^2 - \frac{1}{4} N \mu B (1 + \zeta)$$

عبارت مشابهی برای E^- به دست آورید. (ب) انرژی کل را کمینه کنید و مقدار ζ را در حد $\zeta \ll 1$ به دست آورید. نشان دهید که مغناطیدگی برابر است با

$$M = \frac{3 N \mu^2}{2 \epsilon_F - \frac{3}{4} V N} B$$

در نتیجه، برهم‌کنش تبادلی پذیرفتاری را زیاد می‌کند. (ج) نشان دهید که با $B = 0$ ، هنگامی که $V > 4 \epsilon_F / 3 N$ ، انرژی کل در $\zeta = 0$ ناپایدار است. اگر چنین امری برآورده شود، انرژی حالت فرومغناطیس ($\zeta \neq 0$) پایبندتر از انرژی حالت پارامغناطیسی خواهد بود. به دلیل فرض $\zeta \ll 1$ ، این یک شرط کافی برای خاصیت فرومغناطیسی است، ولی ممکن است شرط لازم نباشد. این شرط را شرط استونرگویند. ۷. دستگاه دوترازی. نتیجه مسئله ۴ غالباً به صورت دیگری دیده می‌شود. (الف) اگر دو تراز انرژی در Δ و $-\Delta$ باشند، نشان دهید که انرژی و ظرفیت گرمایی عبارت‌اند از

$$U = -\Delta \tanh(\Delta/k_B T); \quad C = k_B (\Delta/k_B T)^2 \operatorname{sech}^2(\Delta/k_B T)$$

(ب) اگر دستگاه دارای ترکیب کاتوره‌ای باشد، به طوری که تمام مقادیر Δ تا یک حد Δ دارای احتمال یکسان باشند، نشان دهید که ظرفیت گرمایی، در صورتی که $k_B T \ll \Delta$ ، به طور خطی متناسب با دماست. این نتیجه را مارشال^۱ در مورد ظرفیت گرمایی آلیاژهای رقیق مغناطیسی در مجله Phys. Rev. (1960) 1519, 118، به کار برده است. در نظریه شیشه‌ها نیز از این نتیجه استفاده می‌شود.

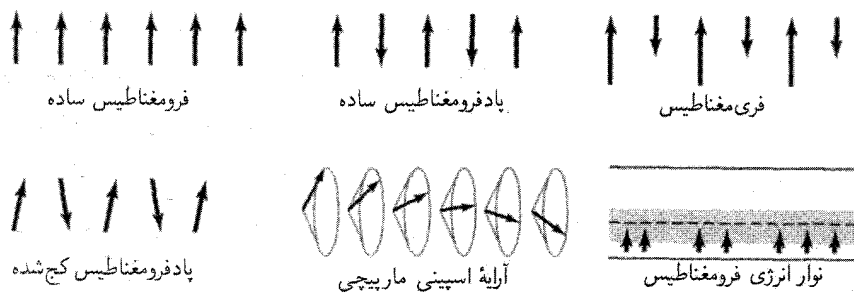
۸. خاصیت پارامغناطیسی دستگاهی با $S = 1/2$. (الف) برای دستگاهی از اسپینها با $S = 1/2$ ، گشتاور μ و غلظت n ، مغناطیدگی را به صورت تابعی از میدان مغناطیسی و دما به دست آورید. (ب) نشان دهید که در حد $k_B T \ll \mu B$ ، این نتیجه به صورت $M \cong (2 n \mu^2 / 3 k_B T) B$ است.

فرومغناطیس و پادفرومغناطیس^۱

نظم فرومغناطیسی

فرومغناطیس گشتاور مغناطیسی خودبه‌خودی دارد، یعنی حتی در میدان مغناطیسی اعمال‌شدهٔ صفر نیز دارای گشتاور مغناطیسی است. وجود گشتاور خودبه‌خودی بیانگر آن است که گشتاورهای مغناطیسی و اسپین الکترونها به گونهٔ منظمی آرایش یافته‌اند. نیازی نیست که این نظم ساده باشد؛ همهٔ آرایشهای اسپینی که در شکل ۱ رسم شده‌اند، بجز پادفرومغناطیس ساده یک گشتاور مغناطیسی خودبه‌خودی دارند، که گشتاور اشباعی خوانده می‌شود.

۱. نمادگذاری: (CGS) $B = H + 4\pi M$ (SI) $B = \mu_0(H + M)$ B_a را در هر دو دستگاه واحدها، میدان مغناطیسی اعمال‌شده می‌نامیم: در CGS داریم $B_a = H_a$ و در SI، $B_a = \mu_0 H_a$. پذیرفتاری در CGS $\chi = M/B_a$ و در SI $\chi = M/H_a = \mu_0 M/B_a$ یک تسلا = 10^4 گاوس.



شکل ۱. آرایشهای منظم اسپین الکترونها.

نقطه کوری و انتقال تبادل

پارامغناطیسی را با غلظت N یون با اسپین S در نظر بگیرید. با یک برهم‌کنش داخلی که گشتاورهای مغناطیسی را موازی می‌کند، یک فرومغناطیس خواهیم داشت. این اصل را فرض می‌کنیم که چنین برهم‌کنشی وجود دارد و آن را میدان تبدالی^۱ می‌خوانیم. آشفته‌گی گرمایی با اثر سمت‌دهی میدان تبدالی مقابله می‌کند، و در دماهای بالا نظم اسپینی برهم می‌خورد.

میدان تبدالی را با میدان مغناطیسی B_E معادل در نظر می‌گیریم. میدان تبدالی ممکن است به بزرگی 10^3 (۱۰۳ تسلا) باشد. فرض می‌کنیم که B_E متناسب با مغناطیدگی M باشد.

مغناطیدگی به صورت گشتاور مغناطیسی در واحد حجم تعریف می‌شود؛ بجز در مواردی که تصریح شده باشد، منظور از مغناطیدگی، مقداری در تعادل گرمایی در دمای T است. اگر حوزه‌ها (ناحیه‌هایی که در جهت‌های مختلف مغناطیسی شده‌اند) وجود داشته باشند، مغناطیدگی به مقدار درون یک حوزه مربوط می‌شود. در تقریب میدان میانگین فرض می‌کنیم که هر اتم مغناطیسی، میدانی متناسب با مغناطیدگی را

تجربه می‌کند

$$B_E = \lambda M \quad (1)$$

که در آن λ ثابتی مستقل از دماست. بنابر رابطه (۱)، هر اسپین مغناطیدگی میانگین همه اسپینهای دیگر را می‌بیند. در واقع، هر اسپین تنها ممکن است همسایه‌های اول را ببیند، ولی این ساده‌سازی برای بررسی اولیه مسئله خوب است.

۱. این میدان را میدان مولکولی یا به افتخار پیر وایس، نخستین کسی که چنین میدانی را تصور کرد، میدان وایس نیز می‌نامند. میدان تبدالی B_E ، در عبارتهای مربوط به انرژی $-\mu \cdot B_E$ و گشتاور $\mu \times B_E$ وارد برگشتاور مغناطیسی μ ، مشابه میدان مغناطیسی واقعی عمل می‌کند، ولی B_E واقعاً میدان مغناطیسی نیست و از این رو در معادلات ماکسول وارد نمی‌شود؛ برای مثال، هیچ چگالی جریان \mathbf{j} از طریق رابطه $\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{j}/c$ به B_E مربوط نمی‌شود. بزرگی B_E به طور نوعی 10^4 بار بزرگتر از میدان مغناطیسی متوسط ناشی از دوقطبه‌های مغناطیسی فرومغناطیس است.

دمای کوری T_c دمایی است که بالاتر از آن، مغناطیدگی خودبه‌خودی از بین می‌رود؛ این دما فاز نامنظم پارامغناطیسی در $T > T_c$ را از فاز منظم فرومغناطیسی در $T < T_c$ جدا می‌سازد. می‌توانیم T_c را برحسب ثابت λ در (۱) به‌دست آوریم.

فاز پارامغناطیسی را در نظر بگیرید: میدان اعمال‌شده B_a باعث مغناطیدگی متناهی می‌شود، و آن به نوبه خود میدان تبادلی متناهی B_E را به‌وجود می‌آورد. اگر χ پذیرفتاری پارامغناطیسی باشد، داریم

$$(CGS) \quad M = \chi_p(B_a + B_E); \quad \boxed{(SI) \quad \mu_0 M = \chi_p(B_a + B_E)} \quad (2)$$

تتها در صورتی که به‌خط‌شدگی نسبی کوچک باشد، مغناطیدگی برابر با پذیرفتاری ثابت ضرب‌در میدان خواهد بود: در اینجاست که این فرض که نمونه در فاز پارامغناطیسی است وارد می‌شود.

پذیرفتاری پارامغناطیسی (فصل ۱۱) با قانون کوری $\chi_p = C/T$ معین می‌شود که در آن C ثابت کوری است. رابطه (۱) را در معادله (۲) جانشین می‌کنیم، به‌دست می‌آوریم $MT = C(B_a + \lambda M)$

$$(CGS) \quad \chi = \frac{M}{B_a} = \frac{C}{(T - C\lambda)} \quad (3)$$

پذیرفتاری (۳) دارای یک تکیه در $T = C\lambda$ است. در این دما (و پایینتر از آن) مغناطیدگی خودبه‌خودی وجود دارد، زیرا اگر χ بینهایت باشد، می‌توانیم برای B_a صفر، یک M متناهی داشته باشیم. از رابطه (۳) قانون کوری-وایس به‌دست می‌آید،

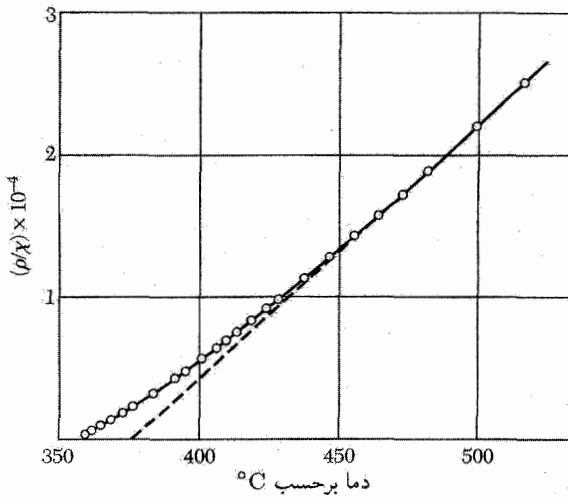
$$(CGS) \quad \chi = \frac{C}{T - T_c}; \quad T_c = C\lambda \quad (4)$$

این عبارت، تغییر مشاهده‌شده در پذیرفتاری را در ناحیه پارامغناطیسی بالای دمای کوری به‌گونه نسبتاً مطلوبی توصیف می‌کند. وارونه پذیرفتاری نیکل در شکل ۲ رسم شده است.

از رابطه (۴) و از تعریف ثابت کوری در رابطه (۲۲) فصل ۱۱ می‌توانیم مقدار ثابت میدان میانگین λ در رابطه (۱) را تعیین کنیم

$$(CGS) \quad \lambda = \frac{T_c}{C} = \frac{3k_B T_c}{Ng^2 S(S+1)\mu_B^2} \quad (5)$$

برای آهن $T_c \approx 1000\text{K}$ ، $g \approx 2$ ، و $S \approx 1$ ؛ از (۵) داریم $\lambda \approx 5000$. با $M_s \approx 1700$ داریم $10^3\text{T} = 10^7\text{G} \approx 10^2\text{G} \approx (5000)(1700) \approx B_E \approx \lambda M$. میدان تبادلی در آهن بسیار قویتر از میدان مغناطیسی واقعی ناشی از دیگر یونهای مغناطیسی بلور است: یون مغناطیسی میدانی در حدود μ_B/a^3 یا تقریباً $1\text{T} = 10^4\text{G}$ ، در یک نقطه شبکه‌ای همسایه ایجاد می‌کند.



شکل ۲. وارونه پذیرفتاری به‌ازای یک گرم نیکل در نزدیکی دمای کوری (358°C). چگالی برابر با ρ است. خط چین، برونیایی خطی از دماهای بالاست.

میدان تبادلی، یک نمایش تقریبی برای برهم‌کنش تبادلی مکانیک کوانتومی فراهم می‌کند. در کتابهای نظریه کوانتومی، با فرضیات معینی نشان داده می‌شود که انرژی برهم‌کنش بین اتمهای i و j که اسپینهای S_i و S_j دارند، حاوی جمله‌ای به صورت زیر است

$$U = -2JS_i \cdot S_j \quad (۶)$$

که در آن J انتگرال تبادل است و به همپوشانی توزیع بار اتمهای i و j مربوط می‌شود. معادله (۶) مدل هایزنبرگ نامیده می‌شود.

توزیع بار در دستگاه دواسپینی به موازی یا پادموازی بودن اسپینها بستگی دارد،^۱ زیرا بنا بر اصل طرد پاؤلی دو الکترون با اسپین همانند نمی‌توانند به‌طور همزمان در یک مکان حضور داشته باشند. این امر به دو الکترون با اسپینهای مخالف مربوط نمی‌شود. به این ترتیب انرژی الکتروستاتیکی دستگاه به سمتگیری نسبی اسپینها بستگی پیدا می‌کند: این اختلاف در انرژی، اثری تبادل را تعریف می‌کند.

انرژی تبادل دو الکترون را می‌توان مانند رابطه (۶) به صورت $-2JS_1 \cdot S_2$ نوشت، گویی یک

۱. اگر اسپینها پادموازی باشند، توابع موج دو الکترون باید مانند ترکیب $u(\mathbf{r}_1)v(\mathbf{r}_2) + u(\mathbf{r}_2)v(\mathbf{r}_1)$ متقارن باشند. اگر دو اسپین موازی باشند، اصل طرد پاؤلی ایجاب می‌کند که بخش مداری تابع موج، مانند $u(\mathbf{r}_1)v(\mathbf{r}_2) - u(\mathbf{r}_2)v(\mathbf{r}_1)$ پادمقارن باشد، زیرا در اینجا اگر جای مختصات \mathbf{r}_1 و \mathbf{r}_2 را تعویض کنیم، تابع موج تغییر علامت می‌دهد. اگر مکانها را مساوی بگیریم به‌طوری که $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ ، آنگاه تابع پادمقارن صفر می‌شود: برای اسپینهای موازی احتمال یافتن دو الکترون در یک مکان صفر است.

جفت‌شدگی مستقیم بین جهت‌های دو اسپین وجود دارد. در فرومغناطیس، برای بسیاری از مقاصد، می‌توان اسپین‌ها را با تقریب خوب، مانند بردارهای تکانه زاویه‌ای کلاسیکی در نظر گرفت. بین انتگرال تبادل J و دمای کوری T_c می‌توانیم ارتباطی تقریبی برقرار کنیم. فرض کنید اتم موردنظر دارای z همسایه اول باشد، که هریک با برهم‌کنش J با اتم مرکزی در ارتباط باشند. J را برای همسایگان دورتر برابر صفر می‌گیریم. نتیجه حاصل از نظریه میدان میانگین عبارت است از

$$J = \frac{3k_B T_c}{2zS(S+1)} \quad (7)$$

نتایج حاصل از تقریب‌های آماری بهتر تا حدودی متفاوت است. راش‌بروک^۱ و وود برای $k_B T_c / zJ$ ساختارهای sc، bcc، و fcc با $S = \frac{1}{2}$ ، به ترتیب مقادیر ۰٫۲۸، ۰٫۳۲۵، و ۰٫۳۴۶ را به دست آورده‌اند. استفاده از (۷) برای هر سه ساختار ۰٫۵۰ به دست می‌آید. اگر مدل هایزنبرگ آهن را با $S = 1$ نمایش دهد، آنگاه دمای کوری مشاهده‌شده متناظر با $J = 11.9 \text{ meV}$ خواهد بود.

وابستگی دمایی مغناطیدگی اشباعی

تقریب میدان میانگین را می‌توانیم زیر دمای کوری نیز برای یافتن مغناطیدگی به صورت تابعی از دما به کار ببریم. مانند قبل عمل می‌کنیم، ولی به جای قانون کوری از عبارت کامل بریلوئن برای مغناطیدگی استفاده می‌کنیم. برای اسپین $\frac{1}{2}$ این رابطه عبارت است از $M = N\mu \tanh(\mu B / k_B T)$. اگر میدان مغناطیسی اعمال شده را حذف کنیم و به جای B میدان مولکولی $B_E = \lambda M$ را قرار دهیم، آنگاه

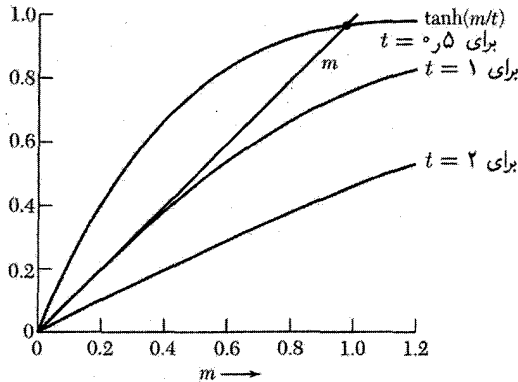
$$M = N\mu \tanh(\mu \lambda M / k_B T) \quad (8)$$

خواهیم دید که در گستره دمایی بین 0° و T_c برای این معادله پاسخهایی با M غیرصفر وجود دارد. برای حل رابطه (۸) آن را برحسب مغناطیدگی کاهیده $m \equiv M / N\mu$ و دمای کاهیده $t = k_B T / N\mu^2 \lambda$ می‌نویسیم، در نتیجه

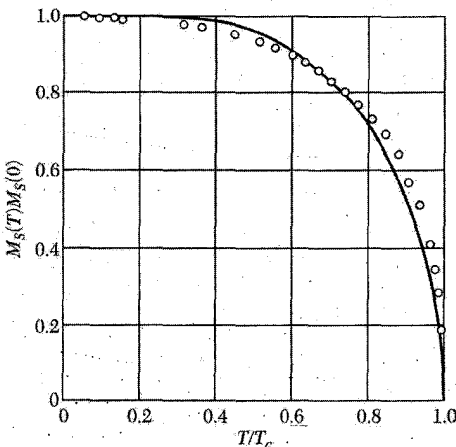
$$m = \tanh(m/t) \quad (9)$$

سپس طرف‌های راست و چپ این معادله را جداگانه به صورت تابعهایی از m ، مانند شکل ۳، رسم می‌کنیم. محل برخورد دو منحنی مقدار m را در دمای موردنظر می‌دهد. دمای بحرانی برابر است با $t = 1$ یا $T_c = N\mu^2 \lambda / k_B$.

منحنیهای M برحسب T که با این روش به دست می‌آیند، همان‌گونه که در شکل ۴ برای نیکل نشان داده شده‌اند، خصلتهای نتایج تجربی را به طور تقریبی به دست می‌دهند. با افزایش T ، مغناطیدگی به طور



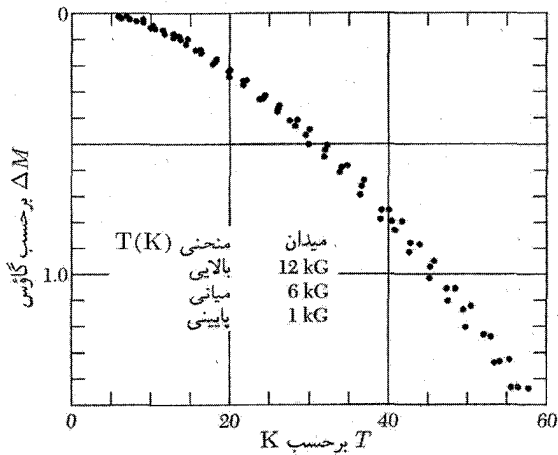
شکل ۳. پاسخ نموداری معادله (۹) برای مغناطیدگی کاهیده m به صورت تابعی از دما. مغناطیدگی کاهیده به صورت $m = M/N\mu$ تعریف می‌شود. طرف چپ معادله (۹) به صورت خط مستقیم با شیب واحد رسم شده است. طرف راست $\tanh(m/t)$ است و بر حسب m برای سه مقدار متفاوت دمای کاهیده $t = k_B T/N\mu \lambda = T/T_c$ رسم شده است. این سه منحنی متناظرند با دماهای $2T_c$ ، T_c و $0.5T_c$. منحنی مربوط به $t = 2$ خط مستقیم m را، همان‌گونه که برای ناحیه پارامغناطیسی مناسب است، (میدان مغناطیسی اعمال شده خارجی وجود ندارد) تنها در $m = 0$ قطع می‌کند. منحنی $t = 1$ (یا $T = T_c$) در مبدأ بر خط مستقیم m مناس است؛ این دما شروع فرومغناطیس را مشخص می‌کند. منحنی مربوط به $t = 0.5$ در ناحیه فرومغناطیسی است و خط مستقیم m را در حدود $m = 0.94 N\mu$ قطع می‌کند. وقتی $t \rightarrow 0$ ، محل برخورد به طرف $m = 1$ پیش می‌رود، به گونه‌ای که در صفر مطلق تمام گشتاورهای مغناطیسی به خط می‌شوند.



شکل ۴. مغناطیدگی اشباعی نیکل به صورت تابعی از دما، همراه با منحنی نظری برای $S = \frac{1}{2}$ بر طبق نظریه میدان میانگین.

هموار کاهش می‌یابد و در $T = T_c$ به صفر می‌رسد. این رفتار نشان می‌دهد که گذار فرومغناطیس به پارامغناطیس گذار مرتبه دوم است.

نظریه میدان میانگین توصیف خوبی برای تغییرات M در دماهای پایین ارائه نمی‌دهد. شناسه \tanh



شکل ۵. کاهش مغناطیدگی نیکل با دما. در این نمودار، در ۲۴K، $\Delta M \cong 0$.

در رابطه (۹) برای $T \ll T_c$ بزرگ است، و داریم

$$\tanh \xi \cong 1 - 2e^{-2\xi} \dots$$

انحراف مغناطیدگی $\Delta M = M(0) - M(T)$ در پایینترین مرتبه برابر است با

$$\Delta M \cong 2N\mu \exp(-2\lambda N\mu^2/k_B T) \quad (10)$$

شناسه تابع نمایی برابر است با $-2T_c/T$. برای $T = 0.1T_c$ داریم $\Delta M/N\mu \cong 4 \times 10^{-9}$. نتایج تجربی نشان می‌دهند که در دماهای پایین وابستگی ΔM به دما بسیار سریعتر است. در $T = 0.1T_c$ با استفاده از داده‌های شکل ۵ داریم $\Delta M/M \cong 2 \times 10^{-3}$. تجربه نشان می‌دهد که جمله برتر در ΔM به شکل زیر است

$$\Delta M/M(0) = AT^{3/2} \quad (11)$$

که در آن ثابت A دارای مقدار تجربی $(7.5 \pm 0.2) \times 10^{-6} \text{ deg}^{-3/2}$ و N_i و $(3.4 \pm 0.2) \times 10^{-6} \text{ deg}^{-3/2}$ برای Fe است. نتیجه (۱۱) در نظریه موج اسپینی یک توجیه طبیعی دارد.

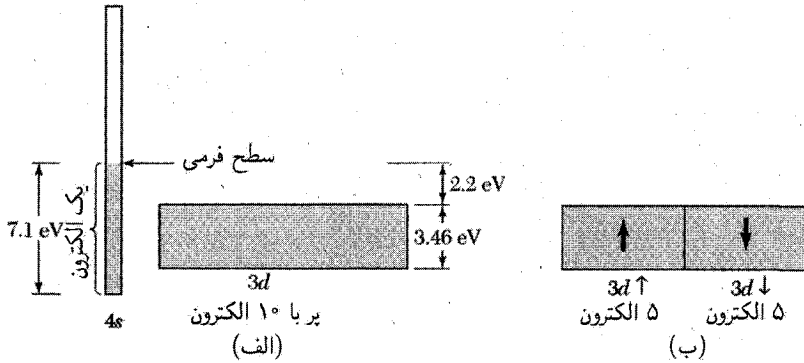
مغناطیدگی اشباعی در صفر مطلق

جدول ۱ نمونه‌ای از مقادیر مغناطیدگی اشباعی M_s ، دمای کوری فرومغناطیسی، و تعداد مؤثر مگنتونها را که با $M_s(0) = n_B N \mu_B$ تعریف می‌شود، ارائه می‌کند. در این رابطه N تعداد واحدهای فرمولی در واحد حجم است. n_B را با تعداد مؤثر مگنتونهای پارامغناطیسی که با رابطه (۲۳) فصل ۱۱ تعریف شد، اشتباه نکنید.

جدول ۱. بلورهای فرومغناطیسی

مغناطیدگی M_s برحسب گاوس		دمای کوری	
ماده	دمای اتاق	$n_B(^{\circ}K)$	برحسب K
Fe	۱۷۰۷	۲,۲۲	۱۰۴۳
Co	۱۴۰۰	۱,۷۲	۱۳۸۸
Ni	۴۸۵	۰,۶۰۶	۶۲۷
Gd	—	۷,۶۳	۲۹۲
Dy	—	۱۰,۲	۸۸
MnAs	۶۷۰	۳,۴	۳۱۸
MnBi	۶۲۰	۳,۵۲	۶۳۰
MnSb	۷۱۰	۳,۵	۵۸۷
CrO _۲	۵۱۵	۲,۰۳	۳۸۶
MnOFe _۲ O _۳	۴۱۰	۵,۰	۵۷۳
FeOFe _۲ O _۳	۴۸۰	۴,۱	۸۵۸
NiOFe _۲ O _۳	۲۷۰	۲,۴	(۸۵۸)
CuOFe _۲ O _۳	۱۳۵	۱,۳	۷۲۸
MgOFe _۲ O _۳	۱۱۰	۱,۱	۷۱۳
EuO	—	۶,۸	۶۹
Y _۲ Fe _۵ O _{۱۲}	۱۳۰	۵,۰	۵۶۰

مقادیر مشاهده شده n اغلب اعداد درست نیستند. این امر می‌تواند به علت‌های مختلف باشد. یکی از این علت‌ها برهم‌کنش اسپین-مدار است که مقداری گشتاور مغناطیسی مداری اضافه یا کم می‌کند. در فلزهای فرومغناطیسی، علت دیگر مغناطیدگی الکترونی‌های رسانشی است که به‌طور موضعی حول یک مغز یونی پارامغناطیسی القا می‌شود. آرایش‌های اسپینی در فری مغناطیس شکل ۱ حاکی از علت سوم‌اند: اگر به‌ازای هر دو اتم با تصویر اسپینی $+S$ ، یک اتم با تصویر اسپینی $-S$ وجود داشته باشد، اسپین متوسط برابر $\frac{1}{2}S$ است. آیا در واقع هیچ عایق فرومغناطیسی ساده‌ای وجود دارد که همه یون‌های آن در حالت پایه با هم موازی باشند؟ فرومغناطیس‌های ساده معدودی که تاکنون شناخته شده‌اند، مشتمل‌اند بر EuO ، $CrBr_3$ و EuS . مدل الکترون نواری یا الکترون دوره‌گرد، خاصیت فرومغناطیسی فلزهای واسط Fe ، Co و Ni را توجیه می‌کند. این رهیافت در شکلهای ۶ و ۷ نشان داده شده است. رابطه بین نوارهای d و s برای مس که فرومغناطیس نیست در شکل ۶ نشان داده شده است. اگر یک الکترون از مس برداریم، نیکل



را به دست می آوریم که امکان دارد یک حفره در نوار $3d$ داشته باشد. در ساختار نواری نیکل که در شکل ۷ (الف) برای $T > T_c$ نشان داده شده است، در مقایسه با مس $54r = 27r \times 2$ الکترون از نوار $3d$ و $46r$ از نوار $4s$ برداشته ایم.

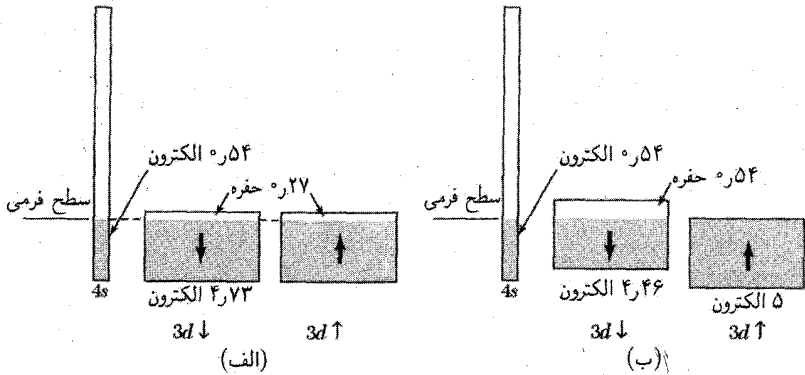
ساختار نواری نیکل در صفر مطلق در شکل ۷ (ب) نشان داده شده است. نیکل فرومغناطیس است و در صفر مطلق به ازای هر اتم $n = 60r$ مگنتون بور دارد. بعد از وارد کردن سهم گشتاور مغناطیسی ناشی از حرکت مداری الکترونها، نیکل به ازای هر اتم $54r$ الکترون اضافی با اسپین در یک جهت مرجح دارد. افزایش تبادلی پذیرفتاری فلزات موضوع مسئله ۶ فصل ۱۱ بود.

مگنون موج اسپینی کوانتیده است. همان گونه که برای فونونها عمل کردیم، برای یافتن رابطه پاشیدگی مگنون برای ω برحسب k نیز از استدلال کلاسیکی استفاده می کنیم. آنگاه انرژی مگنون را کوانتیده و کوانتیدگی را برحسب وارونی اسپین تعبیر می کنیم.

مگنون

همه اسپینهای فرومغناطیس ساده در حالت پایه مانند شکل ۸ (الف) موازی اند. N اسپین به بزرگی S روی یک خط یا حلقه در نظر بگیرید که در آن اسپینهای همسایه اول با برهم کنش هایزبرگ

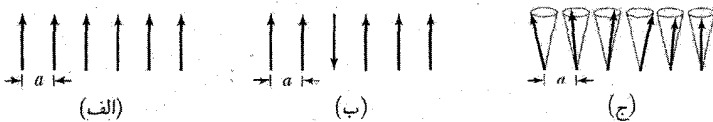
$$U = -2J \sum_{p=1}^N \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_{p+1} \quad (12)$$



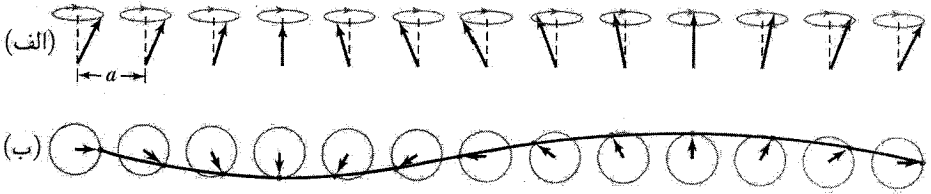
شکل ۷. (الف) روابط نواری برای نیکل در بالای دمای کوری. گشتاور مغناطیسی خالص صفر است، زیرا تعداد حفره‌ها در نوارهای $3d \downarrow$ و $3d \uparrow$ برابرند. (ب) رابطه طرحوار نوارهای نیکل در صفر مطلق. انرژی زیر نوارهای $3d \downarrow$ و $3d \uparrow$ به اندازه یک برهم‌کنش تبدیلی از هم فاصله دارند. نوار $3d \uparrow$ پر است؛ نوار $3d \downarrow$ شامل ۴٫۴۶ الکترون و ۵۴ eV حفره است. معمولاً تصور می‌شود که نوار $4s$ تعداد تقریباً مساوی از الکترونها در هر جهت اسپینی دارد، از این رو زحمت تقسیم آن به دو زیرنوار را به خود نداده‌ایم. گشتاور مغناطیسی خالص $54 \mu_B$ به ازای هر اتم، از جمعیت اضافی نوار $3d \uparrow$ نسبت به نوار $3d \downarrow$ ناشی می‌شود. اغلب مناسب است که مغناطیدگی را ناشی از ۵۴ eV حفره در نوار $3d \downarrow$ بگیریم.

به یکدیگر جفت شده باشند. در اینجا J انتگرال تبادل و $\hbar S_p$ تکانه زاویه‌ای اسپین واقع در جایگاه p است. اگر اسپینهای S_p را به صورت بردارهای کلاسیکی در نظر بگیریم، آنگاه در حالت پایه $S_p \cdot S_{p+1} = S^2$ و انرژی تبدیلی دستگاه برابر با $U = -2NJS^2$ خواهد بود.

انرژی نخستین حالت برانگیخته چقدر است؟ حالت برانگیخته‌ای را در نظر بگیرید که در آن اسپین خاصی، مانند شکل ۸ (ب)، وارون شده باشد. از (۱۲) می‌بینیم که این امر انرژی را به اندازه $8JS^2$ افزایش می‌دهد، به گونه‌ای که $U_1 = U + 8JS^2$. ولی اگر همه اسپینها به گونه شکل ۸ (ج) در این وارونی شرکت جویند، می‌توانیم یک برانگیختگی با انرژی بسیار پایتتری تشکیل دهیم. برانگیختگیهای بنیادی



شکل ۸. (الف) تصویر کلاسیکی حالت پایه فرومغناطیس ساده؛ همه اسپینها موازی‌اند. (ب) یک برانگیختگی ممکن؛ یک اسپین وارون می‌شود. (ج) برانگیختگیهای بنیادی با انرژی پایین، امواج اسپینی‌اند. انتهای بردارهای اسپینی روی سطح مخروطها دارای حرکت تقدیمی است، و اسپینهای متوالی نسبت به هم به اندازه زاویه ثابتی تقدم فاز دارند.



شکل ۹. یک موج اسپینی روی خطی از اسپینها. (الف) پرسپکتیو اسپینها. (ب) وقتی اسپینها از بالا دیده شوند، یک طول موج را نشان می‌دهند. این موج از انتهای بردارهای اسپینی رسم شده است.

دستگاه اسپینی به شکل موج‌گونه‌اند و مگنون نام دارند (شکل ۹). مگنونها همانند ارتعاشهای شبکه یا فونونها هستند. امواج اسپینی نوسانهایی در سمتگیریهای نسبی اسپینهای روی شبکه و ارتعاشهای شبکه‌ای نوسانهایی در مکانهای نسبی اتمهای روی شبکه‌اند.

اکنون یک روش کلاسیکی برای به دست آوردن رابطه پاشیدگی مگنونی ارائه می‌کنیم. جمله‌هایی که در رابطه (۱۲) شامل اسپین p ام‌اند عبارت‌اند از

$$-2JS_p \cdot (S_{p-1} + S_{p+1}) \quad (13)$$

گشتاور مغناطیسی را در جایگاه p به صورت $\mu_p = -g\mu_B S_p$ می‌نویسیم. آنگاه معادله (۱۳) به صورت زیر درمی‌آید

$$-\mu_p \cdot [(-2J/g\mu_B)(S_{p-1} + S_{p+1})] \quad (14)$$

که به شکل $-\mu \cdot B_p$ است، و در آن میدان مغناطیسی مؤثر یا میدان تبدیلی‌ای که بر اسپین p عمل می‌کند برابر است با

$$B_p = (-2J/g\mu_B)(S_{p-1} + S_{p+1}) \quad (15)$$

آهنگ تغییر تکانه زاویه‌ای $\hbar S_p$ با استفاده از مکانیک برابر است با گشتاور $\mu_p \times B_p$ که بر اسپین وارد می‌شود: $\hbar dS_p/dt = \mu_p \times B_p$ یا

$$dS_p/dt = (-g\mu_B/\hbar)S_p \times B_p = (2J/\hbar)(S_p \times S_{p-1} + S_p \times S_{p+1}) \quad (16)$$

برحسب مؤلفه‌های دکارتی

$$dS_p^x/dt = (2J/\hbar)[S_p^y(S_{p-1}^z + S_{p+1}^z) - S_p^z(S_{p-1}^y + S_{p+1}^y)] \quad (17)$$

و همین طور برای مؤلفه‌های dS_p^y/dt و dS_p^z/dt . این معادله‌ها حاوی حاصلضربهای مؤلفه‌های اسپینی و غیرخطی‌اند.

اگر دامنهٔ برانگیختگی کوچک باشد (اگر $(S_p^x, S_p^y \ll S)$ ، می‌توانیم با برابر S گرفتن همهٔ S_p^z ‌ها، $S_p^z = S$ ، و با چشم‌پوشی از جمله‌های حاوی حاصلضرب S^x و S^y در معادلهٔ dS^z/dt ، یک مجموعهٔ تقریبی از معادله‌های خطی به‌دست آوریم. معادلات خطی شده عبارت‌اند از

$$dS_p^x/dt = (2JS/\hbar)(2S_p^y - S_{p-1}^y - S_{p+1}^y) \quad (۱۸ \text{ الف})$$

$$dS_p^y/dt = -(2JS/\hbar)(2S_p^x - S_{p-1}^x - S_{p+1}^x) \quad (۱۸ \text{ ب})$$

$$dS_p^z/dt = 0 \quad (۱۹)$$

با استفاده از مانستگی با مسئله‌های فونونی، در جستجوی پاسخهای موج رونده‌ای برای رابطهٔ (۱۸) به‌صورت زیر برمی‌آییم

$$S_p^x = u \exp[i(pka - \omega t)]; \quad S_p^y = v \exp[i(pka - \omega t)] \quad (۲۰)$$

که در آن u و v ثابت‌اند، p عددی درست و a ثابت شبکه است. با جانشانی این پاسخ در (۱۸) داریم

$$-i\omega u = (2JS/\hbar)(2 - e^{-ika} - e^{ika})v = (4JS/\hbar)(1 - \cos ka)v$$

$$-i\omega v = -(2JS/\hbar)(2 - e^{-ika} - e^{ika})u = -(4JS/\hbar)(1 - \cos ka)u$$

این معادله‌ها در صورتی برای u و v دارای پاسخ‌اند که درمیان ضرایب صفر باشد:

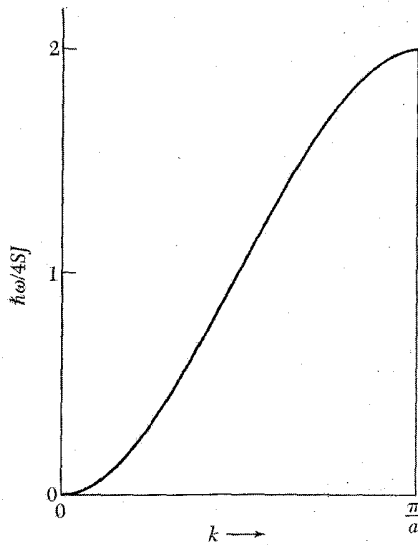
$$\begin{vmatrix} i\omega & (4JS/\hbar)(1 - \cos ka) \\ -(4JS/\hbar)(1 - \cos ka) & i\omega \end{vmatrix} = 0 \quad (۲۱)$$

درنتیجه

$$\hbar\omega = 4JS(1 - \cos ka) \quad (۲۲)$$

این نتیجه در شکل ۱۰ رسم شده است. با این پاسخ درمی‌یابیم که $v = -iu$ ، که متناظر با حرکت تقدیمی دایره‌ای هر اسپین به‌گرد محور z است. این امر را می‌توانیم با در نظر گرفتن بخشهای حقیقی (۲۰) و برابر قرار دادن v با $-iu$ مشاهده کنیم. در این صورت داریم

$$S_p^x = u \cos(pka - \omega t); \quad S_p^y = u \sin(pka - \omega t)$$



شکل ۱۰. رابطه پاشیدگی مگنونها در فرومغناطیس در یک بعد با برهم‌کنشهای همسایه اول.

معادله (۲۲) رابطه پاشیدگی امواج اسپینی در یک بعد با برهم‌کنشهای همسایه اول است. با استفاده از مکانیک کوانتومی نیز دقیقاً همین نتیجه به دست می‌آید (فصل ۴ QTS را ببینید). در طول موجهای بلند داریم $ka \ll 1$ در نتیجه $(1 - \cos ka) \cong \frac{1}{4}(ka)^2$ و

$$\hbar\omega \cong (2JSa^2)k^2 \quad (23)$$

بسامد متناسب با k^2 است؛ بسامد فونون در این حد مستقیماً با k متناسب است. رابطه پاشیدگی برای شبکه مکعبی فرومغناطیسی با برهم‌کنشهای همسایه اول عبارت است از

$$\hbar\omega = 2JS[z - \sum_{\delta} \cos(\mathbf{k} \cdot \delta)] \quad (24)$$

که در آن جمع‌زنی روی بردارهای δ است که اتم مرکزی را به همسایه‌های اول آن متصل می‌کنند و با δ نشان داده می‌شوند. به‌ازای $ka \ll 1$ ، برای هر سه شبکه مکعبی داریم

$$\hbar\omega = (2JSa^2)k^2 \quad (25)$$

که در آن a ثابت شبکه است.

ضریب k^2 را اغلب می‌توان توسط پراکندگی نوترون یا با تشدید موج اسپینی در فیلمهای نازک، فصل ۱۳، دقیقاً تعیین کرد. شیرانه^۱ و همکاران، مقدار D را در معادله $\hbar\omega = Dk^2$ ، برحسب $\text{meV}\text{\AA}^2$ برای Co ، Fe و Ni در دمای 295K ، به ترتیب، برابر 281 ، 500 و 364 به دست آوردند.

کوانتس امواج اسپینی. کوانتس امواج اسپینی درست مانند فوتونها و فونونها صورت می‌گیرد. انرژی مدی با بسامد ω_k با n_k مگنون با رابطه زیر داده می‌شود

$$\epsilon_k = \left(n_k + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_k \quad (26)$$

برانگیختگی مگنون با وارونی اسپین $\frac{1}{2}$ متناظر است.

برانگیختگی گرمایی مگنونها

مقدار میانگین تعداد مگنونهایی که در تعادل گرمایی در مد k برانگیخته می‌شوند با توزیع پلانک^۲ داده می‌شود

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_k/k_B T) - 1} \quad (27)$$

تعداد کل مگنونهای برانگیخته شده در دمای T برابر است با

$$\sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} = \int d\omega D(\omega) \langle n(\omega) \rangle \quad (28)$$

که در آن $D(\omega)$ تعداد مدهای مگنونی در واحد گستره بسامد است. انتگرال روی گستره مجاز k ، که منطقه اول بریلوئن است، گرفته می‌شود. در دماهای به اندازه کافی پایین، این انتگرال را می‌توانیم بین 0 تا ∞ محاسبه کنیم، زیرا $\langle n(\omega) \rangle$ با میل کردن ω به بینهایت به طور نمایی به صفر می‌گراید.

مگنونها برای هر مقدار k ، تنها یک تک قطبیدگی دارند. در سه بعد تعداد مدهای با بردار موج کوچکتر از k برابر $(4\pi k^3/3)(1/2\pi)^3$ به ازای واحد حجم است، از این رو تعداد مگنونها، $D(\omega)d\omega$ ، با بسامد در گستره $d\omega$ در ω برابر است با $(4\pi k^2)(dk/d\omega)d\omega$. در تقریب (۲۵) داریم

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{4J S a^2 k}{\hbar} = 2 \left(\frac{2J S a^2}{\hbar} \right)^{1/2} \omega^{1/2}$$

1. G. Shirane

۲. استدلال به طور دقیق مانند استدلال مربوط به فونونها یا فوتونهاست. هر مسئله‌ای که در آن ترازهای انرژی همانند ترازهای انرژی نوسانگر هماهنگ یا مجموعه‌ای از نوسانگرهای هماهنگ باشد، از توزیع پلانک پیروی می‌کند.

بنابراین چگالی مدها برای مگنونها برابر است با

$$D(\omega) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{\hbar}{2JSa^2} \right)^{3/2} \omega^{1/2} \quad (29)$$

در نتیجه تعداد کل مگنونها با استفاده از رابطه (۲۸) برابر است با

$$\sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{\hbar}{2JSa^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^{1/2}}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{k_B T}{2JSa^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{e^x - 1}$$

این انتگرال معین در جدولها یافت می‌شود و دارای مقدار $(4\pi^2)(0.587)$ است.

تعداد، N ، آنها در واحد حجم برابر است با Q/a^3 ، که در آن Q برای شبکه‌های sc، bcc، و fcc، به ترتیب، برابر است با ۱، ۲، و ۴. $(\sum n_{\mathbf{k}})/NS$ برابر است با تغییر نسبی مغناطیدگی، از این رو داریم

$$\frac{\Delta M}{M(0)} = \frac{0.587}{SQ} \cdot \left(\frac{k_B T}{2JS} \right)^{3/2} \quad (30)$$

این نتیجه، قانون $T^{3/2}$ بلوخ است و مورد تأیید تجربی قرار گرفته است. در آزمایشهای پراکندگی نوترون، امواج اسپینی تا دماهای نزدیک به دمای کوری و حتی بالاتر از دمای کوری مشاهده شده‌اند.

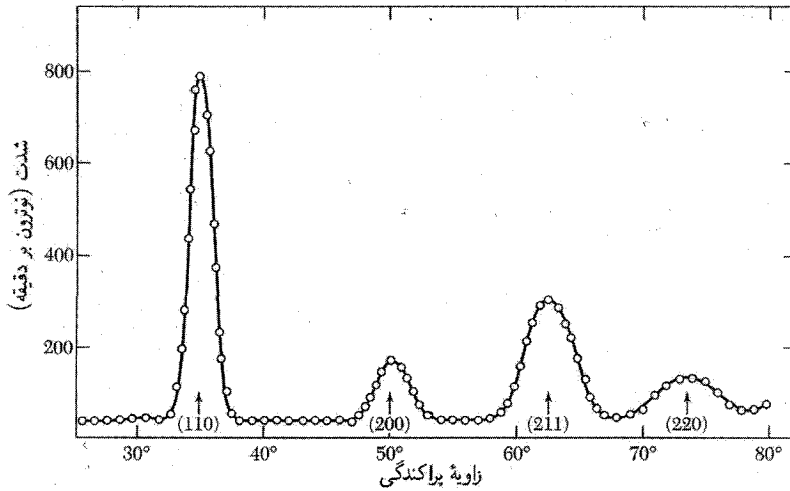
پراکندگی مغناطیسی نوترون

فوتون پرتو x با توزیع فضایی بار الکترونی مواجه می‌شود، خواه این چگالی بار مغناطیسی شده یا نشده باشد. نوترون با دو جنبه بلور روبه‌رو می‌شود: توزیع هسته‌ها، و توزیع مغناطیدگی الکترونی. نقشه پراش نوترونی برای آهن در شکل ۱۱ نشان داده شده است.

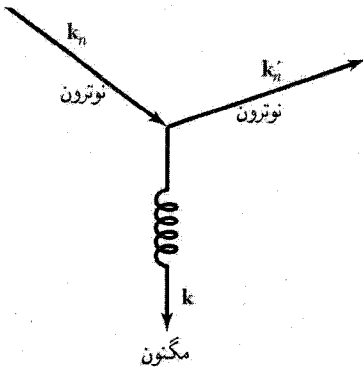
گشتاور مغناطیسی نوترون با گشتاور مغناطیسی الکترون برهم‌کنش می‌کند. سطح مقطع برهم‌کنش نوترون-الکترون با سطح مقطع برهم‌کنش نوترون-هسته از یک مرتبه بزرگی است. پراش نوترونها توسط بلور مغناطیسی تعیین توزیع، جهت، و نظم گشتاورهای مغناطیسی را میسر می‌سازد.

نوترون می‌تواند، به‌طور ناکشسان، همراه با آفرینش یا نابودی مگنون (شکل ۱۲) توسط ساختار مغناطیسی پراکنده شود؛ چنین رویدادهایی تعیین تجربی طیف مگنونی را میسر می‌سازند. اگر نوترون فرودی دارای بردار موج k_n باشد و همراه با آفرینش یک مگنون با بردار موج k به k'_n پراکنده شود، آنگاه از پایستگی تکانه بلوری داریم $k_n = k'_n + k + G$ ، که در آن G بردار شبکه وارون است. از پایستگی انرژی داریم

$$\hbar^2 k_n'^2 = \hbar^2 k_n'^2 + \hbar\omega_k \quad (31)$$



شکل ۱۱. نقشه پراش نوترون برای آهن.



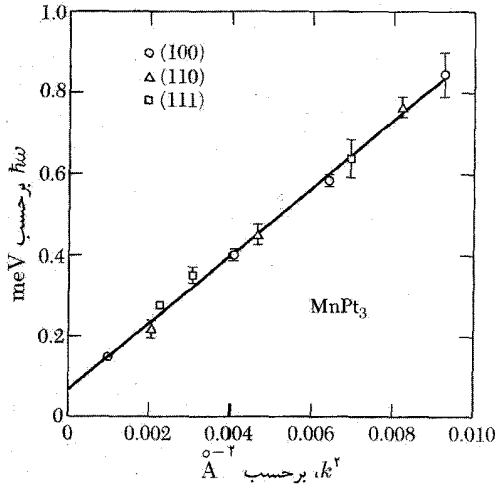
شکل ۱۲. پراکندگی نوترون توسط ساختار منظم مغناطیسی، همراه با آفریش مگنون.

که در آن انرژی مگنون خلق شده در این فرایند است. طیف مگنونی مشاهده شده برای $MnPt_3$ در شکل ۱۳ نشان داده شده است.

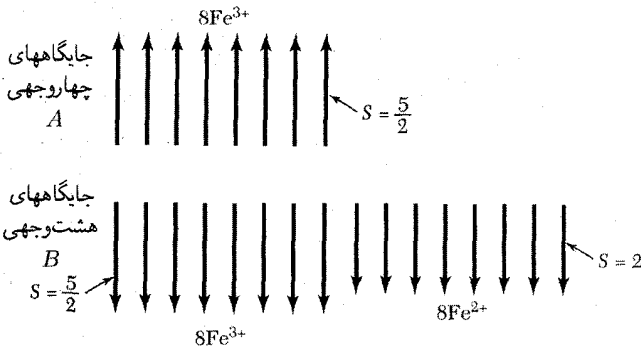
نظم فری مغناطیسی

در بسیاری از بلورهای فرومغناطیسی، حتی در بلورهایی که یونهای پارامغناطیسی مجزا هریک گشتاور مغناطیسی متعارف خود را دارند، مغناطیدگی اشباعی در $T = 0 \text{ K}$ با به خط شدگی گشتاورهای مغناطیسی یونهای پارامغناطیسی تشکیل دهنده بلور متناظر نیست.

آشنا ترین نمونه عبارت است از مگنتیت، Fe_3O_4 ، یا $FeO \cdot Fe_2O_3$. از جدول ۲ در فصل ۱۱ می بینیم که یونهای فریک (Fe^{3+}) در حالی با اسپین $S = \frac{5}{2}$ و گشتاور مداری صفرند. بنابراین سهم هر



شکل ۱۳. انرژی مگنون به صورت تابعی از مربع بردار موج، برای $MnPt_3$ فرومغناطیسی.



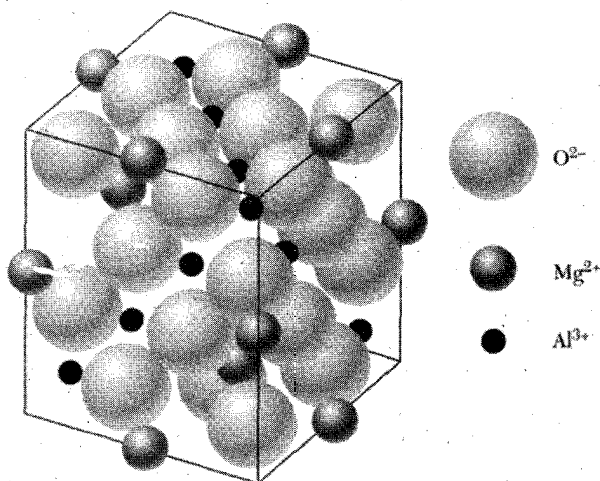
شکل ۱۴. آرایش اسپینها در مگنتیت، $FeO \cdot Fe_2O_3$ ، که نشان می‌دهد چگونه گشتاورهای یونهای Fe^{2+} یکدیگر را حذف می‌کنند، و تنها گشتاورهای یونهای Fe^{3+} باقی می‌ماند.

یون در گشتاور اشباعی باید $5\mu_B$ باشد. یونهای فرو (Fe^{2+}) اسپین ۲ دارند و سهم آنها صرف نظر از هر سهم گشتاور مداری باقیمانده باید $4\mu_B$ باشد. در نتیجه اگر همه اسپینها موازی بودند، تعداد مؤثر مگنتون بور به ازای واحد فرمولی Fe_2O_3 باید حدود $14 = 2 \times 5 + 4$ می‌شد.

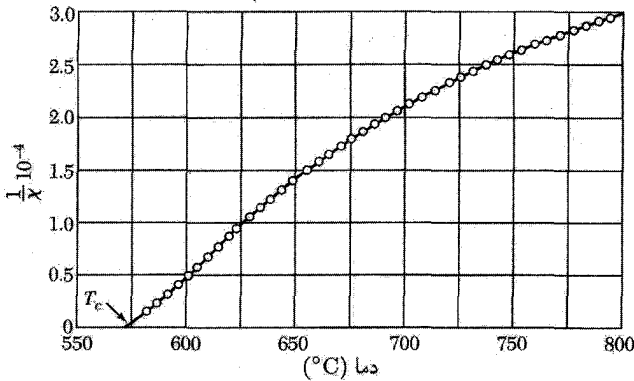
مقدار مشاهده شده (جدول ۱) ۴٫۱ است. این اختلاف را در صورتی می‌توان توجیه کرد که گشتاور یونهای Fe^{3+} با یکدیگر پادموازی باشند: آنگاه گشتاور مشاهده شده مانند شکل ۱۴، تنها از یون Fe^{2+} ناشی می‌شود. نتایج پراش نوترونی با این مدل سازگار است.

نیل^۱ با ارجاع به رده مهمی از اکسیدهای مغناطیسی معروف به فریتها، بحث سازمان یافته‌ای درباره پیامدهای این نوع نظم اسپینی ارائه کرده است. فرمول شیمیایی متداول فریت عبارت است از $MO \cdot Fe_2O_3$ ، که در آن M کاتیونی دوظرفیتی و اغلب Zn، Cd، Ni، Cu، Co، یا Mg است. واژه فری مغناطیس در اصل برای توصیف نظم اسپینی فرومغناطیسی، مانند شکل ۱۴، به کار رفت، ولی با تعمیم آن، این واژه تقریباً در برگیرنده هر ترکیبی است که در آن برخی از یونهاش گشتاوری پادموازی با دیگر یونها داشته باشند. بسیاری از فری مغناطیسها رسانای ضعیف الکتروسیسته‌اند. این کیفیت در کار بستهای از قبیل هسته میدلهای $r f$ مورد بهره‌برداری قرار می‌گیرد.

فریتهای مکعبی دارای ساختار بلوری اسپینل‌اند که در شکل ۱۵ نشان داده شده است. در مکعب واحد، هشت جایگاه چهاروجهی اشغال شده (یا A) و ۱۶ جایگاه هشت‌وجهی اشغال شده (یا B) وجود دارد. ثابت شبکه حدود 8 \AA است. یک خصلت جالب توجه اسپینلها آن است که همه انتگرالهای تبدالی J_{AA} ، J_{AB} ، و J_{BB} منفی‌اند و به‌خشدگی پادموازی اسپینلهایی را میسر می‌کنند که با این برهم‌کنش به یکدیگر مربوط می‌شوند. ولی برهم‌کنش AB از همه قویتر است، در نتیجه برای آنکه اسپینلهای A بتوانند



شکل ۱۵. ساختار بلوری اسپینل معدنی $MgAl_2O_4$ ؛ یونهای Mg^{2+} جایگاههای چهاروجهی را اشغال می‌کنند که چهار یون اکسیژن هر یک را احاطه می‌کنند؛ Al^{3+} ها جایگاههای هشت‌وجهی را اشغال می‌کنند و شش یون اکسیژن هر یک را احاطه می‌کنند. آرایش اسپینل عادی به این شکل است: یونهای فلزی دوظرفیتی جایگاههای چهاروجهی را اشغال می‌کنند. در آرایش اسپینل معکوس یونهای فلزی سه‌طرفیتی جایگاههای چهاروجهی را اشغال می‌کنند، در حالی که جایگاههای هشت‌وجهی نیمی با یونهای فلزی دوظرفیتی و نیم دیگر با یونهای فلزی سه‌طرفیتی اشغال می‌شوند.



شکل ۱۶. وارون پذیرفتاری مگنتیت، $\text{FeO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$.

با اسپینهای B پادموازی باشند، اسپینهای A با یکدیگر و اسپینهای B نیز با هم موازی می‌مانند. اگر در $U = -2JS_i \cdot S_j$ مثبت باشد، می‌گوییم انتگرال تبادلی فرومغناطیسی است؛ اگر J منفی باشد، انتگرال تبادلی پادفرومغناطیسی است.

اکنون ثابت می‌کنیم که سه برهم‌کنش پادفرومغناطیسی می‌توانند به فری مغناطیس منجر شوند. میدانهای تبادلی میانگین را که بر شبکه‌های اسپینی A و B عمل می‌کنند می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\mathbf{B}_A = -\lambda \mathbf{M}_A - \mu \mathbf{M}_B; \quad \mathbf{B}_B = -\mu \mathbf{M}_A - \nu \mathbf{M}_B \quad (32)$$

همه ثابتهای میدان میانگین λ ، μ ، و ν را مثبت می‌گیریم. در این صورت علامت منفی متناظر است با برهم‌کنش پادموازی. چگالی انرژی برهم‌کنش برابر است با

$$U = -\frac{1}{V} (\mathbf{B}_A \cdot \mathbf{M}_A + \mathbf{B}_B \cdot \mathbf{M}_B) = \frac{1}{V} \lambda \mathbf{M}_A^2 + \mu \mathbf{M}_A \cdot \mathbf{M}_B + \frac{1}{V} \nu \mathbf{M}_B^2 \quad (33)$$

این چگالی انرژی در صورتی که \mathbf{M}_A با \mathbf{M}_B پادموازی باشد کمتر از وقتی است که این دو با هم موازی باشند. با توجه به آنکه یک پاسخ ممکن به صورت $M_A = M_B = 0$ است، انرژی حالت پادموازی را باید با صفر مقایسه کرد. در نتیجه هنگامی که داشته باشیم

$$\mu M_A M_B > \frac{1}{V} (\lambda M_A^2 + \nu M_B^2) \quad (34)$$

در حالت پایه M_A در خلاف جهت M_B است. (تحت شرایط معینی ممکن است آرایه‌های اسپینی ناهمخطی وجود داشته باشند که انرژی آنها باز هم پایینتر باشد.)

دمای کوری و پذیرفتاری فری مغناطیسیها

برای یونهای روی جایگاههای A و B ، ثابتهای کوری جداگانه C_A و C_B را تعریف می‌کنیم. برای سادگی همه برهم‌کنشها را بجز برهم‌کنش پادموازی بین جایگاههای A و B صفر می‌گیریم: $\mathbf{B}_A = -\mu\mathbf{M}_B$ ؛ $\mathbf{B}_B = -\mu\mathbf{M}_A$ ، که در آن μ مثبت است. با توجه به شکل رابطه (۳۳)، ثابت μ در هر دو عبارت یکسان است. در تقریب میدان میانگین داریم

$$(CGS) \quad M_{AT} = C_A(B_a - \mu M_B); \quad M_{BT} = C_B(B_a - \mu M_A) \quad (35)$$

که در آن B_a میدان اعمال شده است. این معادله‌ها در صورتی در میدان اعمال شده صفر برای M_A و M_B دارای پاسخ غیرصفرند که

$$\begin{vmatrix} T & \mu C_A \\ \mu C_B & T \end{vmatrix} = 0 \quad (36)$$

در نتیجه دمای کوری فری مغناطیسی با $T_c = \mu(C_A C_B)^{1/2}$ داده می‌شود.

رابطه (۳۵) را برای M_B و M_A حل می‌کنیم و پذیرفتاری را در $T > T_c$ به دست می‌آوریم:

$$(CGS) \quad \chi = \frac{M_A + M_B}{B_a} = \frac{(C_A + C_B)T - 2\mu C_A C_B}{T^2 - T_c^2} \quad (37)$$

این نتیجه پیچیده‌تر از نتیجه (۴) است. مقادیر تجربی برای Fe_3O_4 در شکل ۱۶ رسم شده‌اند. انحنای منحنی $1/\chi$ برحسب T یک خصلت مشخصه فری مغناطیس است. در ادامه، حد پادفری مغناطیسی $C_A = C_B$ را در نظر می‌گیریم.

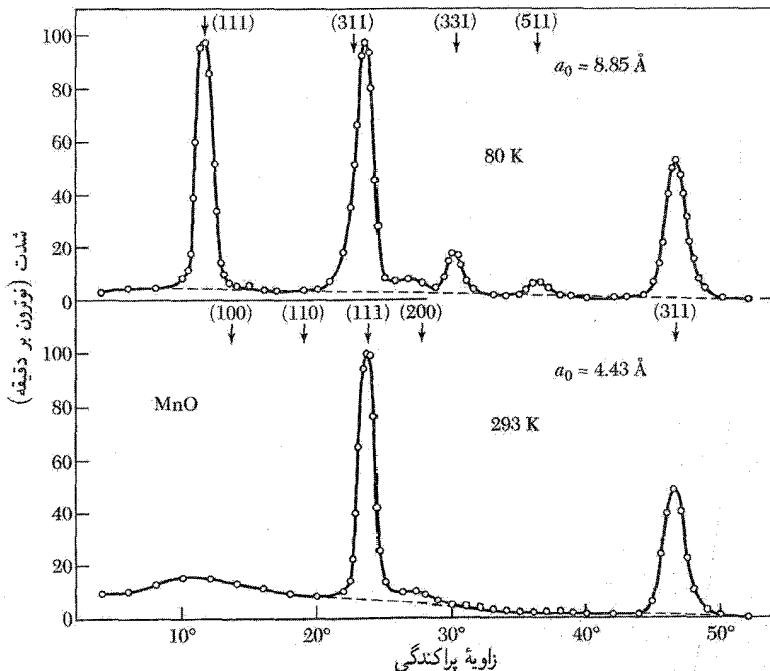
نارسنگ (گارنت)های آهن. نارسنگهای آهن عابقیهای فری مغناطیسی مکعبی با فرمول عمومی $\text{M}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ اند، که در آن M یک یون فلز سه ظرفیتی و Fe یون فریک سه ظرفیتی ($S = \frac{5}{2}$ و $L = 0$) است. مثالی از آن نارسنگ آهن ایتیریم $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ است که به YIG معروف شده است. در اینجا Y^{3+} دیامغناطیس است.

مغناطیدگی خالص YIG از برابند دو شبکه از یونهای Fe^{3+} ناشی می‌شود که در جهت‌های مخالف مغناطیسی شده‌اند. در صفر مطلق، سهم هر یون فریک در مغناطیدگی $\pm 5\mu_B$ است. ولی در هر واحد فرمولی سه یون Fe^{3+} روی جایگاههایی که با برحسب d مشخص شده‌اند در یک سو و دو یون Fe^{3+} روی جایگاههای a در سوی مخالف مغناطیده می‌شوند، در نتیجه برابند $5\mu_B$ به ازای واحد فرمولی حاصل می‌شود که به خوبی با اندازه‌گیریهای گلر^۱ و همکاران سازگار است.

میدان میانگینی که یونهای واقع در جایگاههای d در جایگاه a پدید می‌آورند برابر است با $B_a = -(1.5 \times 10^4) M_d$. دمای کوری ۵۵۹K که برای YIG مشاهده شده است از برهم‌کنش $a-d$ ناشی می‌شود. تنها یونهای مغناطیسی در YIG، یونهای فریک‌اند. از آنجا که این یونها با توزیع بار کروی در حالت $L = 0$ قرار دارند، برهم‌کنش آنها با تغییر شکل‌های شبکه و فونونها ضعیف است. در نتیجه YIG در آزمایشهای تشدید فرومغناطیسی با پهنای خط بسیار کم مشخص می‌شود.

نظم پادفرومغناطیسی

مثال کلاسیکی از تعیین ساختار مغناطیسی توسط نوترونها برای MnO با ساختار NaCl، در شکل ۱۷ نشان داده شده است. بازتابهای نوترونی اضافی که در ۲۹۳K وجود ندارد، در ۸۰K یافت می‌شوند. بازتابهای موجود در ۸۰K را می‌توان برحسب یک یاخته یک‌گانه مکعبی با ثابت شبکه 8.85 \AA رده‌بندی کرد. در ۲۹۳K بازتابها با یک یاخته یک‌گانه fcc با ثابت شبکه 4.43 \AA متناظرند.



شکل ۱۷. نقشه‌های پراش نوترونی برای MnO، در پایین و بالای دمای نظم‌یابی اسپینها، 120 K . شاخصهای بازتاب در 80 K براساس یاخته 8.85 \AA آنگسترومی و در 293 K براساس یاخته 4.43 \AA آنگسترومی بیان شده‌اند. در دمای بالاتر، یونهای Mn^{2+} کماکان مغناطیسی‌اند، ولی دیگر منظم نیستند.

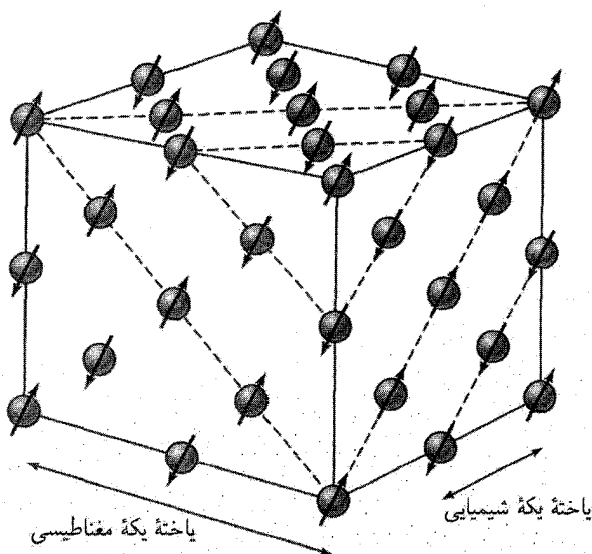
اما ثابت شبکه‌ای که با بازتاب پرتو x تعیین می‌شود در هر دو دمای $8^\circ K$ و $293K$ برابر 4.43 \AA است. نتیجه می‌گیریم که ثابت شبکه باخته شیمیایی 4.43 \AA است، ولی در $8^\circ K$ گشتاورهای مغناطیسی الکترونی یونهای Mn^{2+} در آرایش غیرفرومغناطیسی منظم می‌شوند. اگر این نظم فرومغناطیسی بود، باخته‌های شیمیایی و مغناطیسی بازتابهای یکسانی به بار می‌آوردند.

آرایش اسپینی که در شکل ۱۸ نشان داده شده است با نتایج پراش نوترونی و اندازه‌گیریهی مغناطیسی سازگار است. اسپینهای تک صفحه $[111]$ با هم موازی‌اند، ولی اسپینهای صفحات $[1\bar{1}\bar{1}]$ متوالی پادموازی‌اند. به این ترتیب MnO ، مانند شکل ۱۹، پادفرومغناطیس است.

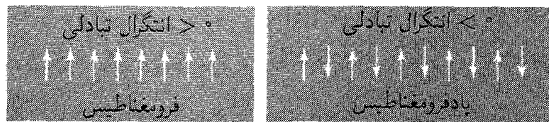
اسپینها در پادفرومغناطیس در دمای پایینتر از دمای نظم‌یابی یا دمای نیل (جدول ۲)، در آرایشی پادموازی با گشتاور خالص صفر نظم می‌یابند. پذیرفتاری پادفرومغناطیس در $T = T_N$ نامتناهی نیست، بلکه به گونه شکل ۲۰ دارای یک نقطه بازگشت ضعیف است.

پادفرومغناطیس حالت خاصی از فری مغناطیس است که برای آن هر دو زیرشبکه A و B مغناطیدگی اشباعی مساوی دارند. بنابراین در رابطه (۳۷)، $C_A = C_B$ ، و دمای نیل در تقریب میدان میانگین با رابطه زیر داده می‌شود

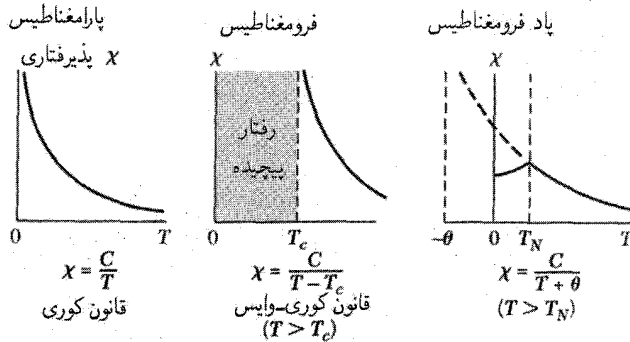
$$T_N = \mu C \quad (38)$$



شکل ۱۸. آرایش منظم اسپین یونهای Mn^{2+} در اکسید منگنز MnO ، به‌گونه‌ای که پراش نوترونی تعیین کرده است. یونهای O^{2+} نشان داده نشده‌اند.



شکل ۱۹. نظم‌بایی اسپینها در فرومغناطیسها ($J > 0$) و پادفرومغناطیسها ($J < 0$).



شکل ۲۰. وابستگی دمایی پذیرفتاری مغناطیسی در پارامغناطیسها، فرومغناطیسها و پادفرومغناطیسها. در زیر دمای نیل در پادفرومغناطیسها، اسپینها سمتگیری پادموازی دارند؛ پذیرفتاری مقدار بیشینه خود را در T_N دارد که در آنجا یک شکن خوش‌تعریف در منحنی χ برحسب T وجود دارد. قله‌های ظرفیت گرمایی و ضریب انبساط گرمایی نیز این گذار را نشان می‌دهند.

که در آن C به یک تک‌زیرشبکه مربوط می‌شود. پذیرفتاری در ناحیه پارامغناطیسی $T > T_N$ از رابطه (۳۷) به‌دست می‌آید:

$$\chi = \frac{2CT - 2\mu C^2}{T^2 - (\mu C)^2} = \frac{2C}{T + \mu C} = \frac{2C}{T + T_N} \quad (39)$$

نتایج تجربی در $T > T_N$ به شکل زیرند

$$(CGS) \quad \chi = \frac{2C}{T + \theta} \quad (40)$$

مقادیر تجربی θ/T_N که در جدول ۲ داده شده‌اند، اغلب به مقدار قابل ملاحظه‌ای با مقدار واحد، که از معادله (۳۹) انتظار می‌رود، تفاوت دارند. هنگامی که برهم‌کنش با همسایه‌های دوم به حساب آورده شوند، و آرایشهای زیرشبکه‌ای ممکن نیز در نظر گرفته شوند، ممکن است بتوان مقادیری برای θ/T_N از مرتبه مقادیر مشاهده شده به‌دست آورد. اگر برای توصیف برهم‌کنشهای درون زیرشبکه، ثابت میدان میانگین ϵ را وارد کنیم، آنگاه خواهیم داشت $\theta/T_N = (\mu + \epsilon)/(\mu - \epsilon)$.

جدول ۲. بلورهای پادفرمغناطیسی

$\frac{\chi(^{\circ})}{\chi(T_N)}$	$\frac{\theta}{T_N}$	θ کوری-وایس،		شبکه	ماده
		بر حسب K	دمای گذار T_N بر حسب K		
$\frac{2}{3}$	۵٫۳	۶۱۰	۱۱۶	fcc	MnO
۰٫۸۲	۳٫۳	۵۲۸	۱۶۰	fcc	MnS
	۲٫۲۵	۶۹۰	۳۰۷	ششگوشی لایه‌ای	MnTe
۰٫۷۶	۱٫۲۴	۸۲	۶۷	چهارگوشی مرکز حجمی	MnF _۲
۰٫۷۲	۱٫۴۸	۱۱۷	۷۹	چهارگوشی مرکز حجمی	FeF _۲
< ۰٫۲	۲٫۰	۴۸	۲۴	ششگوشی لایه‌ای	FeCl _۲
۰٫۸	۲٫۹	۵۷۰	۱۹۸	fcc	FeO
	۱٫۵۳	۳۸٫۱	۲۵	ششگوشی لایه‌ای	CoCl _۲
	۱٫۱۴	۳۳۰	۲۹۱	fcc	CoO
	۱٫۳۷	۶۸٫۲	۵۰	ششگوشی لایه‌ای	NiCl _۲
	~ ۴	~ ۲۰۰۰	۵۲۵	fcc	NiO
			۳۰۸	bcc	Cr

پذیرفتاری در زیر دمای نیل

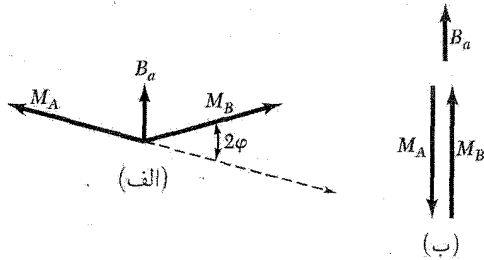
دو وضعیت وجود دارد: در یکی میدان مغناطیسی اعمال شده عمود بر محور اسپینهاست؛ و در دیگری میدان با محور اسپینها موازی است. در دمای نیل و بالاتر از آن، پذیرفتاری نسبت به محور اسپین تقریباً مستقل از جهت میدان است.

برای B_a عمود بر محور اسپینها، می‌توانیم پذیرفتاری را با ملاحظات بنیادی محاسبه کنیم. چگالی انرژی در حضور میدان، برای $M = |M_A| = |M_B|$ برابر است با

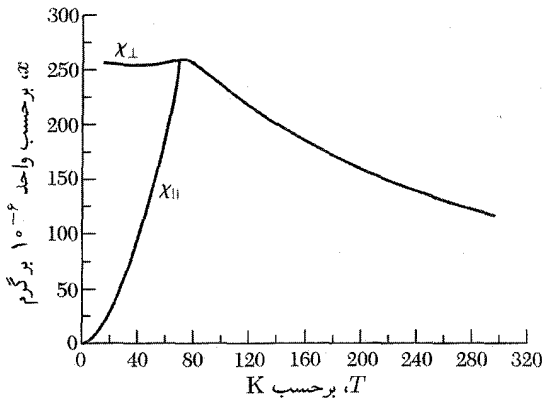
$$U = \mu M_A \cdot M_B - B_a \cdot (M_A + M_B) \cong -\mu M^2 \left[1 - \frac{1}{4}(\varphi)^2 \right] - 2B_a M \varphi \quad (41)$$

که در آن φ زاویه‌ای است که اسپینها با یکدیگر می‌سازند (شکل ۲۱ الف). این انرژی هنگامی کمینه است که

$$dU/d\varphi = 0 = 4\mu M^2 \varphi - 2B_a M; \quad \varphi = B_a / 2\mu M \quad (42)$$



شکل ۲۱. محاسبه پذیرفتاریهای (الف) عمودی و (ب) موازی، در $0^\circ K$ ، در تقریب میدان میانگین.



شکل ۲۲. پذیرفتاری مغناطیسی فلئوراید منگنز MnF_2 ، موازی و عمود بر محور چهارگوشی.

در نتیجه

$$(CGS) \quad \chi_{\perp} = 2M\varphi/B_a = \frac{1}{\mu} \quad (43)$$

در سمتگیری موازی (شکل ۲۱ ب)، در صورتی که دستگاههای اسپینی A و B با میدان زاویه‌های مساوی بسازند، انرژی مغناطیسی تغییری نمی‌کند. بنابراین پذیرفتاری در $T = 0^\circ K$ صفر است:

$$\chi_{\parallel}(0) = 0 \quad (44)$$

پذیرفتاری موازی با افزایش دما تا دمای T_N به آرامی افزایش می‌یابد. اندازه‌گیریهای مربوط به MnF_2 در شکل ۲۲ نشان داده شده‌اند. دستگاه اسپینی، در میدانهای بسیار قوی به‌طور ناپیوسته از سمتگیری موازی به سمتگیری عمودی که انرژی پایینتری دارد، تغییر جهت می‌دهد.

مگنونهای پادرومغناطیس

رابطه پاشیدگی مگنونها را در پادرومغناطیس یک بعدی با انجام تعویضهای مناسب در شیوه استدلال روابط (۱۶) تا (۲۲) برای یک خط فرومغناطیسی، به دست می آوریم. فرض کنید اسپینهای با شاخص زوج $2p$ زیر شبکه A را با اسپینهای بالا ($S^z = S$) و اسپینهای با شاخص فرد $2p + 1$ زیر شبکه B را با اسپینهای پایین ($S^z = -S$) بسازند.

تنها برهم کنش با همسایه های اول را با J منفی در نظر می گیریم. در این صورت، با نظری دقیق بر معادله (۱۷)، رابطه (۱۸) برای A به صورت زیر درمی آید

$$dS_{2p}^x/dt = (2JS/\hbar)(-2S_{2p}^y - S_{2p-1}^y - S_{2p+1}^y) \quad (الف \ 45)$$

$$dS_{2p}^y/dt = -(2JS/\hbar)(-2S_{2p}^x - S_{2p-1}^x - S_{2p+1}^x) \quad (ب \ 45)$$

معادلات متناظر اسپین واقع بر B عبارت اند از

$$dS_{2p+1}^x/dt = (2JS/\hbar)(2S_{2p+1}^y + S_{2p}^y + S_{2p+2}^y); \quad (الف \ 46)$$

$$dS_{2p+1}^y/dt = -(2JS/\hbar)(2S_{2p+1}^x + S_{2p}^x + S_{2p+2}^x) \quad (ب \ 46)$$

می نویسیم $S^+ = S^x + iS^y$ ؛ آنگاه داریم

$$dS_{2p}^+/dt = (2iJS/\hbar)(2S_{2p}^+ + S_{2p-1}^+ + S_{2p+1}^+); \quad (47)$$

$$dS_{2p+1}^+/dt = -(2iJS/\hbar)(2S_{2p+1}^+ + S_{2p}^+ + S_{2p+2}^+) \quad (48)$$

در پی پاسخهایی به صورت زیر هستیم

$$S_{2p}^+ = u \exp[i2pka - i\omega t]; \quad S_{2p+1}^+ = v \exp[i(2p+1)ka - i\omega t] \quad (49)$$

در نتیجه با $\omega_{ex} \equiv -4JS/\hbar = 4|J|S/\hbar$ ، روابط (۴۷) و (۴۸) به این صورت درمی آیند

$$\omega u = \frac{1}{2} \omega_{\text{ex}} (2u + ve^{-ika} + ve^{ika}) \quad (۵۰ \text{ الف})$$

$$-\omega v = \frac{1}{2} \omega_{\text{ex}} (2v + ue^{-ika} + ue^{ika}) \quad (۵۰ \text{ ب})$$

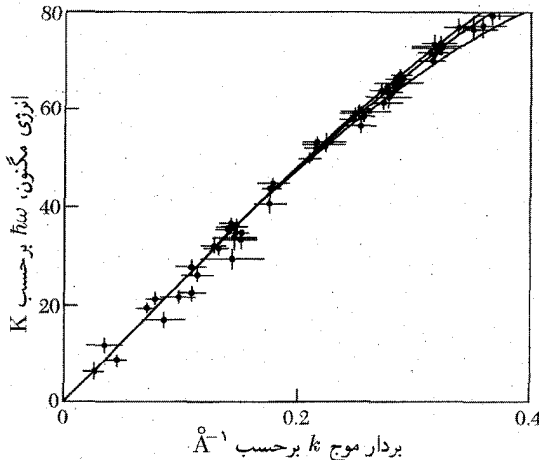
معادلات (۵۰) در صورتی دارای پاسخ‌اند که

$$\begin{vmatrix} \omega_{\text{ex}} - \omega & \omega_{\text{ex}} \cos ka \\ \omega_{\text{ex}} \cos ka & \omega_{\text{ex}} + \omega \end{vmatrix} = 0 \quad (۵۱)$$

در نتیجه

$$\omega^2 = \omega_{\text{ex}}^2 (1 - \cos^2 ka), \quad \omega = \omega_{\text{ex}} |\sin ka| \quad (۵۲)$$

رابطه پاشیدگی مگنونه‌های پادفرومغناطیس کاملاً با رابطه (۲۲) برای مگنونه‌های فرومغناطیس تفاوت دارد. به‌ازای $1 \ll ka$ ، می‌بینیم که رابطه (۵۲) برحسب k خطی است: $|\omega \cong \omega_{\text{ex}} |ka|$. طیف مگنونی RbMnF_3 که توسط آزمایش‌های پراکندگی ناکشسان نوترون تعیین شده در شکل ۲۳ نشان داده شده است. ناحیه وسیعی وجود دارد که در آن بسامد مگنون برحسب بردار موج خطی است. در MnF_2 ، در دماهای تا 93° دمای نیل، مگنونه‌های کاملاً تفکیک‌شده‌ای مشاهده شده است. در نتیجه، حتی در دماهای بالا نیز تقریب مگنونی مفید است.

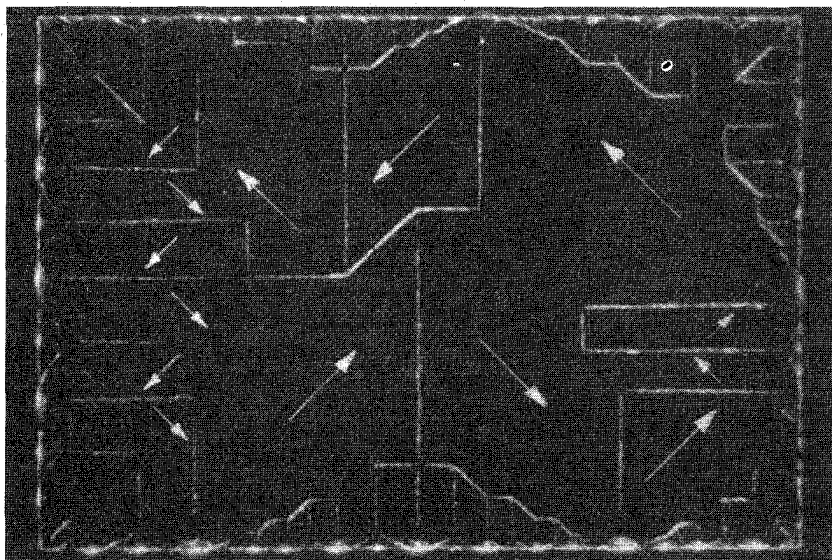


شکل ۲۳. رابطه پاشیدگی مگنونها در پادفرومغناطیس مکعبی ساده RbMnF_3 به همان صورت که پراکندگی ناکشسان نوترون در دمای 42K معین کرده است.

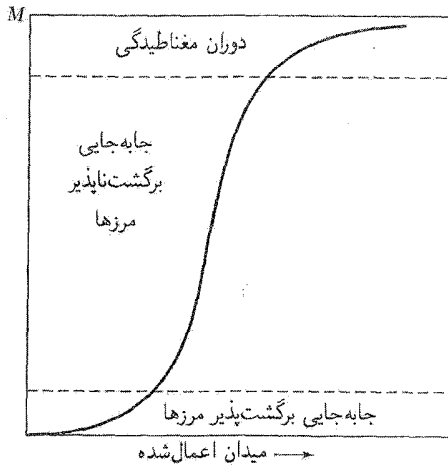
حوزه‌های فرومغناطیسی

در دماهای کاملاً پایینتر از نقطه کوری، گشتاورهای مغناطیسی الکترونی فرومغناطیس در مقیاس میکروسکوپی اساساً موازی‌اند. با این همه، هنگامی که نمونه را به صورت یک کل در نظر بگیریم، ممکن است گشتاور مغناطیسی بسیار کمتر از گشتاور اشیاعی باشد، و برای اشیاع نمونه لازم باشد میدان مغناطیسی خارجی اعمال کنیم. رفتار مشاهده شده در نمونه‌های بس‌بلورین از این نظر با رفتار تک‌بلورها یکسان است.

نمونه‌های واقعی از ناحیه‌های کوچکی به نام حوزه تشکیل شده‌اند، که درون هر یک مغناطیدگی موضعی اشیاع شده است. جهت مغناطیدگی حوزه‌های متفاوت لزومی ندارد موازی هم باشد. در شکل ۲۴ یک آرایش حوزه‌ای نشان داده شده است که برآیند گشتاور مغناطیسی در آن تقریباً صفر است. حوزه‌ها در یادفرومغناطیسها، فروالکتتریکها، پادفروالکتتریکها، فروکشسانها، ابرسانها، و گاهی در فلزات تحت شرایط اثر دوهاس-ون آلفن قوی نیز تشکیل می‌شوند. افزایش گشتاور مغناطیسی خالص نمونه فرومغناطیس در میدان مغناطیسی اعمال شده، طی دو فرایند مستقل صورت می‌گیرد:



شکل ۲۴. نقشه حوزه فرومغناطیسی روی تیغه تک‌بلور نیکل. شگرد الگوی بودر مغناطیسی بیترا مرزهای حوزه‌ها را مرئی کرده است. جهت مغناطیدگی درون یک حوزه با بررسی رشد یا انقباض آن حوزه در میدان مغناطیسی تعیین می‌شود.



شکل ۲۵. نمونه‌ای از منحنی مغناطیدگی، که فرایندهای مغناطش برتر را در ناحیه‌های مختلف منحنی نشان می‌دهد.

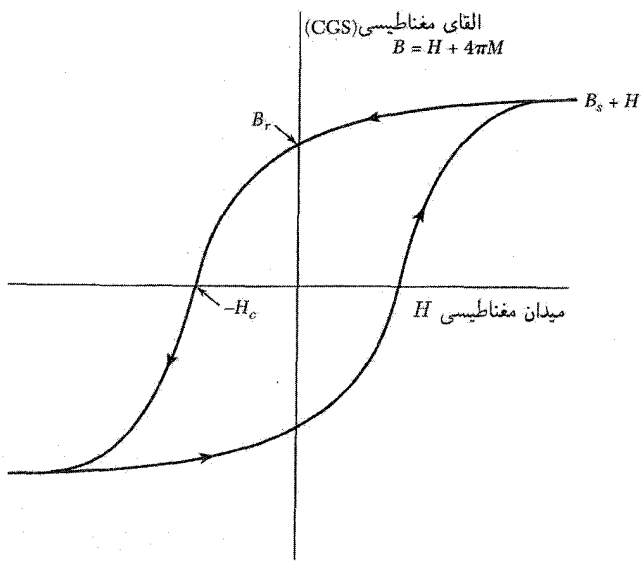
- در میدانهای اعمال‌شده ضعیف، حجم حوزه‌های (شکل ۲۵) با سمتگیری مطابقت نسبت به میدان (به بهای کاهش حجم حوزه‌های با سمتگیری نامطلوب) افزایش می‌یابند؛
- در میدانهای اعمال‌شده قوی، مغناطیدگی حوزه به سمت جهت میدان می‌چرخد.

واژه‌های فنی‌ای که حلقه پسماند تعریف می‌کند در شکل ۲۶ نشان داده شده‌اند. وادارندگی معمولاً به‌صورت میدان در جهت وارون H_c تعریف می‌شود که القای B را از اشباع به صفر می‌رساند. در مواد با وادارندگی بالا، وادارندگی H_{ci} به‌صورت میدان در جهت معکوسی که مغناطیدگی M را به صفر می‌رساند، تعریف می‌شود.

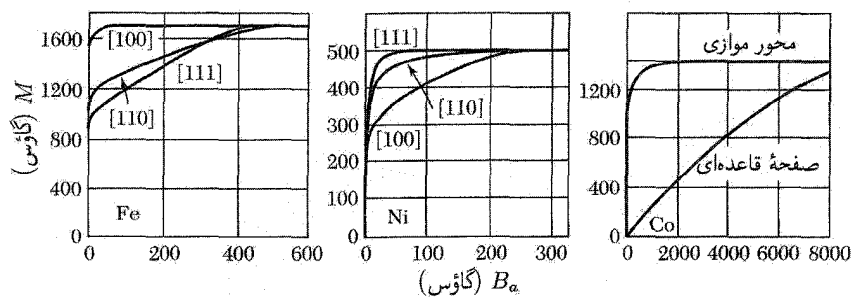
انرژی ناهمسانگردی

در بلورهای فرومغناطیسی انرژی وجود دارد که مغناطیدگی را در راستای محورهای بلورنگاری معینی به نام جهت‌های آسان مغناطش، جهت می‌دهد. این انرژی را انرژی مغناطوبلورین، یا انرژی ناهمسانگردی می‌نامند. این انرژی از برهم‌کنش تبادلی صرفاً همسانگردی که تاکنون در نظر گرفته‌ایم، پدید نمی‌آید.

کبالت بلوری ششگوشی است. محور ششگوش، همان‌گونه که در شکل ۲۷ نشان داده شده است، در دمای اتاق جهت آسان مغناطش آن است. یک منشأ انرژی ناهمسانگردی در شکل ۲۸ نشان داده شده است. مغناطیدگی بلور، از طریق همپوشانی اوربیتال الکترونها با شبکه بلور مواجه می‌شود؛ اسپین توسط جفت‌شدگی اسپین-مدار، با حرکت مداری برهم‌کنش می‌کند. چگالی انرژی ناهمسانگردی در کبالت با



شکل ۲۶. منحنی مغناطیدگی تکنیکی (یا حلقه پسماند). وادارندگی H_c ، میدان در جهت معکوسی است که B را به صفر کاهش می دهد؛ در همین ارتباط وادارندگی H_{ci} مغناطیدگی M یا $B - H$ را به صفر کاهش می دهد. پسماند B_r مقدار B در $H = 0$ است. القای اشباعی B_s حد $B - H$ در H بزرگ و مغناطیدگی اشباعی $M_s = B_s / 4\pi$ است. در SI، محور قائم $B = \mu_0 (H + M)$ است.

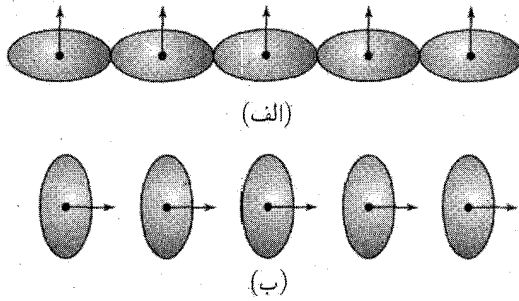


شکل ۲۷. منحنیهای مغناطیدگی برای تک بلورهای آهن، نیکل، و کبالت. از منحنیهای مربوط به آهن می بینیم که جهت‌های $[100]$ ، $[110]$ و $[111]$ جهت‌های آسان مغناطش و جهت‌های $[111]$ جهت‌های دشوارند. میدان اعمال شده B_a است.

رابطه زیر داده می شود

$$U_K = K'_1 \sin^2 \theta + K'_2 \sin^4 \theta \quad (53)$$

که در آن θ زاویه ای است که مغناطیدگی با محور ششگوشی می سازد. در دمای اتاق $K'_1 = 4.1 \times 10^6 \text{ erg/cm}^3$ ؛
 و $K'_2 = 1.0 \times 10^6 \text{ erg/cm}^3$.



شکل ۲۸. بی تقارنی همپوشانی توزیعیهای الکترونی مربوط به یونهای مجاور سازوکاری برای ناهمسانگردی مغناطوبلورین فراهم می‌کند. توزیع بار به دلیل برهم‌کنش اسپین-مدار، کره‌وار است نه کروی. بی تقارنی به جهت اسپین وابسته است، به این‌گونه که چرخش جهت‌های اسپینی نسبت به محورهای بلور، انرژی تبدیلی و انرژی برهم‌کنش الکتروستاتیکی بین توزیعیهای بار روی زوجهای اتمی را تغییر می‌دهد. این اثرها، هر دو موجب بروز انرژی ناهمسانگردی می‌شوند. انرژی در (الف) با انرژی در (ب) یکسان نیست.

آهن یک بلور مکعبی است، و یالهای مکعب جهت‌های آسان مغناطیدگی‌اند. برای نمایش انرژی ناهمسانگردی بلوری از آهن که در یک جهت اختیاری با کسینوسهای هادی $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ و نسبت به یالهای مکعب مغناطیده شده باشد، تقارن مکعبی را به یاری می‌گیریم. عبارت مربوط به انرژی ناهمسانگردی باید توان زوجی از هر یک از α_i ها باشد مشروط بر آنکه دو انتهای مقابل هم بلور در راستای یک محور بلور از نظر مغناطیسی معادل هم باشند، و این عبارت باید تحت تعویض α_i ها با یکدیگر ناوردا باشد. ترکیب با پایینترین مرتبه‌ای که این دربایسته‌های تقارنی را برمی‌آورد $\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2$ است، ولی این عبارت با یک متحد است و اثرهای ناهمسانگردی را توصیف نمی‌کند. ترکیب بعدی از درجه چهارم است:

$$\alpha_1^2 \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_1^2 \alpha_3^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_1^2 \alpha_3^2$$

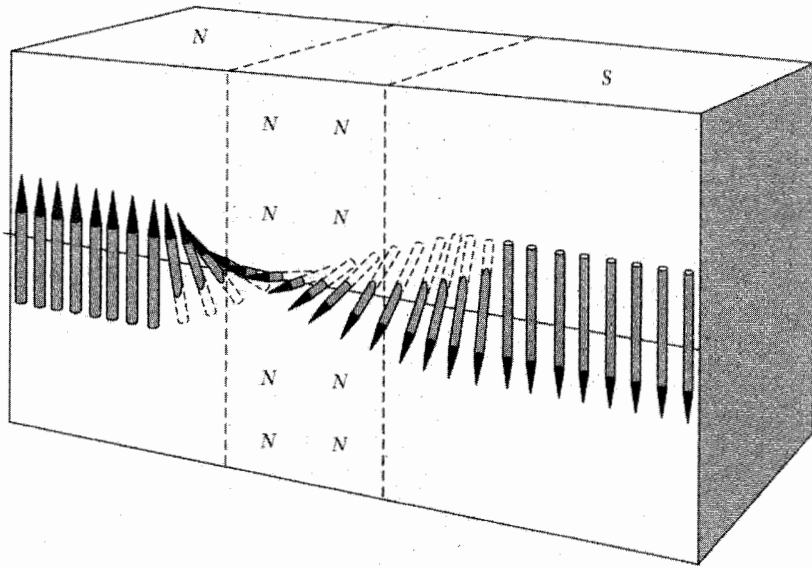
به این ترتیب

$$U_K = K_1(\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) + K_2 \alpha_1^2 \alpha_2^2 \alpha_3^2 \quad (54)$$

در دمای اتاق برای آهن $K_1 = 4.2 \times 10^5 \text{ erg/cm}^3$ و $K_2 = 1.5 \times 10^5 \text{ erg/cm}^3$.

ناحیه گذار بین حوزه‌ها

دیوار بلوخ در بلور لایه گذاری است که ناحیه‌های (حوزه‌های) مجاوری که در جهت‌های مختلف مغناطیده‌اند، از یکدیگر جدا می‌کند. تغییر کل در جهت اسپین بین حوزه‌ها با یک جهش ناپیوسته روی یک تک‌صفحه اتمی به وقوع نمی‌پیوندد، بلکه به صورتی تدریجی روی صفحه‌های اتمی زیادی روی می‌دهد (شکل ۲۹). وقتی این تغییر روی اسپینهای زیادی توزیع شود، انرژی تبدیلی پایین می‌آید. این رفتار را می‌توان با تعبیری کلاسیکی از معادله هاینبرگ (۶) درک کرد. به جای $\cos \varphi$ قرار می‌دهیم $\frac{1}{3} \varphi^2$ ، آنگاه $w_{ex} = JS^2 \varphi^2$



شکل ۲۹. ساختار دیوار بلوخ که حوزه‌ها را از هم جدا می‌کند. در آهن، ضخامت ناحیه گذار حدود 300° ثابت شبکه است.

انرژی تبدیلی بین دو اسپینی است که با یکدیگر زاویه کوچک φ می‌سازند. در اینجا J انتگرال تبادل و S عدد کوانتومی اسپینی است؛ w_{ex} با انرژی اسپینهای موازی سنجیده می‌شود.

اگر تغییر کل π در N گام مساوی روی دهد، زاویه بین اسپینهای همسایه π/N خواهد بود، و انرژی تبدیلی به ازای یک زوج اتم همسایه برابر است با $w_{ex} = JS^2(\pi/N)^2$. انرژی تبدیلی کل خطی شامل $N + 1$ اتم برابر است با

$$Nw_{ex} = JS^2\pi^2/N \quad (55)$$

اگر به علت انرژی ناهمسانگردی که در محدود کردن پهنای لایه گذار عمل می‌کند نبود، دیوار بدون محدودیت پهن می‌شد. اسپینهای موجود درون دیوار عمدتاً در راستاهای دور از محورهای مغناطیسی آسان قرار دارند، در نتیجه یک انرژی ناهمسانگردی وابسته به دیوار وجود دارد که تقریباً با پهنای دیوار متناسب است. دیواری موازی با وجه مکعب یک شبکه مکعبی ساده را در نظر بگیرید که حوزه‌های مغناطیده در جهت‌های مخالف را از هم جدا می‌کند. می‌خواهیم N ، تعداد صفحه‌های اتمی موجود در این دیوار، را تعیین کنیم. انرژی به ازای واحد مساحت دیوار برابر است با مجموع سهمهای انرژیهای تبدیلی و ناهمسانگردی:

$$\sigma_w = \sigma_{ex} + \sigma_{anis}$$

انرژی تبدیلی برای هر خط عمود بر دیوار، از اتمها تقریباً با رابطه (۵۵) داده می‌شود. در هر واحد

مساحت، تعداد $1/a^2$ از این خطها وجود دارد، که در آن a ثابت شبکه است. بنابراین به ازای واحد مساحت دیوار، $\sigma_{ex} = \pi^2 JS^2 / Na^2$.

انرژی ناهمسانگردی از مرتبه ثابت ناهمسانگردی ضربدر پهنا Na است، یعنی $\sigma_{anis} \approx KNa$ ؛

بنابراین

$$\sigma_w \approx (\pi^2 JS^2 / Na^2) + KNa \quad (56)$$

این انرژی در صورتی نسبت به N کمینه می شود که

$$\partial\sigma_w / \partial N = 0 = -(\pi^2 JS^2 / N^2 a^2) + Ka \quad (57)$$

یا

$$N = (\pi^2 JS^2 / Ka^3)^{1/2} \quad (58)$$

از نظر مرتبه بزرگی، در آن داریم $N \approx 300$.

انرژی کل دیوار به ازای واحد مساحت در این مدل برابر است با

$$\sigma_w = 2\pi(KJS^2/a)^{1/2} \quad (59)$$

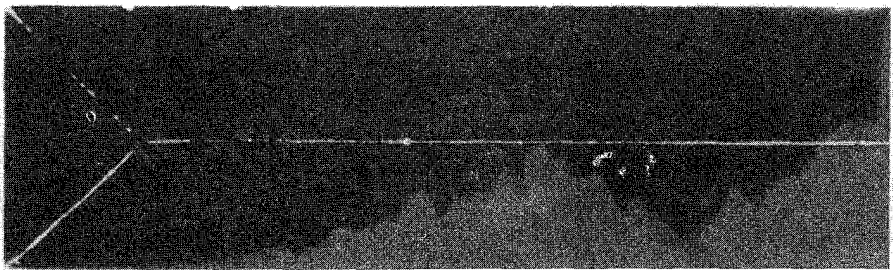
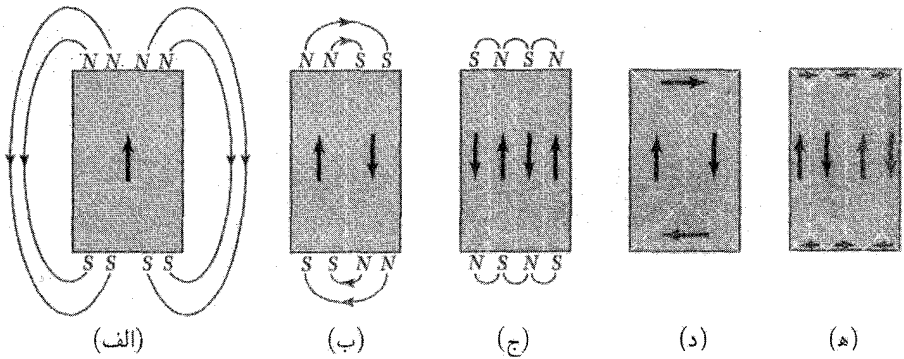
در آن $\sigma_w \approx 1 \text{ erg/cm}^2$. محاسبه دقیق برای دیوار 180° در صفحه (100) رابطه $\sigma_w = 2(2K_1 JS^2/a)^{1/2}$ را می دهد.

منشأ حوزه ها

لاتداو و لیفشیتز نشان دادند که ساختار حوزه های پیامدی طبیعی از سهمهای مختلف — تبادل، ناهمسانگردی، و مغناطیسی — در انرژی جسم فرومغناطیسی است.

فوتومیکرون گاشتهایی که از مرزهای حوزه با روش الگوی پودر مغناطیسی و با بررسیهای اپتیکی با به کارگیری دوران فاراده تهیه شده اند، شواهد مستقیمی برای ساختار حوزه های عرضه می کنند. در روش الگوی پودری که بپیر انجام داده است، قطره های از محلول معلق کلوتیدی از ماده فرومغناطیسی ریزشده ای نظیر مگنتیت، را روی سطح بلور فرومغناطیس قرار می دهند. ذرات کلوتیدی در محلول معلق، قویاً اطراف مرزهای بین حوزه ها متمرکز می شوند، زیرا در این مرزها میدانهای مغناطیسی موضعی قوی وجود دارند که ذرات مغناطیسی را جذب می کنند. کشف ترکیبهای فرومغناطیسی شفاف استفاده از دوران اپتیکی را هم در بررسیهای حوزه های افزایش داده است.

منشأ حوزه ها را می توانیم با در نظر گرفتن ساختارهایی که در شکل ۳۰ نشان داده شده اند، و هریک نمایانگر مقطعی از یک تک بلور فرومغناطیسی اند، درک کنیم. در (الف) یک تک حوزه داریم؛ پیامد تشکیل



شکل ۳۱. حوزه بستار در انتهای یک تاره تک بلور آهن. این وجه یک صفحه (۱۰۰) است؛ محور تاره [۰۰۱] است.

«قطبهای» مغناطیسی روی سطوح بلور آن است که انرژی مغناطیسی $\int B^2 dV$ ($1/\mu\pi$) در این پیکربندی مقدار بزرگی دارد. چگالی انرژی مغناطیسی در پیکربندی نشان داده شده از مرتبه $M_s^2 \simeq 10^6 \text{ erg/cm}^3$ است؛ در اینجا M_s مغناطیدگی اشباعی را نمایش می‌دهد و واحدها در CGS اند.

در (ب) انرژی مغناطیسی، با تقسیم بلور به دو حوزه که در جهت‌های مخالف مغناطیده‌اند، تقریباً نصف می‌شود. در (ج) با N حوزه، انرژی مغناطیسی به دلیل کاهش گسترش فضایی میدان، تقریباً به $1/N$ انرژی مغناطیسی (الف) کاهش می‌یابد.

در آرایشهای حوزه‌ای نظیر (د) و (ه)، انرژی مغناطیسی صفر است. در اینجا مرز حوزه‌هایی که در نزدیکی وجوه انتهایی بلور به شکل منشور مثلثی‌اند، با مغناطیدگی در حوزه‌های مستطیلی و مغناطیدگی در حوزه‌های بستار زوایای مساوی (45°) می‌سازند. مؤلفه عمود بر مرز مغناطیدگی در عرض مرز پیوسته است، و هیچ میدان مغناطیسی وابسته به مغناطیدگی وجود ندارد. مدار شار درون بلور کامل می‌شود — این موضوع موجب اتلاق واژه حوزه‌های بستار به حوزه‌های سطحی‌ای شده است، که مدار شار را به گونه شکل ۳۱ کامل می‌کنند.

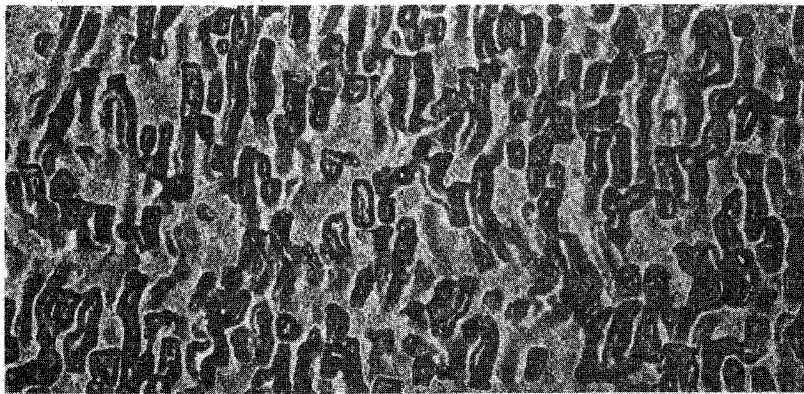
ساختارهای حوزه‌ای اغلب پیچیده‌تر از این مثالهای ساده‌اند، ولی منشأ ساختار حوزه‌ای همواره در

این امر نهفته است که امکان پایین آوردن انرژی دستگاه با رفتن از یک پیکربندی اشباع شده با انرژی مغناطیسی بالا به یک پیکربندی حوزه‌ای با انرژی پایینتر وجود دارد.

وادارندگی و پسماند

وادارندگی عبارت است از میدان مغناطیسی H_c لازم برای کاهش مغناطیدگی یا القای B به صفر (شکل ۲۶). گستره مقادیر وادارندگی بیش از هفت مرتبه بزرگی را در بر دارد؛ وادارندگی حساسترین ویژگی مواد فرومغناطیسی است که قابلیت کنترل دارد. وادارندگی ممکن است از 600 G در آهنربای دائمی بلندگوها (آلنیکو ۵) و 10000 G در آهنرباهای با پایداری زیاد ویژه (SmCo_5) تا 5 G در مبدل تجارتي توان Fe با ۴ درصد وزنی Si و 200 G در مبدل تپی (سوپرمالوی) تغییر کند. در مبدل، وادارندگی کم مورد نیاز است، زیرا وادارندگی کم به معنای اتلاف پسماند کم در هر چرخه عمل است. مواد با وادارندگی کم را نرم، و آنهایی که وادارندگی زیاد دارند سخت می‌خوانند، گرچه لزوماً ارتباط یک به یکی بین سختی مغناطیسی و سختی مکانیکی وجود ندارد.

وادارندگی با کاهش محتوای ناخالصی و نیز با برطرف کردن کرنشهای داخلی از طریق بازپخت (سردکردن آهسته) کاهش می‌یابد. آلیاژهای فرومغناطیسی آمورف ممکن است وادارندگی کم، اتلافهای پسماندی کم و تراوایی مغناطیسی داشته باشند. آلیاژهایی که مانند آلنیکو ۵ (شکل ۳۲) حاوی یک فاز تنه‌نشین شده‌اند، می‌توانند دارای وادارندگی زیادی باشند.



شکل ۳۲. میکروساختار آلنیکو ۵ در حالت بهینه آن به شکل آهنربای دائمی. ترکیب آلنیکو ۵، از نظر درصد وزنی عبارت است از 8Al ، 14Ni ، 24Co ، 3Cu ، و 51Fe . آلنیکو به عنوان آهنربای دائمی، یک دستگاه دوفازی است که در آن ذرات ریز یک فاز درون فاز دیگر جای گرفته‌اند. تنه‌نشین‌سازی در میدان مغناطیسی انجام می‌شود و ذرات به گونه‌ای سمت‌دهی می‌شوند که محور بلند آنها با جهت میدان موازی است. پهنای نشان داده شده $1\text{ }\mu\text{m}$ است.

مواد مغناطیسی نرم برای متمرکز ساختن و شکل دادن شار مغناطیسی، به صورتی که در موتورها، مولدها، مبدلها، و حسگرها مورد نیاز است، به کار می‌روند. مواد زیر از جمله مواد نرم مفیدند: فولادهای الکتریکی (که معمولاً به منظور افزایش مقاومت الکتریکی و کاهش ناهمسانگردی با چند درصد سیلیسیم آلیاژ می‌شوند)؛ آلیاژهای مختلف Fe-CO-Mn که از پرمالویها با ترکیب نزدیک به $Ni_{78}-Fe_{22}$ که دارای انرژی ناهمسانگردی نزدیک به صفر و مغناطوتنگش نزدیک به صفر است شروع می‌شوند؛ فریت‌های NiZn و MnZn؛ شیشه‌های فلزی که توسط انجماد سریع تولید می‌شوند. اتلاف پسماندی به ازای هر چرخه در شیشه فلزی تجارتي (METGLAS ۲۶۰۵S-۲) با ترکیب $Fe_{79}B_{13}Si_9$ ، بسیار پایینتر از بهترین فولاد سیلیسیمی دانه-سمتی است:

و اداریتگی زیاد مواد متشکل از دانه‌های بسیار کوچک یا پودرهای ریز، کاملاً درک شده است. یک ذره به اندازه کافی کوچک، با قطری کمتر از 10^{-5} یا 10^{-6} سانتیمتر، همواره به صورت یک تک‌حوزه به حالت اشباع مغناطیده است، زیرا تشکیل پیکربندی شار-بستار در آن از نظر انرژی نامطلوب است. در ذره تک‌حوزه‌ای امکان وقوع وارونی مغناطیدگی توسط فرایند جابه‌جایی مرزها، که معمولاً مستلزم میدانهای نسبتاً ضعیفی است، وجود ندارد. در عوض مغناطیدگی ذره باید یک‌جا دوران کند، فرایندی که ممکن است بسته به انرژی ناهمسانگردی ماده و ناهمسانگردی در شکل ذره، مستلزم میدانهای بزرگی باشد.

به لحاظ نظری، براساس دورانی که انرژی ناهمسانگردی بلورین با آن مخالفت می‌کند، انتظار می‌رود که واداریتگی ذرات ریز آهن حدود 50° گاوس باشد، که این رقم از مرتبه بزرگی مقدار مشاهده شده است. واداریتگیهای بالاتری برای ذرات آهن طویل‌شده گزارش شده است، در این شرایط، ناهمسانگردی شکلی انرژی و امغناطیدگی با دوران مخالفت می‌کند.

آلیاژهای فلزات خاکی کمیاب با Co, Fe, Mn و Ni دارای ناهمسانگردی بلوری K بسیار زیاد و در تناظر با آن واداریتگیهای بزرگ از مرتبه $2K/M$ اند. این آلیاژها، آهنرباهای دائمی به‌طور استثنایی خوبی‌اند. برای مثال ترکیب $SmCo_5$ دارای انرژی ناهمسانگردی $10^8 \text{ erg cm}^{-3} \times 1.1$ معادل با واداریتگی $2K/M$ برابر با 290 kG ($29T$) است. آهنرباهای $Nd_2Fe_{14}B$ حاصل‌ضربهای انرژی به بزرگی 50 MG Oe دارند، که از همه آهنرباهای دیگری که به صورت تجارتي در دسترس‌اند بیشتر است.

ذرات تک‌حوزه

کاربستهای صنعتی و تجارتي عمده فرومغناطیس در قطعات ضبط مغناطیسی است که در آنها مواد مغناطیسی به شکل ذرات یا ناحیه‌های تک‌حوزه‌اند. بهای کل تولید قطعات مغناطیسی برای ضبط ممکن

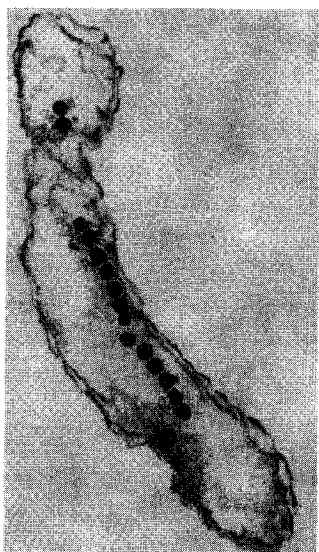
است با بهای کل تولید قطعات نیمرسانا و بسیار بیش از بهای تولید قطعات ابررسانا قابل مقایسه باشد. مورد آخر به دلیل دماهای بحرانی پایین، در مقایسه با دماهای کوری مغناطیسی، کاربرد کمتری دارد. قطعات ضبط مغناطیسی یا حافظه‌ها، در رایانه‌ها نوعاً به صورت دیسکهای سخت، و در دستگاههای ضبط دیداری و شنیداری به صورت نوارند.

ذره تک‌حوزه ایده‌آل، ذره ریز معمولاً طولی است که گشتاور مغناطیسی آن به سوی یک سر ذره یا سر دیگر آن است. این سمتگیریهای متفاوت را می‌توان با N و S ؛ یا با $+$ و $-$ ؛ و در ضبط رقمی (دیجیتال) با 0 و 1 مشخص کرد. برای آنکه ذره فرومغناطیس ویژگیهای رقمی داشته باشد، باید به اندازه کافی ریز باشد، نوعاً از 10 nm تا 100 nm ، به گونه‌ای که تنها یک حوزه درون آن موجود باشد. اگر ذره ریز، طول (سوزنی شکل) یا دارای تقارن بلوری تک‌محوری باشد، تنها دو مقدار برای گشتاور مغناطیسی تک‌حوزه آن مجاز خواهد بود و این همان چیزی است که برای ویژگیهای رقمی مورد نیاز است. نخستین ماده ضبط‌کننده موفق $\tau\text{-Fe}_2\text{O}_3$ سوزنی با نسبت طول به عرض حدود 5 به 1 ؛ وادارندگی نزدیک به 200 Oe و طولی کوچکتر از $1\text{ }\mu\text{m}$ بود؛ دی‌اکسیدکرم CrO_2 به شکل بسیار سوزنی (20 به 1) با وادارندگی نزدیک به 500 Oe اساساً مادهٔ بهتری است.

طول‌شدگی مؤثر را می‌توان از کره‌ها، با ساختن زنجیری تسبیح‌مانند به دست آورد. مجموعه‌ای از چنین زنجیرها یا مجموعه‌ای از ذره‌های تک‌حوزهٔ طول‌شده، به شرط آنکه هر واحد آن گشتاور مغناطیسی ثابتی داشته باشد، از خود ویژگی ابرپارامغناطیس نشان می‌دهد. اگر μ گشتاور مغناطیسی در میدان مغناطیسی B باشد، آنگاه اگر ذرات درون مایعی غوطه‌ور شوند، به گونه‌ای که هر یک بتوانند آزادانه به صورت یک واحد بچرخند، مغناطیدگی خالص مجموعه، از قانون کوری-بریلوئن-لاتزون فصل ۱۱ پیروی خواهد کرد. اگر این ذره‌ها در جامد یخ بزنند، پس از حذف میدان اعمال‌شده، مغناطیدگی پسماند وجود خواهد داشت (شکل ۲۶).

ژئومغناطیس و بیومغناطیس

ویژگیهای فرومغناطیسی تک‌حوزه‌ای در صخره‌های رسوبی، از نظر زمین‌شناسی اهمیت زیادی دارند، زیرا این صخره‌ها در مغناطیدگی پسماندشان حافظه‌ای از جهت میدان مغناطیسی زمین در زمان تشکیل خود، و در نتیجه از موقعیت جغرافیایی صخره‌ها در آن عصر، نگه داشته‌اند. این ضبط مغناطیسی شاید مهمترین شالودهٔ نظریهٔ رانش قاره‌هاست. همه‌ساله، لایه‌هایی از رسوبات در بستر رودخانه‌ها ته‌نشین می‌شوند، لایه‌هایی که ممکن است برخی ویژگیهای مغناطیسی را به شکل تک‌حوزه در خود نگه دارند. این اثر دست‌کم 500 میلیون سال از زمان زمین‌شناسی باقی می‌ماند و می‌تواند خبر دهد که در زمان معین در کدام نقطه روی زمین ته‌نشست رسوب کرده است. شارش‌گدازه‌ها نیز جهت میدان مغناطیسی زمین را نشان می‌دهد. تغییر مغناطیدگی از یک لایه به لایهٔ دیگر، اطلاعات تاریخی ارزنده‌ای در خصوص رانش صفحات



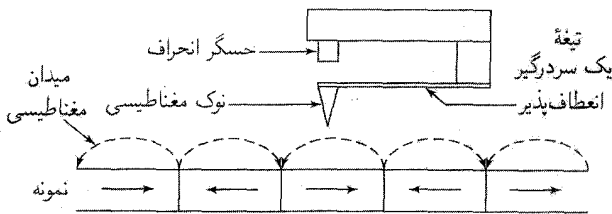
شکل ۳۳. مقطع نازکی از یاختهٔ باکتری دارای مغناطوتاکسی، که زنجیری از ذره‌های ۵۰ nm از Fe_3O_4 را نشان می‌دهد.

قاره‌ای روی سطح زمین به دست می‌دهد. اطلاعات پالئومغناطیسی (مغناطودیرین) از شالوده‌های شاخه‌ای از زمین‌شناسی به نام تکتونیک است. این اکتشاف وابسته (برونه^۱ ۱۹۰۶) که جهت میدان مغناطیسی زمین نیز خود ممکن است وارونی داشته باشد. یعنی همان اثری که در نظریهٔ دینامیکی استاندارد برای خاصیت مغناطیسی مطرح می‌شود، باعث آن شده که تفسیر اصلی ضبط‌های مغناطیسی یادشده دشوارتر و یا هیجان‌انگیزتر شود. وارونی جهت میدان مغناطیسی زمین هر 1×10^4 تا 25×10^6 سال، یک بار صورت می‌گیرد. این وارونی، در زمان وقوع نسبتاً ناگهانی است.

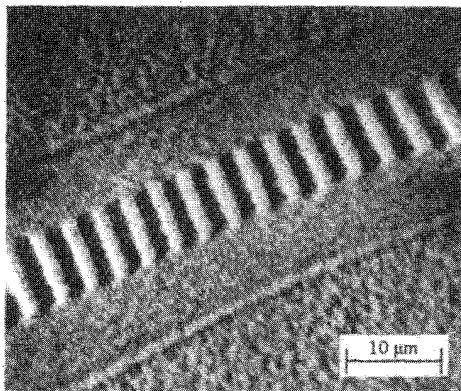
ذره‌های ریز تک‌حوزه، غالباً از جنس مگنتیت Fe_3O_4 ، حتی در زیست‌شناسی هم اهمیت دارند. یک اثر جهت‌یابنده، به نام مغناطوتاکسی، احتمالاً همراه با یک سامانهٔ راهنمای نجومی، حرکت باکتریها، مهاجرت پرندگان، و حرکت کبوترهای جلد و زنبورها را کنترل می‌کند. این اثر از برهم‌کنش ذرهٔ تک‌حوزه (با خوشه‌ای از چنین ذره‌هایی، شکل ۳۳)، درون اندام با میدان مغناطیسی خارجی مربوط به زمین ناشی می‌شود.

میکروسکوپی نیروی مغناطیسی

موفقیت میکروسکوپ تونلی روبشی (STM)، انگیزه‌ای شد برای ساخت قطعات گمانه‌ای روبشی مرتبط با آن، که از مؤثرترین آنها میکروسکوپ نیروی مغناطیسی روبشی است. نوک تیز یک مادهٔ مغناطیسی نظیر نیکل روی تیغهٔ یک سردگیر (شکل ۳۴) نصب می‌شود. ایده‌آلی که هنوز به دست نیامده آن است که این



شکل ۳۴. مفهوم اساسی میکروسکوپ نیروی مغناطیسی. از یک نوک مغناطیسی که بر تیغه یک سردرگیر نصب شده است، برای آشکارسازی میدان مغناطیسی حاصل از ناحیه‌های با مغناطیدگی دوره‌ای در صفحه نمونه استفاده می‌شود.



شکل ۳۵. مغناطیدگی نوار آزمونی در صفحه دیسک آلیاژ Co، در بینتهای $2\mu\text{m}$ ، به گونه‌ای که توسط MFM نزدیک به صفحه دیسک در بالای آن آشکار شده است.

نوک، ذره تک‌حوزه باشد. نیروهایی، از نمونه مغناطیسی بر نوک وارد می‌شود و در آن تغییری نظیر انحراف در تیغه یک سردرگیر ایجاد می‌کند، و رویش نمونه، نسبت به نوک، تصویری ایجاد می‌کند. میکروسکوپ نیروی مغناطیسی (MFM)، تنها روش تصویرگیری مغناطیسی است که می‌تواند با آماده‌سازی اندک سطح، تفکیک بالایی (از 10^0 تا 10^3 nm) ارائه دهد. برای مثال می‌توان شار مغناطیسی‌ای که در محل تقاطع یک دیواره بلوخ با سطح، از سطح خارج می‌شود را مشاهده و تصویربرداری کرد (شکل ۲۹). یک کاربرد مهم این روش در بررسی محیط‌های ضبط‌کننده مغناطیسی است—شکل ۳۵ علامت مغناطیسی مربوط به یک نقش آزمون شامل بینتهای $2\mu\text{m}$ مغناطیده در صفحه یک دیسک از آلیاژ Co را نشان می‌دهد، آنچه در عکس نشان داده شده است، مؤلفه موازی میدان است که نوک حسگر تحت تأثیر آن قرار گرفته است.

چکیده

(برحسب CGS)

- در تقریب میدان میانگین، پذیرفتاری فرومغناطیسها در بالای دمای کوری دارای شکل $\chi = C/(T - T_c)$ است.
- در تقریب میدان میانگین، میدان مغناطیسی مؤثری که برگشتاور مغناطیسی در فرومغناطیس اثر می‌کند برابر با $\mathbf{B}_a + \lambda \mathbf{M}$ است، که در آن $\lambda = T_c/C$ و \mathbf{B}_a میدان مغناطیسی اعمال شده است.
- مگنونها برانگیختگیهای بنیادی در فرومغناطیس اند. رابطه پاشیدگی آنها در میدان مغناطیسی خارج صفر برای $1 \ll ka$ به صورت $\hbar\omega \approx Jk^2 a^2$ است. برانگیختگی گرمایی مگنونها در دماهای پایین به یک ظرفیت گرمایی و یک تغییر نسبی در مغناطیدگی منجر می‌شود، که هر دو با $T^{3/2}$ متناسب اند.
- در پادفرومغناطیس، دو شبکه اسپینی برابر ولی پادموازی اند. در فری مغناطیس، دو شبکه پادموازی اند، ولی گشتاور مغناطیسی یکی از گشتاور مغناطیسی دیگر بزرگتر است.
- در پادفرومغناطیس، پذیرفتاری در بالای دمای نیل به شکل $\chi = 2C/(T + \theta)$ است.
- رابطه پاشیدگی مگنونها در پادفرومغناطیس به صورت $\hbar\omega \approx Jka$ است. در دماهای پایین، برانگیختگی گرمایی مگنونها جمله‌ای برحسب T^3 در ظرفیت گرمایی به وجود می‌آورد. این جمله علاوه بر جمله T^3 مربوط به فونونهاست.
- دیوار بلوخ، حوزه‌هایی که در جهت‌های گوناگون مغناطیده شده‌اند، از یکدیگر جدا می‌سازد. ضخامت دیوار در حدود $(J/Ka^3)^{1/2}$ برابر ثابت شبکه است، و انرژی آن در واحد سطح در حدود $(KJ/a)^{1/2}$ است، که در آن K چگالی انرژی ناهمسانگردی است.

مسائل

۱. رابطه پاشیدگی مگنونها. رابطه پاشیدگی مگنونها (۲۴) را برای اسپین S واقع بر شبکه مکعبی به دست آورید. راهنمایی: نخست نشان دهید که به جای (۱۸ الف) داریم

$$dS_{\rho}^x/dt = (2JS/\hbar)(\epsilon S_{\rho}^y - \sum_{\delta} S_{\rho+\delta}^y)$$

- که اتم مرکزی در ρ است و شش همسایه اول با شش بردار δ به آن متصل می‌شوند. برای معادلات dS_{ρ}^x/dt و dS_{ρ}^y/dt در پی پاسخهایی به صورت $\exp(ik \cdot \rho - i\omega t)$ باشید.
۲. ظرفیت گرمایی مگنونها. رابطه پاشیدگی تقریبی مگنونها، $\omega = Ak^2$ ، را به کار برید و جمله عمده در ظرفیت گرمایی فرومغناطیس سه‌بعدی را در دماهای پایین $k_B T \ll J$ به دست آورید. نتیجه برابر با

$(k_B T / \hbar A)^{3/2}$ به ازای واحد حجم است. تابع زتابی که در این نتیجه وارد می شود می توان به طور عددی برآورد کرد که در یانکه-آمده^۱ جدول بندی شده است.

۳. دمای نیل. در مدل دو زیر-شبهه ای برای پادفرومغناطیس، میدانهای مؤثر را به این صورت اختیار کنید

$$B_A = B_a - \mu M_B - \epsilon M_A; \quad B_B = B_a - \mu M_A - \epsilon M_B$$

نشان دهید که

$$\frac{\theta}{T_N} = \frac{\mu + \epsilon}{\mu - \epsilon}$$

۴. جفت شدگی مغناطوکشسان. چگالی انرژی کشسانی برحسب مؤلفه های معمولی e_{ij} کرنش، در بلور مکعبی (فصل ۳) به صورت زیر است

$$U_{el} = \frac{1}{2} C_{11}(e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2) + \frac{1}{2} C_{22}(e_{xy}^2 + e_{yz}^2 + e_{zx}^2) + C_{12}(e_{yy}e_{zz} + e_{xx}e_{zz} + e_{xx}e_{yy})$$

و جمله برتر در چگالی انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی با استفاده از رابطه (۵۴) به قرار زیر است

$$U_K = K_1(\alpha_x^2 \alpha_y^2 + \alpha_y^2 \alpha_z^2 + \alpha_z^2 \alpha_x^2)$$

جفت شدگی بین کرنش کشسان و جهت مغناطیدگی را می توان به طور صوری با اضافه کردن عبارتی به این شکل به چگالی انرژی کل به حساب آورد:

$$U_c = B_1(\alpha_x^2 e_{xx} + \alpha_y^2 e_{yy} + \alpha_z^2 e_{zz}) + B_2(\alpha_1 \alpha_2 e_{xy} + \alpha_2 \alpha_3 e_{yz} + \alpha_3 \alpha_1 e_{zx})$$

این عبارت از بستگی U_K به کرنش ناشی می شود؛ در اینجا B_1 و B_2 را ثابتهای جفت شدگی مغناطوکشسان می نامند. نشان دهید که انرژی کل هنگامی کمینه است که

$$e_{ii} = \frac{B_1 [C_{12} - \alpha_i^2 (C_{11} + 2C_{12})]}{[(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})]}, \quad e_{ij} = -\frac{B_2 \alpha_i \alpha_j}{C_{22}} \quad (i \neq j)$$

این رابطه، منشأ مغناطوتنگش، یعنی تغییر طول را در اثر مغناطش بیان می کند.

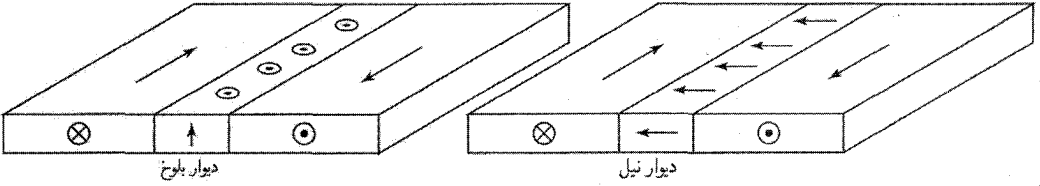
۵. نیروی وادارنده ذره کوچک. (الف) یک ذره تک حوزه ای کروی کوچک از فرومغناطیس تک محوری را در نظر بگیرید. نشان دهید میدان وارونه ای که در طول این محور برای معکوس کردن مغناطیدگی لازم است در CGS برابر است با $B_a = 2K/M_s$. نیروی وادارنده مشاهده شده در ذره های تک حوزه ای

دارای همین بزرگی است. چگالی انرژی ناهمسانگردی را به صورت $U_K = K \sin^2 \theta$ و چگالی انرژی برهم‌کنش با میدان خارجی H را به صورت $U_M = -B_a M \cos \theta$ منظور کنید؛ در اینجا θ زاویه بین \mathbf{M} و \mathbf{B}_a است. راهنمایی: این انرژیها را برای زاویه‌های کوچک حول $\theta = \pi$ بسط دهید، و مقداری برای B_a به دست آورید که به ازای آن $U_K + U_M$ در نزدیکی $\theta = \pi$ دارای کمینه نیست. (ب) نشان دهید انرژی مغناطیسی کره اشباع‌شده‌ای به قطر d در حدود $M_s^2 d^3$ است. آرایشی که انرژی مغناطیسی آن به مراتب کمتر است دارای تک‌دیواری در صفحه استوایی است. انرژی این دیوار حوزه‌ای برابر با $\pi \sigma_w d^2 / 4$ است که در آن σ_w انرژی دیوار به ازای واحد سطح است. برای کبالت، با استفاده از مقدار JS^2/a برای آهن، شعاع بحرانی‌ای را که برآورد کنید که به ازای شعاعهای کوچکتر از آن ذرات به صورت تک‌حوزه پایدارند.

۶. مغناطیدگی اشباعی در نزدیکی T_c . نشان دهید که در تقریب میدان میانگین، مغناطیدگی اشباعی درست در پایین دمای کوری دارای وابستگی دمایی برتر $(T_c - T)^{1/2}$ است. فرض کنید اسپین برابر با $\frac{1}{2}$ است. این نتیجه مانند نتیجه‌ای است که در فصل ۱۶ برای گذار مرتبه دوم در بلور فروالکتریک به دست می‌آید. داده‌های تجربی برای فرومغناطیسها (جدول ۱) دلالت بر آن دارد که این نمایه ۳۳٪ نزدیکتر است.

۷. دیوار نیل. در فیلمهای نازک از ماده با انرژی ناهمسانگردی بلوری ناچیز، نظیر پرمالوی، جهت تغییر مغناطش در یک دیوار حوزه از جهت مربوط به دیوار بلوخ (شکل ۳۶) به جهت مربوط به دیوار نیل تبدیل می‌شود. تقاطع دیوار بلوخ با سطح فیلم ناحیه‌ای سطحی با انرژی وامغناطش زیاد ایجاد می‌کند. در دیوار نیل این سهم انرژی وامغناطش وجود ندارد ولی سهمی از انرژی وامغناطش در کل حجم دیوار وجود خواهد داشت. وقتی فیلم به اندازه کافی نازک باشد، انرژی دیوار نیل مطلوب می‌شود. منحنیهای انرژی دیوار نیل در ماده حجیم با انرژی ناهمسانگردی بلوری ناچیز را در نظر بگیرید. در اینجا چگالی انرژی دیوار دارای سهمی از انرژی وامغناطش است. با استدلالی کیفی نظیر رابطه (۵۶) نشان دهید که $\sigma_w \approx (\pi^2 JS^2 / Na^2) + (2\pi M_s^2 Na)$ را به گونه‌ای پیدا کنید که برای آن σ_w کمینه باشد. مرتبه بزرگی σ_w را به ازای مقادیر نوعی J ، M_s ، و a برآورد کنید.

۸. مغناطومقاومت غول‌آسا، در فلز فرومغناطیس، رسانندگی σ_p برای الکترونیهای که گشتاور مغناطیسی‌شان به موازات مغناطش سمتگیری شده، نوعاً بزرگتر از σ_a برای الکترونیهای پادمازای با مغناطش است. رسانای فرومغناطیسی را در نظر بگیرید که شامل دو ناحیه مجزا با ابعاد یکسان، به‌طور متوالی، باشد که مغناطش آنها را بشود به‌طور مستقل کنترل کرد. الکترونیهای با اسپین معلوم نخست در یک ناحیه و سپس در ناحیه دیگر شارش می‌کنند. مشاهده می‌شود که وقتی هر دو مغناطش به سوی بالا باشند، مقاومت $R_{\uparrow\uparrow}$ کمتر از مقاومت $R_{\uparrow\downarrow}$ در شرایطی است که دو مغناطش در خلاف جهت هم باشند. این تغییر مقاومت به‌ازای



شکل ۳۶. دیوار بلوخ و دیوار نیل در فیلم نازک. مغناطیدگی در دیوار بلوخ عمود بر صفحه فیلم است و بر انرژی دیوار، یک انرژی وامغناطیدگی در حدود $M_s^2 \delta d$ ، به ازای واحد طول دیوار، می‌افزاید که در آن δ پهنای دیوار و d ضخامت فیلم است. در دیوار نیل مغناطیدگی موازی سطح است؛ اگر $d \ll \delta$ ، مقدار ناچیزی بر انرژی دیوار افزوده می‌شود. انرژی افزوده شده بر دیوار نیل، وقتی $d \gg \delta$ در مسئله ۷ بحث می‌شود.

$\sigma_p / \sigma_a \gg 1$ می‌تواند بزرگ باشد، این پدیده را مغناطومقاومت غول‌آسا (GMR) می‌نامند. میدان مغناطیسی خارجی کوچک، از طریق سمت‌دهی مجدد به مغناطش لایه دوم، می‌تواند مقاومت را از $R_{\uparrow\downarrow}$ به $R_{\uparrow\uparrow}$ تبدیل کند. از این اثر به‌طور روزافزون در کاربردهای انبارش مغناطیسی از قبیل بیت مغناطیسی برای خواندن دیسک‌های سخت استفاده می‌شود. نسبت مغناطومقاومت غول‌آسا به این صورت تعریف می‌شود:

$$GMR = \frac{R_{\uparrow\downarrow} - R_{\uparrow\uparrow}}{R_{\uparrow\uparrow}}$$

(الف) نشان دهید که اگر هیچ پراکندگی جهش اسپینی‌ای برای الکترونهای رسانشی موجود نباشد، داریم

$$GMR = (\sigma_p / \sigma_a + \sigma_a / \sigma_p - 2) / 4$$

(راهنمایی: الکترونهای رسانشی با اسپین بالا و اسپین پایین را به‌صورت دو کانال رسانشی مستقل از هم، به‌طور موازی، بررسی کنید.) (ب) از نظر فیزیکی توضیح دهید که چرا وقتی $\sigma_a \rightarrow 0$ ، مقاومت در بیکربندی مغناطیسی $\uparrow\downarrow$ بینهایت است.

تشدید مغناطیسی

در این فصل آثار مغناطیسی دینامیکی مربوط به تکانه زاویه‌ای اسپینی هسته‌ها و الکترون‌ها را مورد بحث قرار می‌دهیم. پدیده‌های اصلی را غالباً در نوشته‌ها با حروف اول آنها مشخص می‌کنند، مانند

NMR: تشدید مغناطیسی هسته‌ای

NQR: تشدید چهارقطبی هسته‌ای

EPR یا ESR: تشدید پارامغناطیسی الکترون یا تشدید اسپینی (شکل ۱)

FMR: تشدید فرومغناطیسی

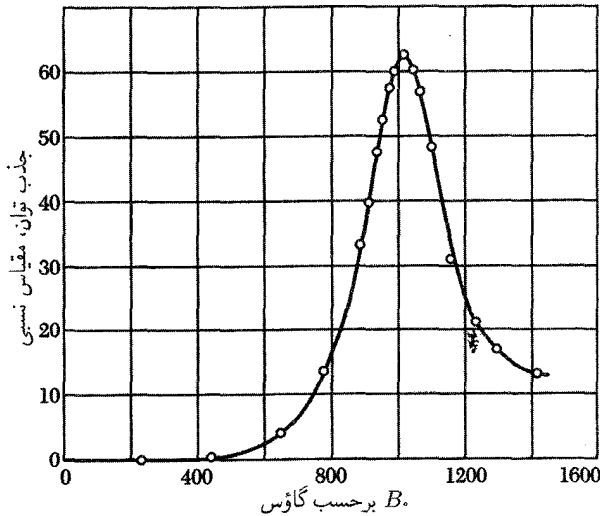
SWR: تشدید موج اسپینی (لایه‌های فرومغناطیسی)

AFMR: تشدید پادفرومغناطیسی

CESR: تشدید اسپینی الکترون رسانش

اطلاعاتی که بررسی‌های تشدید در مورد جامدات یه‌دست می‌دهند، می‌توان به صورت زیر رده‌بندی کرد:

• ساختار الکترونی نقص منفرد، که از طریق ساختار ریزجذب آشکار می‌شود،



شکل ۱. جذب ناشی از تشدید اسپینی الکترون در MnSO_4 در 298K در 2.75GHz .

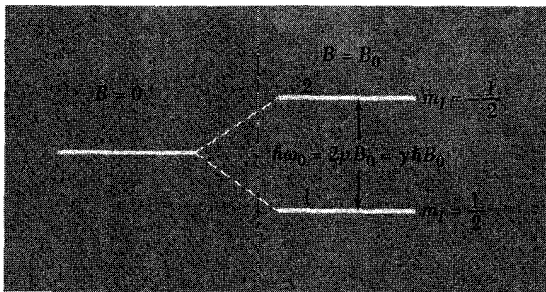
- حرکت اسپین یا محیط اطراف، که با استفاده از تغییرات پهنای خط آشکار می‌شود.
- میدانهای مغناطیسی داخلی‌ای که بر اسپین اثر می‌کنند، که با استفاده از مکان خط تشدید آشکار می‌شود (انتقال شیمیایی؛ انتقال نایت).
- برانگیختگیهای اسپینی جمعی

بهتر است NMR را به صورت مبنایی برای تشریح خلاصه آزمایشهای دیگر تشدید مورد بحث قرار دهیم. بیشترین کاربرد NMR در شیمی آلی و بیوشیمی بوده است، که NMR ابزار مؤثری برای شناسایی و تعیین ساختار مولکولهای پیچیده فراهم می‌کند. این موفقیت مرهون تفکیک فوق‌العاده زیادی است که در مایعهای دیامغناطیسی دستیافتنی است. یک کاربرد پزشکی اساسی NMR عبارت است از تصویرنگاری تشدید مغناطیسی (MRI)، که تفکیک سه‌بعدی مربوط به رشدهای ناهنجار، پیکربندیها، و واکنشها در تمامی بدن را امکان‌پذیر می‌سازد.

تشدید مغناطیسی هسته

هسته‌ای که دارای گشتاور مغناطیسی μ و تکانه زاویه‌ای $\hbar I$ است در نظر بگیرید. این دو کمیت موازی‌اند، و می‌توان نوشت

$$\mu = \gamma \hbar I \quad (1)$$



شکل ۲. شکافتگی تراز انرژی هسته با اسپین $I = \frac{1}{2}$ در میدان مغناطیسی استاتیکی B_0 .

نسبت مغناطوژیبریک γ ثابت است. بنابر قرارداد I نمایشگر تکانه زاویه‌ای هسته است که برحسب واحد \hbar اندازه‌گیری می‌شود.

انرژی برهم‌کنش با میدان مغناطیسی اعمال شده برابر است با

$$U = -\mu \cdot \mathbf{B}_a \quad (۲)$$

اگر $\mathbf{B}_a = B_0 \hat{z}$ ، آنگاه

$$U = -\mu_z B_0 = -\gamma \hbar B_0 I_z \quad (۳)$$

مقادیر مجاز I_z عبارت‌اند از $I, I - 1, \dots, -I$ و $m_I = I, I - 1, \dots, -I$ و $m_I = \pm \frac{1}{2}$ به شکل ۲

هسته‌ای با $I = \frac{1}{2}$ در میدان مغناطیسی دارای دو تراز انرژی است، که مانند شکل ۲ به $m_I = \pm \frac{1}{2}$ مربوط می‌شوند. اگر $\hbar\omega_0$ نمایشگر اختلاف انرژی بین این دو تراز باشد، آنگاه $\hbar\omega_0 = \gamma \hbar B_0$ یا

$$\omega_0 = \gamma B_0 \quad (۴)$$

این رابطه شرط اساسی جذب ناشی از تشدید مغناطیسی است.

برای پروتون^۱، $\gamma = 2.675 \times 10^8 \text{ s}^{-1} \text{ G}^{-1} = 2.675 \times 10^8 \text{ T}^{-1}$ ، در نتیجه

$$\nu(\text{MHz}) = 0.4258 B_0 (\text{kG}) = 0.4258 B_0 (\text{T}) \quad (۴\text{الف})$$

که در آن ν بسامد است. یک تسلا دقیقاً 10^4 گاوس است. داده‌های مغناطیسی برای هسته‌های برگزیده در جدول ۱ ارائه شده‌اند. برای اسپین الکترون

$$\nu(\text{GHz}) = 0.28 B_0 (\text{kG}) = 0.28 B_0 (\text{T}) \quad (۴\text{ب})$$

۱. گشتاور مغناطیسی μ_p پروتون برابر است با $1.4106 \times 10^{-23} \text{ erg G}^{-1}$ یا $1.4106 \times 10^{-26} \text{ JT}^{-1}$ و $\gamma = 2\mu_p/\hbar$. مگنتون هسته‌ای μ_n به صورت $e\hbar/2M_p c$ تعریف می‌شود و برابر است با $5.0509 \times 10^{-27} \text{ erg G}^{-1}$ یا $5.0509 \times 10^{-27} \text{ JT}^{-1}$ ؛ در نتیجه $2.793 \mu_p$ برابر مگنتون هسته‌ای است.

معادلات حرکت

آهنگ تغییر تکانه زاویه‌ای یک دستگاه برابر با گشتاوری است که بر آن اعمال می‌شود. گشتاور وارد برگشتاور مغناطیسی μ در میدان مغناطیسی \mathbf{B} برابر است با $\mu \times \mathbf{B}$ ، در نتیجه این معادلهٔ زیروسکوپی را داریم

$$\hbar d\mathbf{I}/dt = \mu \times \mathbf{B}_a \quad (5)$$

یا

$$d\mu/dt = \gamma \mu \times \mathbf{B}_a \quad (6)$$

مغناطیدگی هسته‌ای \mathbf{M} برابر است با $\sum \mu_i$ روی تمام هسته‌های موجود در واحد حجم. اگر تنها یک تک‌ایزوتوپ مهم باشد، فقط یک مقدار برای γ در نظر می‌گیریم، در نتیجه

$$d\mathbf{M}/dt = \gamma \mathbf{M} \times \mathbf{B}_a \quad (7)$$

هسته‌ها را در میدان استاتیکی $\mathbf{B}_a = B_0 \hat{z}$ قرار می‌دهیم. در تعادل گرمایی و دمای T مغناطیدگی در امتداد \hat{z} خواهد بود:

$$M_x = 0; \quad M_y = 0; \quad M_z = M_0 = \chi_0 B_0 = CB_0/T \quad (8)$$

که در آن پذیرفتاری برابر χ_0 و ثابت کوری $C = N\mu^2/3k_B$ ، مانند فصل ۱۱ است. مغناطیدگی دستگاهی با اسپینهای $\frac{1}{2}$ به اختلاف جمعیت تراز پایینی و بالایی، $N_1 - N_2$ ، در شکل ۲ مربوط می‌شود: $M_z = (N_1 - N_2)\mu$ ، که در آن N ها برای واحد حجم تعریف می‌شود. نسبت جمعیتها در تعادل گرمایی درست با ضریب بولتزمن برای اختلاف انرژی $2\mu B_0$ داده می‌شود.

$$(N_2/N_1)_0 = \exp(-2\mu B_0/k_B T) \quad (9)$$

مغناطیدگی تعادل برابر است با $M_0 = N\mu \tanh(\mu B/k_B T)$. هنگامی که مؤلفهٔ M_z مغناطیدگی در تعادل گرمایی نیست، فرض می‌کنیم که با آهنگی متناسب با انحراف از مقدار تعادل M_0 به حالت تعادل نزدیک می‌شود:

$$\frac{dM_z}{dt} = \frac{M_0 - M_z}{T_1} \quad (10)$$

در نمادگذاری استاندارد، T_1 را زمان واهلش طولی یا زمان واهلش اسپین-شبکه می‌نامند. اگر در $t = 0$ نمونهٔ نامغناطیده را در میدان مغناطیسی $B_0 \hat{z}$ قرار دهیم، مغناطیدگی از مقدار اولیهٔ $M_z = 0$ به مقدار نهایی $M_z = M_0$ افزایش می‌یابد. قبل و درست بعد از قرار دادن نمونه در این

میدان، جمعیت‌های N_1 و N_2 برابرند. این امر در تعادل گرمایی در میدان مغناطیسی صفر صادق است. برای برقراری توزیع تعادل جدید در میدان B_0 لازم است بعضی از اسپین‌ها معکوس شوند. با انتگرال‌گیری از (۱۰) داریم:

$$\int_0^{M_z} \frac{dM_z}{M_0 - M_z} = \frac{1}{T_1} \int_0^t dt \quad (11)$$

$$\log \frac{M_0}{M_0 - M_z} = \frac{t}{T_1}; \quad M_z(t) = M_0 [1 - \exp(-t/T_1)] \quad (12)$$

که در شکل ۳ رسم شده است. وقتی M_z به مقدار تعادل جدید خود می‌رسد، انرژی مغناطیسی $-\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}_0$ کاهش می‌یابد.

فرایندهایی نوعی که مغناطیدگی از طریق آنها به حالت تعادل می‌رسد، در شکل ۴ نشان داده شده‌اند. برهم‌کنش غالب اسپین-شبکه یونهای پارامغناطیسی در بلورها از طریق سه فرایند اساسی (شکل ۴ ب) انجام می‌شود: مستقیم (گسیل یا جذب یک فونون)؛ رامان (پراکندگی یک فونون)؛ و اورباخ (مداخله یک حالت سوم). با به حساب آوردن رابطه (۱۰)، مؤلفه z معادله حرکت (۷) چنین می‌شود

$$\frac{dM_z}{dt} = \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{B}_0)_z + \frac{M_0 - M_z}{T_1} \quad (13 \text{ الف})$$

که در آن $(M_0 - M_z)/T_1$ یک جمله اضافی در معادله حرکت است. این جمله از برهم‌کنشهای اسپین-شبکه که در رابطه (۷) حضور ندارند، ناشی می‌شود. یعنی، \mathbf{M} علاوه بر حرکت تقدیمی حول میدان مغناطیسی، به مقدار تعادل M_0 واهلیده خواهد شد.

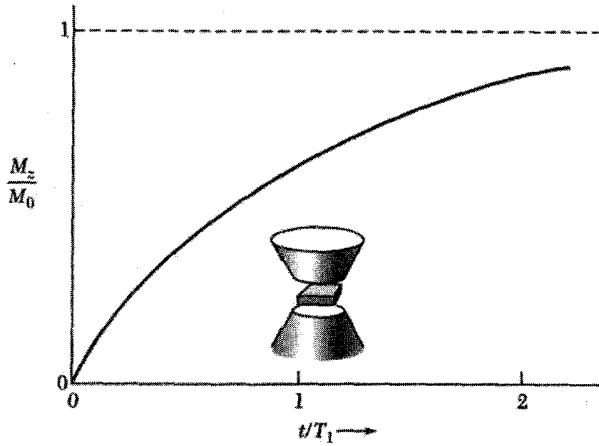
اگر مؤلفه عرضی مغناطیدگی M_x در میدان استاتیکی $B_0 \hat{z}$ صفر نباشد، M_x کاهش می‌یابد و صفر می‌شود. این امر در مورد M_y نیز به‌طور مشابه صادق است. کاهش به این علت رخ می‌دهد که در تعادل گرمایی مؤلفه‌های عرضی صفرند. برای واهلش عرضی می‌توان نوشت:

$$dM_x/dt = \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{B}_0)_x - M_x/T_2 \quad (13 \text{ ب})$$

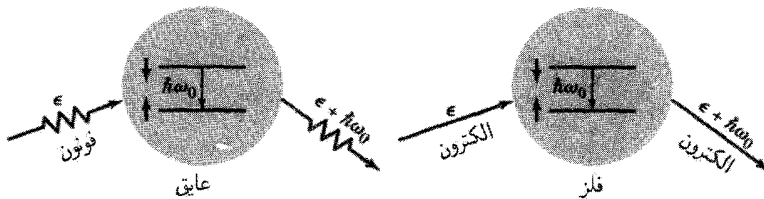
$$dM_y/dt = \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{B}_0)_y - M_y/T_2 \quad (13 \text{ ج})$$

که در آن T_2 را زمان واهلش عرضی می‌نامند.

اگر \mathbf{B}_0 در امتداد \hat{z} باشد، انرژی مغناطیسی $-\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}_0$ با تغییر M_x یا M_y تغییر نمی‌کند. برای واهلش M_x یا M_y نیازی به جاری شدن انرژی از دستگاه اسپینی به خارج نیست، در نتیجه ممکن است شرایطی که T_2 را تعیین می‌کند از شرایط مربوط به تعیین T_1 آسانتر باشد. بسته به شرایط موضعی، گاهی این دو زمان تقریباً با یکدیگر برابرند و گاهی $T_1 \gg T_2$.

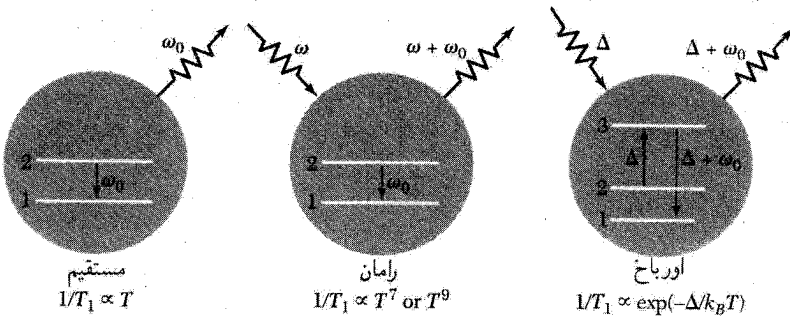


شکل ۳. در زمان $t = 0$ ، نمونه نامغناطیده، $M_z(0) = 0$ ، در میدان مغناطیسی استاتیکی B قرار داده می‌شود. مغناطیدگی نسبت به زمان زیاد می‌شود و به مقدار تعادل جدید $M_0 = \chi_0 B$ می‌رسد. این آزمایش زمان واهلش طولی T_1 را تعریف می‌کند. وقتی بخشی از جمعیت اسپینی به تراز پایینی می‌رود، چگالی انرژی مغناطیسی $-M \cdot B$ کاهش می‌یابد. مقدار مجانبی در $t \gg T_1$ برابر با $-M_0 B$ است. انرژی از دستگاه اسپینی به دستگاه ارتعاشات شبکه جریان می‌یابد؛ در نتیجه T_1 را زمان واهلش اسپین-شبکه نیز می‌نامند.

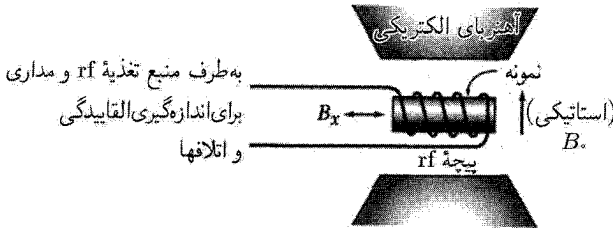


شکل ۴ الف. برخی فرایندهای مهم که در واهلش مغناطیدگی طولی در عایق یا فلز سهیم‌اند. برای عایق، فوتونی را نشان داده‌ایم که به گونه‌ی ناکشسان توسط دستگاه اسپینی پراکنده شده است. دستگاه اسپینی به حالتی با انرژی پایینتر می‌رود، و انرژی فوتون گسیل‌یافته به اندازه $\hbar\omega_0$ از انرژی فوتون جذب‌شده بیشتر است. برای فلز فرایند پراکندگی ناکشسان مشابهی را نشان داده‌ایم که در آن یک الکترون رسانش پراکنده شده است.

زمان T_2 مقیاسی است از زمانی که در طول آن تک‌تک گشتاورهایی که در M_x و M_y سهیم‌اند با یکدیگر هم‌فاز باقی می‌مانند. میدانهای مغناطیسی موضعی گوناگون در اسپینهای مختلف باعث می‌شوند که اسپینها حرکت تقدیمی را با بسامدهای متفاوت انجام دهند. اگر این اسپینها در آغاز دارای فاز مشترکی باشند، با گذشت زمان فازها کاتوره‌ای و مقادیر M_x و M_y صفر خواهند شد. T_2 را می‌توان زمان وافازی پنداشت.



شکل ۴ ب. واهلش اسپینی از ۱ → ۲، از طریق گسیل فونون، پراکندگی فونون، و فرایند دومرحله‌ای فونونی وابستگی دمایی زمان واهلش طولی T_1 برای چند فرایند نشان داده شده است.



شکل ۵. آرایش طرحوار آزمایشهای تشدید مغناطیسی.

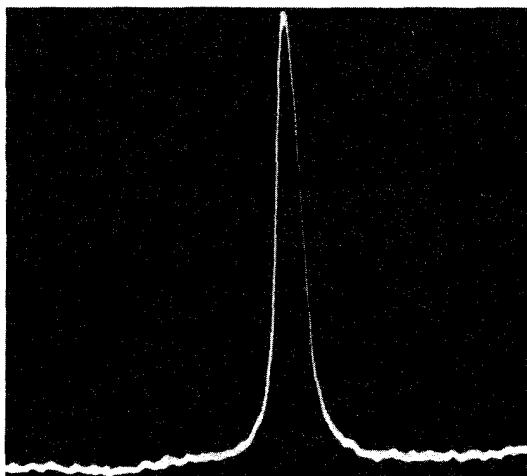
مجموعه معادلات (۱۳) را معادلات بلوخ می‌نامند. این معادلات نسبت به x ، y ، و z متقارن نیستند، زیرا دستگاه را با اعمال میدان مغناطیسی استاتیکی در امتداد \hat{z} به یک طرف حرکت داده‌ایم. در آزمایشها، معمولاً یک میدان مغناطیسی rf در امتداد محورهای \hat{x} یا \hat{y} اعمال می‌شود. ما بیشتر به رفتار مغناطیدگی در ترکیبی از میدانهای rf و استاتیکی، مانند شکل ۵، توجه داریم. معادلات بلوخ قابل قبول‌اند، ولی دقیق نیستند؛ این معادلات همه پدیده‌های اسپینی را، به‌ویژه در جامدات، توصیف نمی‌کنند.

بسامد حرکت تقدیمی آزاد دستگاه اسپینی را در میدان استاتیکی $\mathbf{B}_0 = B_0 \hat{z}$ با $M_z = M_0$ تعیین می‌کنیم. معادلات بلوخ به‌صورت زیر خلاصه می‌شوند

$$\frac{dM_x}{dt} = \gamma B_0 M_y - \frac{M_x}{T_r}; \quad \frac{dM_y}{dt} = -\gamma B_0 M_x - \frac{M_y}{T_r}; \quad \frac{dM_z}{dt} = 0 \quad (14)$$

در پی پاسخهای نوسانی میرا به شکل زیر هستیم

$$M_x = m \exp(-t/T') \cos \omega t; \quad M_y = -m \exp(-t/T') \sin \omega t \quad (15)$$



شکل ۶. جذب تشدید پروتون در آب.

با جایگذاری در رابطه (۱۴) برای معادله سمت چپ داریم

$$-\omega \sin \omega t - \frac{1}{T_1} \cos \omega t = -\gamma B_0 \sin \omega t - \frac{1}{T_2} \cos \omega t \quad (16)$$

در نتیجه حرکت تقدیمی آزاد با کمیت‌های زیر مشخص می‌شود

$$\omega_0 = \gamma B_0; \quad T' = T_2 \quad (17)$$

این حرکت (۱۵) شبیه به حرکت نوسانگر هماهنگ میرا در دو بعد است. این شباهت به درستی حاکی از آن است که دستگاه اسپینی در نزدیکی بسامد $\omega_0 = \gamma B_0$ از میدان محرک جذب تشدید انرژی خواهد داشت، و پهنای بسامدی مربوط به پاسخ دستگاه به میدان محرک برابر با $1/T_2 \approx \Delta\omega$ خواهد بود. شکل ۶ تشدید پروتونها را در آب نشان می‌دهد.

معادلات بلوخ را می‌توان حل کرد و جذب توان از میدان مغناطیسی دوار با دامنه B_1 را به دست آورد:

$$B_x = B_1 \cos \omega t; \quad B_y = -B_1 \sin \omega t \quad (18)$$

بعد از یک محاسبه معمولی، جذب توان به صورت زیر است

$$\mathcal{P}(\omega) = \frac{\omega \gamma M_z T_2}{1 + (\omega_0 - \omega)^2 T_2^2} B_1^2 \quad (19)$$

نیمه پهنای تشدید در نیمه بیشینه توان چنین است

$$(\Delta\omega)_{1/2} = 1/T_2 \quad (20)$$

پهنای خط

برهم‌کنش دوقطبی مغناطیسی معمولاً مهم‌ترین علت پهن‌شدگی خطوط در شبکه صلبی از دوقطبیهای مغناطیسی است. بنابر نتیجه‌ای بنیادی از مغناطوستاتیک، میدان مغناطیسی ΔB وارد بر دوقطبی مغناطیسی μ_1 ، بر اثر دوقطبی μ_2 که در فاصله برداری r_{12} نسبت به دوقطبی اول قرار گرفته باشد، برابر است با

$$(CGS) \quad \Delta B = \frac{3(\mu_2 \cdot r_{12})r_{12} - \mu_2 r_{12}^2}{r_{12}^5} \quad (21)$$

مرتبه بزرگی این برهم‌کنش، با نوشتن B_i به جای ΔB ، چنین است

$$(CGS) \quad B_i \approx \frac{\mu}{r^3} \quad (22)$$

از این وابستگی قوی به r درمی‌یابیم که برهم‌کنشهای همسایه‌های نزدیک غالب خواهند بود، در نتیجه

$$(CGS) \quad B_i \approx \frac{\mu}{a^3} \quad (23)$$

که در آن a فاصله نزدیکترین همسایه‌هاست. این نتیجه، با این فرض که جهتگیری همسایه‌ها کاتوره‌ای است، مقیاسی از پهنای خط تشدید اسپینی ارائه می‌دهد. برای پروتونهایی به فاصله 2\AA از هم داریم

$$B_i \approx \frac{1.4 \times 10^{-23} \text{G cm}^3}{8 \times 10^{-24} \text{cm}^3} \approx 2 \text{G} = 2 \times 10^{-4} \text{T} \quad (24)$$

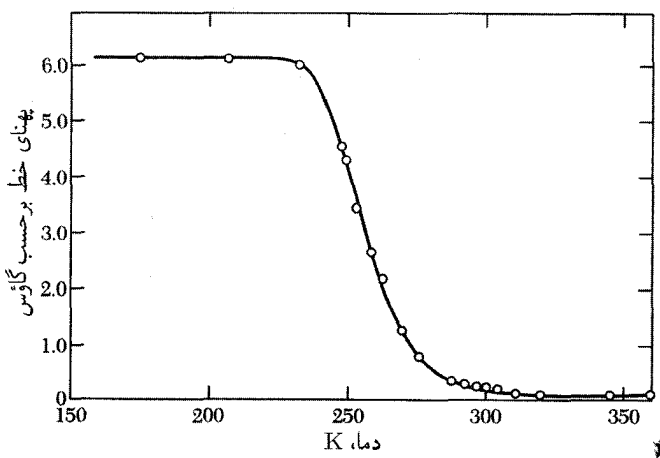
برای بیان روابط (۲۱)، (۲۲)، و (۲۳) در SI طرفهای راست را در $\mu_0/4\pi$ ضرب کنید.

باریک‌شدگی حرکتی

پهنای خط برای هسته‌هایی کاهش می‌یابد، که دارای حرکت نسبی سریع باشند. این اثر در شکل ۷ برای جامدها نشان داده شده است: وقتی اتمها ناگهان از یک جایگاه بلور به جایگاه دیگر جهش می‌کنند، عمل پخش مانند گردش کاتوره‌ای است. اتم به اندازه زمان میانگین τ ، که با افزایش دما به طور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌یابد، در یک جایگاه باقی می‌ماند.

آثار حرکتی روی پهنای خط در مایعات عادی حتی از این هم جالبتر است، زیرا مولکولها بسیار متحرک‌اند. پهنای خط تشدید پروتون در آب فقط 10^{-5} برابر پهنایی است که از مولکولهای آب در حالت انجماد انتظار می‌رود.

اثر حرکت هسته‌ای روی T_2 و روی پهنای خط پیچیده است، ولی با یک استدلال مقدماتی می‌توان آن را درک کرد. از معادلات بلوخ می‌دانیم که T_2 مقیاسی است از زمانی که در طول آن یک تک‌اسپین، به دلیل اختلال موضعی در شدت میدان مغناطیسی، به اندازه یک رادیان از فاز خارج می‌شود. فرض کنید



شکل ۷. اثر پخش هسته روی پهنای خط NMR مربوط به Li^+ در لیتیم فلزی. در دماهای پایین، این پهنای با مقدار نظری مربوط به شبکه صلب توافقی دارد. هنگامی که دما افزایش می‌یابد، آهنگ پخش زیاد می‌شود و پهنای خط کاهش می‌یابد. کاهش ناگهانی در پهنای خط در بالای $T = 230^\circ K$ هنگامی رخ می‌دهد که زمان جهش پخشی، τ ، از $1/\gamma B_i$ کوتاهتر شود. بدین ترتیب این آزمایش مقیاس مستقیمی از زمان جهش یک اتم برای تغییر دادن جایگاه خود در شبکه به دست می‌دهد.

$\Delta\omega \approx \gamma B_i$ انحراف بسامد موضعی ناشی از اختلال B_i را نشان دهد. میدان موضعی ممکن است از برهم‌کنشهای دوقطبی با اسپینهای دیگر ناشی شود.

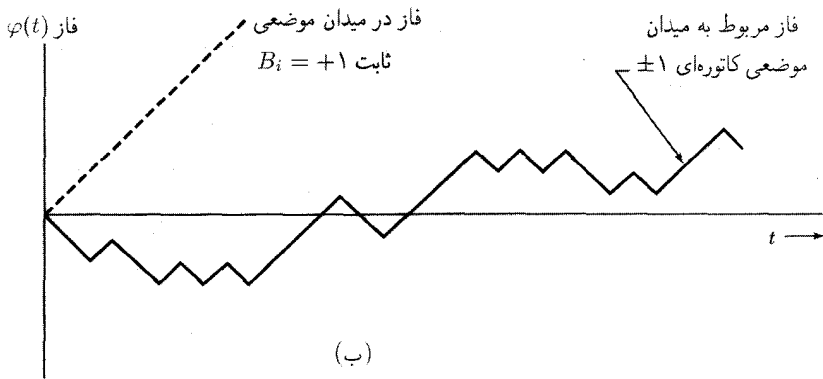
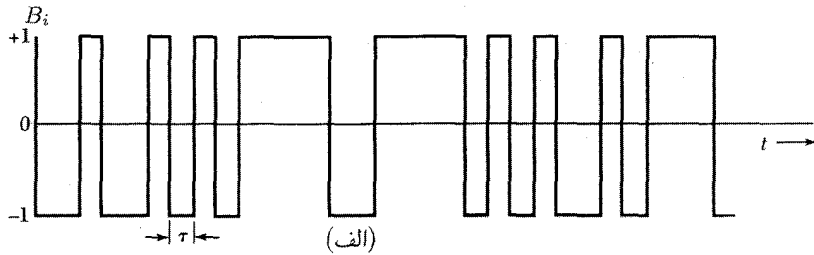
اگر آنها در حرکت نسبی سریع باشند، میدان موضعی B_i که یک اسپین معین با آن روبه‌رو می‌شود، نسبت به زمان افت‌وخیز خواهد کرد. فرض می‌کنیم، مانند شکل ۸ (الف)، میدان موضعی در زمان میانگین τ دارای مقدار $B_i + B_i$ باشد و سپس مقدار آن $-B_i$ شود: این تغییر کاتوره‌ای ممکن است در اثر تغییری در زاویه بین μ و \mathbf{r} در رابطه (۲۱) به وجود آید. در مدت زمان τ اسپین با زاویه فاز اضافی $\delta\varphi = \pm\gamma B_i \tau$ نسبت به زاویه فاز حرکت تقدیمی پایا در میدان خارجی B حرکت تقدیمی خواهد داشت.

اثر باریک‌شدگی حرکتی برای مقادیر کوچک τ ، به طوری که $\delta\varphi \leq 1$ ، بروز می‌کند. بعد از n فاصله زمانی τ ، میانگین مربع زاویه وافازی در میدان B برابر خواهد بود با

$$\langle \varphi^2 \rangle = n(\delta\varphi)^2 = n\gamma^2 B_i^2 \tau^2 \quad (25)$$

که در تشابه با فرایند گردش کاتوره‌ای نوشته شده است: میانگین مربع جابه‌جایی از مکان اولیه بعد از n گام به طول l در جهت‌های کاتوره‌ای برابر است با $\langle r^2 \rangle = nl^2$.

تعداد متوسط گام‌های لازم برای وافازی اسپین به اندازه یک رادیان برابر است با $n = 1/\gamma^2 B_i^2 \tau^2$.



شکل ۸. فاز اسپین در میدان موضعی ثابت، در مقایسه با وافازی اسپینی که بعد از فاصله‌های زمانی ثابت τ به طور کاتوره‌ای بین جایگاههایی که دارای میدان موضعی ± 1 هستند، جهش می‌کند.

(اسپینهایی که بیش از یک رادیان از فاز خارج شده باشند، در علامت جذب سهمی ندارند.) این تعداد گامها در زمان

$$T_2 = n\tau = 1/\gamma^2 B_i^2 \tau \quad (26)$$

رخ می‌دهد که کاملاً با نتیجه $T \cong 1/\gamma B_i$ برای شبکه صلب فرق دارد. از رابطه (۲۶) پهنای خط برای حرکت سریع با زمان مشخصه τ به صورت زیر به دست آید:

$$\Delta\omega = 1/T_2 = (\gamma B_i)^2 \tau \quad (27)$$

یا

$$\Delta\omega = 1/T_2 = (\Delta\omega)^2 \tau \quad (28)$$

که در آن $(\Delta\omega)$ پهنای خط در شبکه صلب است.

در این استدلال فرض می‌شود که $1 \ll (\Delta\omega) \cdot \tau$ ، زیرا در غیراین صورت $1 \ll \Delta\varphi$ نخواهد بود. بدین ترتیب $(\Delta\omega) \ll \Delta\omega$. هرچه τ کوتاهتر باشد، خط تشدید باریکتر خواهد بود! این اثر جالب توجه

به باریک‌شدگی حرکتی معروف است.^۱ با استفاده از اندازه‌گیرهای ثابت دی‌الکتریک معلوم شده است که زمان واهلش دورانی مولکولهای آب در دمای اتاق از مرتبه 10^{-10} s است؛ اگر $10^5 \text{ s}^{-1} \approx (\Delta\omega)_0$ ، در این صورت $10^{-5} \approx (\Delta\omega)_0 \tau$ و $10^{-1} \approx (\Delta\omega)_0^2 \tau$ ، لذا این حرکت، خط تشدید پروتون را تا حدود 10^{-5} برابر پهنای خط استاتیکی باریک می‌کند.

شکافتگی فوق ریز

برهم‌کنش فوق ریز عبارت است از برهم‌کنش مغناطیسی بین گشتاور مغناطیسی هسته و گشتاور مغناطیسی الکترون. از دید ناظر مستقر در هسته، این برهم‌کنش را میدان مغناطیسی ناشی از گشتاور مغناطیسی الکترون و حرکت الکترون به دور هسته به وجود می‌آورد. اگر الکترون در حالتی با تکانه زاویه‌ای مداری به دور هسته حرکت کند، یک جریان الکترونی حول هسته به وجود می‌آید. ولی، حتی اگر الکترون در حالتی با تکانه زاویه‌ای مداری صفر باشد، یک جریان اسپینی الکترونی به دور هسته وجود خواهد داشت، و این جریان به برهم‌کنش فوق ریز تماسی منجر می‌شود، که در جامدها از اهمیت خاصی برخوردار است. منشأ این برهم‌کنش تماسی را می‌توان به کمک یک استدلال فیزیکی کیفی، که در CGS داده می‌شود، درک کرد.

از نتایج نظریه دیراک در مورد الکترون استنباط می‌شود که گشتاور مغناطیسی $\mu_B = e\hbar/2mc$ مربوط به الکترون از گردش الکترون با سرعت c در یک حلقه جریان ناشی می‌شود، که شعاع آن تقریباً برابر است با طول موج کامپتون الکترون $\lambda = \hbar/mc \sim 10^{-11} \text{ cm}$. جریان الکتریکی مربوط به این گردش برابر است با

$$I \sim e \times (\text{دور در واحد زمان}) \sim ec/\lambda_e \quad (29)$$

و میدان مغناطیسی (شکل ۹) ناشی از این جریان برابر است با

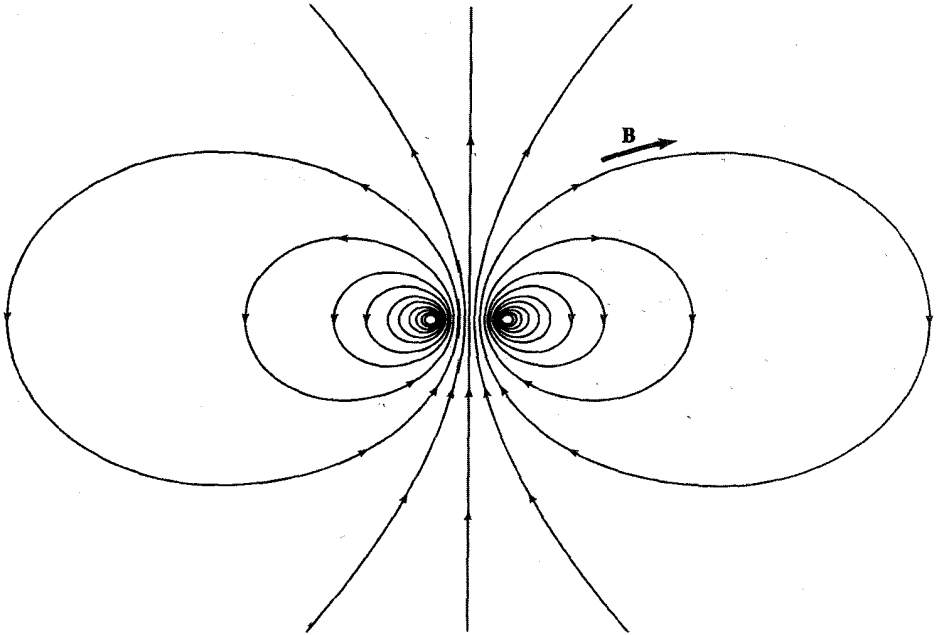
$$B \sim I/\lambda_e c \sim e/\lambda_e^2 \quad (30)$$

احتمال اینکه ناظری روی هسته خود را در داخل الکترون، یعنی داخل کره‌ای به حجم λ_c^3 حول

۱. این ایده‌های فیزیکی مرهون

N. Bloembergen, E. M. Purcell, and R. V. Pound, Phys. Rev. **73**, 679 (1948)

است. این نتیجه با نظریه پهنای خط اپتیکی ناشی از برخورد‌های قوی بین اتمها (همانند تخلیه گاز) اختلاف دارد، که τ کوتاه، خط پهنی ارائه می‌دهد. در مسئله اسپین هسته‌ای، برخوردها ضعیف‌اند. در اغلب مسائل اپتیکی، برخورد اتمها آن قدر قوی است که بتواند فاز نوسان را مختل کند. در تشدید هسته‌ای، فاز ممکن است در برخورد به آرامی تغییر کند، هرچند بسامد ممکن است به‌طور ناگهانی از یک مقدار به مقداری نزدیک به آن تغییر کند.



شکل ۹. میدان مغناطیسی \mathbf{B} ناشی از باری که در حلقه دایره‌ای حرکت می‌کند. بخش تماسی برهم‌کنش فوق‌ریز با گشتاور مغناطیسی هسته از ناحیه داخلی یا نزدیک حلقه جریان ناشی می‌شود. میانگین میدان روی پوسته‌ای کروی که حلقه را محصور کرده باشد برابر با صفر است. بنابراین برای الکترون ($L = 0$) تنها بخش تماسی است که در این برهم‌کنش سهم است.

الکترون، بیابد، برابر است با

$$P \approx |\psi(0)|^2 \lambda^3 \quad (31)$$

در اینجا $\psi(0)$ ، مقدار تابع موج الکترون در محل هسته است. بدین ترتیب مقدار میانگین میدان مغناطیسی در محل هسته برابر است با

$$\bar{B} \approx e |\psi(0)|^2 \lambda_e \approx \mu_B |\psi(0)|^2 \quad (32)$$

که در آن $\mu_B = e\hbar/2mc = \frac{1}{2}e\lambda_e$ مگنتون بور است.

بخش تماسی انرژی برهم‌کنش فوق‌ریز برابر است با

$$U = -\mu_I \cdot \bar{\mathbf{B}} = -\mu_I \cdot \mu_B |\psi(0)|^2 \approx \gamma \hbar \mu_B |\psi(0)|^2 \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} \quad (33)$$

که در آن I اسپین هسته برحسب \hbar است. برهم کنش تماسی اتم به این شکل است

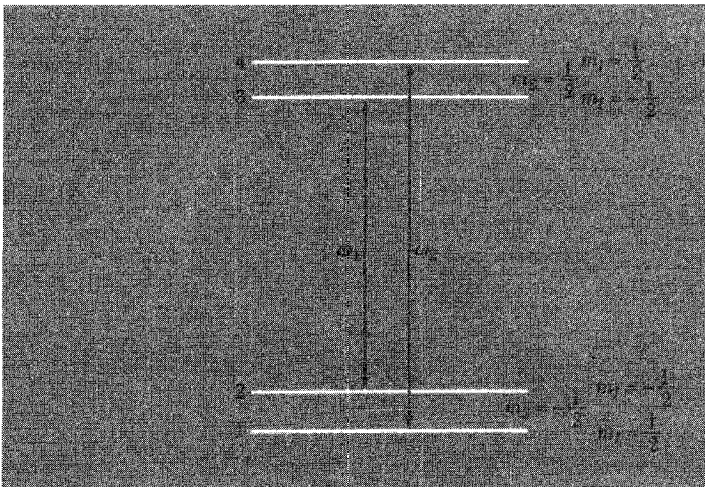
$$U = a\mathbf{I} \cdot \mathbf{S} \quad (۳۴)$$

مقادیر ثابت فوق ریز a برای حالت‌های پایه چند اتم آزاد عبارت‌اند از:

$K^{۴۱}$	$K^{۳۹}$	$Na^{۲۳}$	$Li^۷$	$H^۱$	هسته
$\frac{۳}{۲}$	$\frac{۳}{۲}$	$\frac{۳}{۲}$	$\frac{۳}{۲}$	$\frac{۱}{۲}$	I
۸۵	۸۳	۳۱۰	۱۴۴	۵۰۷	a برحسب گاؤس
۱۲۷	۲۳۱	۸۸۶	۴۰۲	۱۴۲۰	a برحسب MHz

در میدان مغناطیسی قوی، شکافتگی انرژی زمین در ترازهای الکترونی بر طرح تراز انرژی اتم یا یون آزاد غلبه می‌کند؛ برهم کنش فوق ریز یک شکافتگی اضافی به بار می‌آورد که در میدانهای قوی برابر است با $U' \cong am_s m_I$ ، که در آن m_I و m_s اعداد کوانتومی مغناطیسی‌اند.

در نمودار ترازهای انرژی شکل ۱۰، دو گذار الکترونی دارای قواعد گزینش $\Delta m_s = \pm 1$ و $\Delta m_I = 0$ ، بسامدها عبارت‌اند از $\omega = \gamma H_0 \pm a/2\hbar$. گذارهای هسته‌ای مشخص نشده‌اند؛ در آنها $\Delta m_s = 0$ ، در نتیجه $\omega = a/2\hbar$ هسته‌ای. بسامد گذار هسته‌ای $2 \rightarrow 1$ برابر است با بسامد گذار $3 \rightarrow 4$.



شکل ۱۰. ترازهای انرژی دستگامی با $S = \frac{1}{2}$ ، $I = \frac{1}{2}$ در میدان مغناطیسی. این نمودار برای تقریب میدان قوی $\mu_B B \gg a$ رسم شده، که در آن a ثابت جفت‌شدگی فوق ریز است که مثبت اختیار شده است. این چهار تراز با اعداد کوانتومی مغناطیسی m_I و m_s نامگذاری شده‌اند. گذارهای الکترونی قوی دارای $\Delta m_I = 0$ و $\Delta m_s = \pm 1$.

برهم‌کنش فوق‌ریز در اتم مغناطیسی ممکن است تراز انرژی پایه را بشکافد. این شکافتگی در هیدروژن برابر با 1420 MHz است، که همان خط مربوط به بسامد رادیویی هیدروژن اتمی بین ستاره‌ای است.

مثالها: ناراستیهای نقطه‌ای پارامغناطیسی

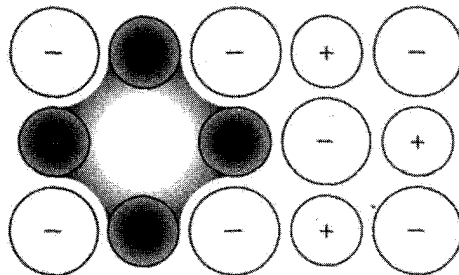
شکافتگی فوق‌ریز تشدید اسپینی الکترون در مورد ناراستیهای نقطه‌ای پارامغناطیسی، مانند مراکز F در بلورهای هالید قلیایی و اتمهای دهنده در بلورهای نیمرسانا، اطلاعات ساختاری بالارزشی فراهم می‌کند.

مراکز F در هالیدهای قلیایی. مرکز F یک تهیجای یون منفی است که یک الکترون اضافی در آن مقید است (شکل ۱۱). تابع موج الکترون گرفتار عمده‌تاً بین شش یون قلیایی مجاور با جایگاه شبکه‌ای تهی به اشتراک گذاشته می‌شود. این تابع موج روی ۱۲ یون هالیدی که پوستهٔ همسایه‌های دوم را تشکیل می‌دهند، دامنهٔ کوچکتري دارد. این شمارش در مورد بلورهایی که ساختار NaCl دارند صادق است. اگر $\varphi(\mathbf{r})$ تابع موج الکترون ظرفیت در یک تک‌یون قلیایی باشد، در تقریب مرتبهٔ اول (یا LCAO) داریم

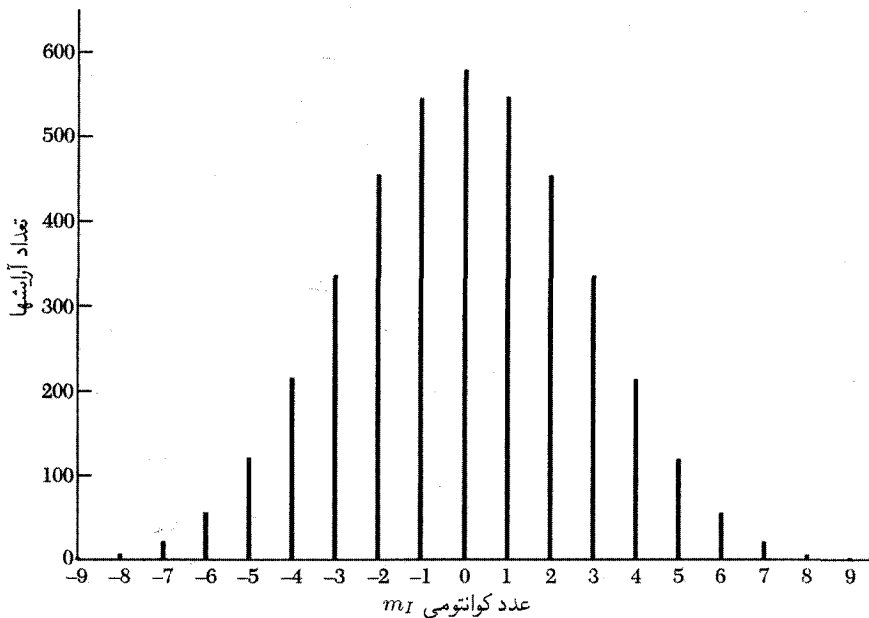
$$\psi(\mathbf{r}) = C \sum_p \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p) \quad (35)$$

که در ساختار NaCl شش مقدار \mathbf{r}_p نشانگر شش جایگاه یون قلیایی است که تهیجای شبکه را احاطه می‌کنند.

پهنای خط تشدید اسپینی الکترون مرکز F عمده‌تاً توسط برهم‌کنش فوق‌ریز الکترون گرفتار با گشتاور مغناطیسی هسته‌ای یونهای قلیایی مجاور جایگاه شبکه‌ای تهی تعیین می‌شود. پهنای خط مشاهده‌شده دلیلی بر وجود این تصویر ساده برای تابع موج الکترون است. منظور از پهنای خط، پهنای پوشش مؤلفه‌های ساختار فوق‌ریز ممکن است.



شکل ۱۱. مرکز F یک تهیجای یون منفی است که یک الکترون اضافی در آن مقید است. توزیع الکترون اضافی تا حدود زیادی روی یونهای فلزی مثبت مجاور جایگاه شبکه‌ای تهی است.

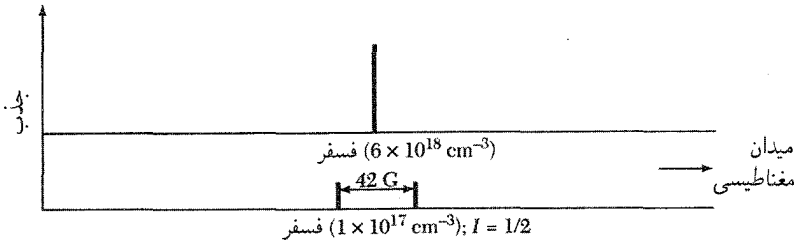


شکل ۱۲. ۴۰۹۶ آرایش شش اسپین هسته‌ای K^{39} ، که در ۱۹ مؤلفه فوق ریز توزیع شده‌اند. هر مؤلفه در اثر برهم‌کنش فوق ریز باقیمانده با ۱۲ هسته Cl همسایه که ممکن است Cl^{35} (۷۵ درصد) یا Cl^{37} (۲۵ درصد) باشند، به تعداد بسیار زیادی از مؤلفه‌های دیگر شکافته می‌شود. پوش این نقش تقریباً شکل گاوسی دارد.

برای مثال، یک مرکز F در KCl در نظر بگیرید. پتاسیم طبیعی دارای ۹۳ درصد K^{39} با اسپین هسته‌ای $I = \frac{3}{2}$ است. اسپین کل شش هسته پتاسیم در مرکز F برابر است با $I_{max} = 6 \times \frac{3}{2} = 9$ ؛ این تعداد مقادیر ممکن عدد کوانتومی m_I همان‌گونه که در شکل ۱۲ مشاهده می‌شود، تعداد $46 = 4096 = (2I + 1)^6$ ترتیب مستقل برای توزیع شش اسپین در ۱۹ مؤلفه وجود دارد. غالباً فقط پوش خط جذب مرکز F را مشاهده می‌کنیم.

اتمهای دهنده در سیلیسیم. فسفر در سیلیسیم نقش دهنده را ایفا می‌کند. هر اتم دهنده دارای پنج الکترون برونی است، که چهار تای آنها به گونه دیامغناطیسی در شبکه پیوندهای کووالانسی بلور وارد می‌شوند و پنجمین الکترون مقید به صورت مرکز پارامغناطیسی با اسپین $S' = 1/2$ عمل می‌کند. شکافتگی فوق ریز تجربی در حد میدان قوی در شکل ۱۳ نشان داده شده است.

وقتی غلظت از حدود $10^{18} \times 1$ دهنده در سانتیمتر مکعب بیشتر شود، یک خط باریک به جای



شکل ۱۳. خطوط تشدید اسپینی اتمهای دهنده P در سیلیسیم. در غلظت بالاتر دهنده‌ها، در نزدیکی گذار فلز عایق الکترون می‌تواند چنان سریع از یک جایگاه به جایگاه دیگر جهش کند که ساختار فوق‌ریز از بین برود.

خط شکافته شده قرار می‌گیرد. این اثر باریک‌شدگی حرکتی (معادله ۲۸) ناشی از جهش سریع الکترونها دهنده بین تعداد زیادی از اتمهای دهنده است. این جهش سریع، در کل، شکافنگی فوق‌ریز را از بین می‌برد. در غلظتهای بالاتر، چون همپوشانی تابع موج الکترونها دهنده زیاده‌تر می‌شود، آهنگ پرش افزایش می‌یابد. اندازه‌گیریهای رسانندگی این نکته را تأیید کرده‌اند (فصل ۱۴).

انتقال نایت

در بسامد ثابت، تشدید اسپین هسته در فلزات و در جامدهای دیامغناطیسی در میدانهای مغناطیسی که کمی با یکدیگر فرق دارند، مشاهده می‌شود. این اثر انتقال نایت یا انتقال فلزی نامیده می‌شود و ابزار ارزشمندی برای بررسی الکترونها رسانش است.

انرژی برهم‌کنش هسته‌ای با اسپین I و نسبت ژیرومغناطیسی γI برابر است با

$$U = (-\gamma I \hbar B_0 + a \langle S_z \rangle) I_z \quad (36)$$

که در آن نخستین جمله برهم‌کنش هسته با میدان مغناطیسی اعمال شده B_0 و دومین جمله برهم‌کنش متوسط فوق‌ریز هسته با الکترونها رسانش است. اسپین متوسط الکترونها رسانش $\langle S_z \rangle$ ، به پذیرفتاری مغناطیسی اسپینی پاؤلی، χ_s ، الکترونها رسانش مربوط است: $M_z = g N \mu_B \langle S_z \rangle = \chi_s B_0$. در نتیجه این برهم‌کنش را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$U = \left(-\gamma I \hbar + \frac{a \chi_s}{g N \mu_B} \right) B_0 I_z = -\gamma I \hbar B_0 \left(1 + \frac{\Delta B}{B_0} \right) I_z \quad (37)$$

انتقال نایت به صورت زیر تعریف می‌شود

$$K = -\frac{\Delta B}{B_0} = \frac{a \chi_s}{g N \mu_B \gamma I \hbar} \quad (38)$$

جدول ۲. انتقالهای نایت در NMR عناصر فلزی
(در دمای اتاق)

انتقال نایت برحسب درصد	هسته	انتقال نایت برحسب درصد	هسته
۰٫۲۳۷	Cu ^{۶۳}	۰٫۲۶۱	Li ^۷
۰٫۶۵۳	Rb ^{۸۷}	۰٫۱۱۲	Na ^{۲۳}
-۳٫۰	Pd ^{۱۰۵}	۰٫۱۶۲	Al ^{۲۷}
-۳٫۵۳۳	Pt ^{۱۹۵}	۰٫۲۶۵	K ^{۳۹}
۱٫۴	Au ^{۱۹۷}	۰٫۵۸۰	V ^{۵۱}
۱٫۴۷	Pb ^{۲۰۷}	۰٫۶۹	Cr ^{۵۳}

و شبیه یک تغییر نسبی در نسبت ژیرومغناطیسی است. با استفاده از تعریف (۳۴) دربارهٔ انرژی تماسی فوق‌ریز، انتقال نایت به‌طور تقریبی با $K \approx \chi_s |\psi(0)|^2 / N$ داده می‌شود؛ یعنی برابر است با پذیرفتاری اسپینی پاولی که به نسبت غلظت الکترونیهای رسانش در هسته به غلظت میانگین الکترونیهای رسانش زیاد شده باشد.

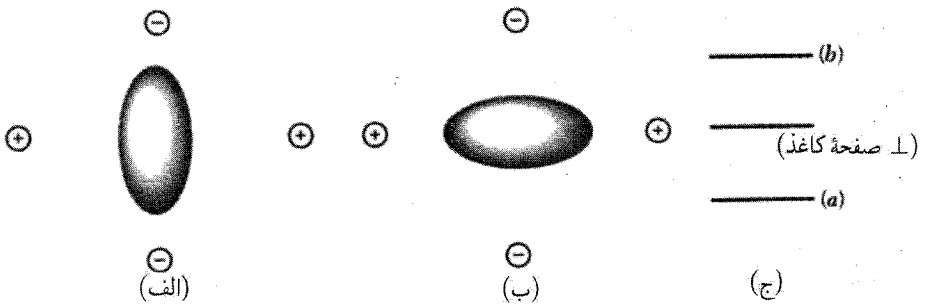
مقادیر تجربی در جدول ۲ داده شده‌اند. مقدار ثابت جفت‌شدگی فوق‌ریز a در فلز کمی با مقدار این ثابت در اتم آزاد تفاوت دارد، زیرا تابعهای موج در هسته با هم فرق دارند. از انتقال نایت در $I=1$ فلزی چنین برمی‌آید که مقدار $|\psi(0)|^2$ در فلز ۴۴٫۰ درصد مقدار آن در اتم آزاد است؛ یک مقدار محاسبه‌شده برای این نسبت با استفاده از توابع موج نظری برابر ۴۹٫۰ درصد است.

تشدید چهارقطبی هسته‌ای

هسته‌های با اسپین $I \geq 1$ دارای گشتاور چهارقطبی الکتریکی‌اند. گشتاور چهارقطبی Q مقیاسی از بیضیواری توزیع بار در هسته است. کمیت موردنظر به‌طور کلاسیکی به‌صورت زیر تعریف می‌شود

$$eQ = \frac{1}{4} \int (3z^2 - r^2) \rho(r) d^3x \quad (39)$$

که در آن $\rho(\mathbf{r})$ چگالی بار است. هستهٔ تخم‌مرغی شکل دارای Q مثبت است؛ هستهٔ نعلبکی شکل دارای Q منفی است. هنگامی که هسته در بلور قرار می‌گیرد، مطابق شکل ۱۴، تحت تأثیر میدان الکتروستاتیکی اطراف خود قرار می‌گیرد. اگر تقارن این میدان کمتر از تقارن مکعبی باشد، گشتاور چهارقطبی هسته منجر به مجموعه‌ای از ترازهای انرژی می‌شود که به‌علت برهم‌کنش چهارقطبی با میدان الکتریکی موضعی شکافته شده‌اند.



شکل ۱۴. (الف) سمتگیری با پایستریز انرژی گشتاور چهارقطبی الکتریکی هسته $(Q)^\circ$ در میدان الکتریکی موضعی چهاریون نشان داده شده. الکترونهاى خود یون نشان داده نشده‌اند. (ب) سمتگیری با بالاتریز انرژی (ج) شکافتگی تراز انرژی برای $I = 1$.

حالت‌های شکافته شده عبارت‌اند از $2I + 1$ حالت اسپین I . از آنجا که میدان مغناطیسی rf با بسامد مناسب می‌تواند گذارهایی بین این ترازها ایجاد کند، شکافتگیهای چهارقطبی را اغلب می‌توان مستقیماً مشاهده کرد. واژه تشدید چهارقطبی هسته‌ای به مشاهده شکافتگیهای چهارقطبی هسته‌ای در غیاب میدان مغناطیسی استاتیکی اطلاق می‌شود. شکافتگیهای چهارقطبی به‌ویژه در مولکولهایی مانند Cl_2 ، Br_2 ، و I_2 که پیوند کووالانسی دارند، بزرگ‌اند. این شکافتگیها از مرتبه 10^7 یا 10^8 Hz هستند.

تشدید فرومغناطیسی

تشدید اسپینی با بسامدهای میکروموج در فرومغناطیسها در اصل مانند تشدید اسپینی هسته است. گشتاور مغناطیسی الکترون کل نمونه، حول جهت میدان مغناطیسی استاتیکی دارای حرکت تقدیمی است، و هنگامی که بسامد میدان عرضی rf با بسامد این حرکت تقدیمی برابر باشد، انرژی قویاً از میدان عرضی جذب می‌شود. می‌توان تصور کرد که بردار ماکروسکوپی S که نشانگر اسپین کل فرومغناطیس است در میدان مغناطیسی استاتیکی کوانتیده است و ترازهای انرژی به اندازه بسامدهای عادی زمین از هم جدا شده‌اند؛ قاعده گزینش مغناطیسی $\Delta m_S = \pm 1$ تنها گذارهای بین ترازهای مجاور را مجاز می‌دارد.

خصیلت‌های غیرعادی تشدید فرومغناطیسی شامل موارد زیرند:

- مؤلفه‌های پذیرفتاری عرضی χ' و χ'' بسیار بزرگ‌اند، زیرا مغناطیدگی فرومغناطیسها در یک میدان استاتیکی معین، خیلی بزرگتر از مغناطیدگی پارامغناطیسهای الکترونی یا هسته‌ای در همان میدان است.
- شکل نمونه نقش مهمی ایفا می‌کند. چون مغناطیدگی بزرگ است، میدان و امغناطیدگی نیز بزرگ است.

• جفت‌شدگی تبادلی قوی بین الکترونهاى فرومغناطیسی در جهت از بین بردن سهم دوقطبی در پهنای خط عمل می‌کند، در نتیجه خطوط تشدید فرومغناطیسی می‌توانند تحت شرایط مطلوب کاملاً تیز (کوچکتر از ΔG) باشند.

• آثار اشیاعی در ترازهای با توان rf پایین رخ می‌دهند. همانند دستگاههای اسپینی هسته‌ای، دستگاه اسپینی را نمی‌توان به حدی تحریک کرد که مغناطیدگی M_z صفر یا وارونه شود. قبل از آنکه بردار مغناطیدگی به طور قابل ملاحظه‌ای نسبت به جهت اولیه‌اش دوران کند، برانگیختگی تشدید فرومغناطیسی به مدهای موج اسپینی تقسیم می‌شود.

اثرهای شکل در FMR

اثرهای ناشی از شکل نمونه روی بسامد تشدید را مورد بررسی قرار می‌دهیم. نمونه‌ای از عایق فرومغناطیسی مکعبی به شکل بیضوی را در نظر بگیرید که محورهای اصلی آن با محورهای x, y, z دستگاه مختصات دکارتی موازی‌اند. ضریبهای وامغناطیدگی N_x, N_y, N_z و ضریبهای واقطبی‌دگی، که در فصل ۱۶ تعریف می‌شوند، یکسان‌اند. مؤلفه‌های میدان مغناطیسی داخلی B_i در این بیضوی به صورت زیر به میدان اعمال شده مربوط‌اند.

$$B_x^i = B_x^o - N_x M_x; \quad B_y^i = B_y^o - N_y M_y; \quad B_z^i = B_z^o - N_z M_z$$

میدان لورنتس $(4\pi/3)M$ و میدان تبادلی λM درگشتاور سهمی ندارند، زیرا حاصلضرب برداری آنها در M متحداً برابر با صفر است. در SI، به جای مؤلفه‌های M مؤلفه‌های $\mu_0 M$ را قرار می‌دهیم و برای N ها تعریف مناسبی اختیار می‌کنیم.

مؤلفه‌های معادله اسپینی $\dot{M} = \gamma(M \times B^i)$ ، برای میدان استاتیکی اعمال شده $B_0 \hat{z}$ ، به صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{dM_x}{dt} = \gamma(M_y B_z^i - M_z B_y^i) = \gamma[B_0 + (N_y - N_z)M]M_y \quad (40)$$

$$\frac{dM_y}{dt} = \gamma[M(-N_x M_x) - M_x(B_0 - N_z M)] = -\gamma[B_0 + (N_x - N_z)M]M_x$$

در تقریب مرتبه اول می‌توان نوشت $dM_z/dt = 0$ و $M_z = M$. معادله (۴۰) در صورتی دارای پاسخهای با وابستگی زمانی $\exp(-i\omega t)$ خواهد بود که

$$\begin{vmatrix} i\omega & \gamma[B_0 + (N_y - N_z)M] \\ -\gamma[B_0 + (N_x - N_z)M] & i\omega \end{vmatrix} = 0$$

در نتیجه بسامد تشدید فرومغناطیسی در میدان اعمال شده B_0 برابر است با

$$\omega_0^2 = \gamma^2 [B_0 + (N_y - N_z)M][B_0 + (N_x - N_z)M] \quad (41)$$

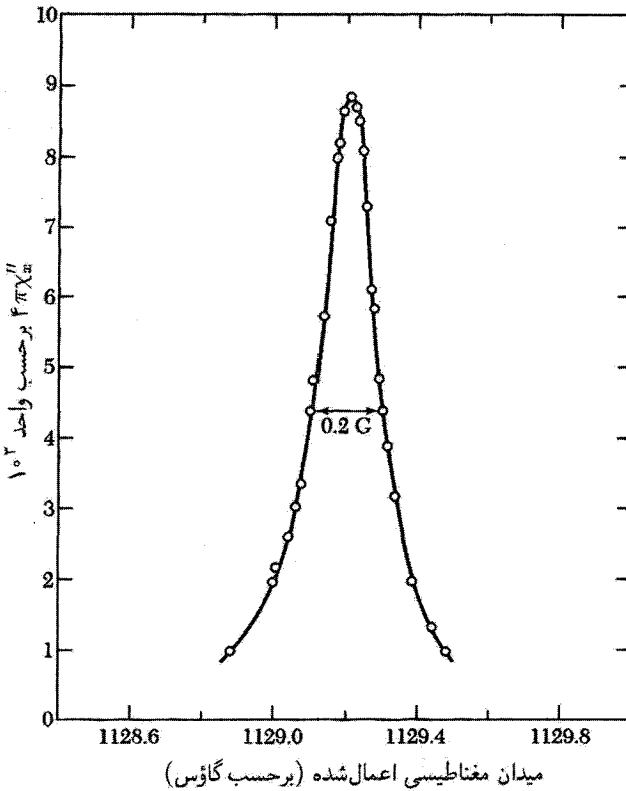
(CGS)

$$\omega_0^2 = \gamma^2 [B_0 + (N_y - N_z)\mu_0 M][B_0 + (N_x - N_z)\mu_0 M]$$

(SI)

بسامد ω_0 را بسامد مد یکنواخت می‌نامند، تا از بسامد مدهای مگنونی و دیگر مدهای غیریکنواخت متمایز باشد. در مد یکنواخت تمام گشتاورها به‌طور همفاز و با دامنه یکسان حرکت تقدیمی دارند.

برای کره $N_x = N_y = N_z$ ، در نتیجه $\omega_0 = \gamma B_0$ ، یک خط تشدید بسیار تیز برای هندسه این مطلب در شکل ۱۵ نشان داده شده است. برای صفحه تخت با B_0 عمود بر آن $N_x = N_y = 0$ ؛



شکل ۱۵. FMR در کره صیقل‌یافته‌ای از آهن‌ربای نارنگ آهن ایتیریم در 33.3 GHz و 300 K برای $[111]$ $B_0 \parallel$. پهنای کل خط به‌ازای نصف توان فقط 0.2 G است.

$N_z = 4\pi$ ، در نتیجه بسامد تشدید فرومغناطیسی عبارت است از

$$(CGS) \quad \omega_0 = \gamma(B_0 - 4\pi M); \quad (SI)\omega_0 = \gamma(B_0 - \mu_0 M) \quad (42)$$

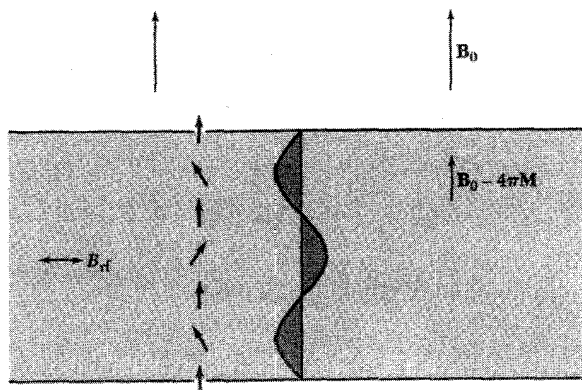
اگر B_0 موازی با سطح این صفحه یعنی صفحه xz باشد، داریم $N_x = N_z = 0$ و $N_y = 4\pi$ و

$$(CGS) \quad \omega_0 = \gamma[B_0(B_0 + 4\pi M)]^{1/2}; \quad (SI)\omega_0 = \gamma[B_0(B_0 + \mu_0 M)]^{1/2} \quad (43)$$

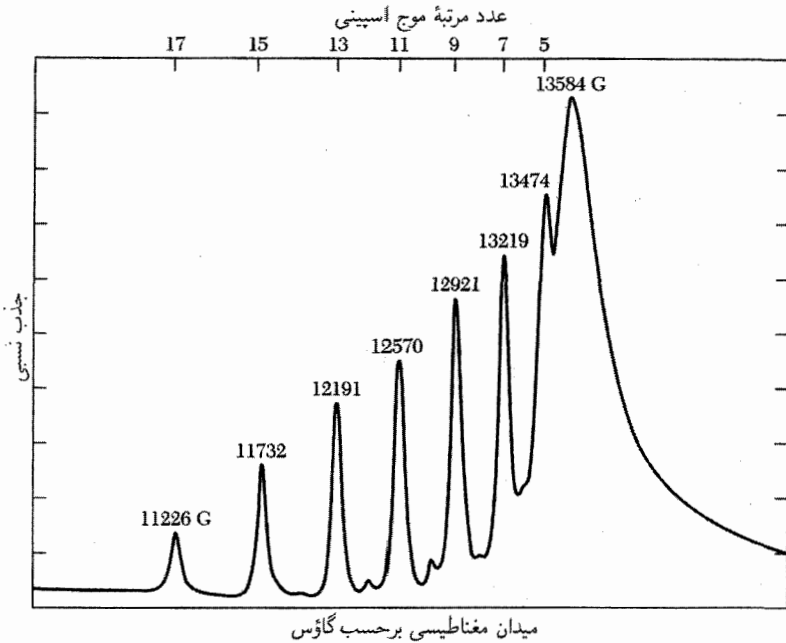
آزمایشها γ را تعیین می‌کنند، که با رابطه $-\gamma = g\mu_B/\hbar$ به ضریب g مربوط می‌شود. مقادیر g برای Fe، Co، و Ni فلزی در دمای اتاق به ترتیب عبارت‌اند از 2.10 ، 2.18 ، و 2.21 .

تشدید موج اسپینی

میدانهای مغناطیسی یکنواخت If در صورتی می‌توانند در لایه‌های نازک فرومغناطیسی امواج اسپینی با طول موج را برانگیزند که اسپینهای الکترونی روی سطح این لایه، نسبت به اسپینهای درون لایه، تحت تأثیر میدانهای ناهمسانگردی متفاوتی بگیرند. در عمل، همان‌گونه که در شکل ۱۶ نشان داده شده است، اسپینهای سطح ممکن است به وسیله برهم‌کنشهای ناهمسانگرد سطح میخکوب شوند. اگر میدان If یکنواخت باشد، می‌تواند امواجی را برانگیزد که در ضخامت لایه دارای تعداد فردی از نیم طول موج باشند. امواجی که تعداد زوجی از نیم طول موج داشته باشند، هیچ انرژی برهم‌کنش برابندی با این میدان نخواهند داشت.



شکل ۱۶. تشدید موج اسپینی در لایه نازک. صفحه لایه بر میدان مغناطیسی اعمال شده B_0 عمود است. در اینجا یک سطح مقطع لایه نشان داده شده است. میدان مغناطیسی داخلی برابر است با $B_0 - 4\pi M$. فرض می‌شود که جهت اسپینهای واقع بر سطوح لایه به وسیله نیروهای ناهمسانگرد سطح ثابت نگهداشته می‌شود. میدان یکنواخت If مدهایی از امواج اسپینی را برمی‌انگیزد که تعداد فردی از نیم طول موج داشته باشند. موج نشان داده شده برای $n = 3$ نیم طول موج است.



شکل ۱۷. طیف تشدید موج اسپینی در لایه پرمالوی (Fe^{2+}NiO) در 9GHz . عدد مرتبه عبارت است از تعداد نیم طول موجها در ضخامت لایه.

شرط تشدید موج اسپینی (SWR) با میدان مغناطیسی اعمال شده عمود بر لایه، با اضافه کردن سهم تبادل در بسامد به طرف راست معادله (۴۲) به دست می آید. سهم تبادل را می توان به صورت Dk^2 نوشت، که در آن D ثابت تبادل موج اسپینی است. فرض $ka \ll 1$ برای آزمایشهای SWR معتبر است. بدین ترتیب در میدان اعمال شده B بسامدهای تشدید موج اسپینی عبارت اند از:

$$\omega_0 = \gamma(B_0 - 4\pi M) + Dk^2 = \gamma(B_0 - 4\pi M) + D(n\pi/L)^2 \quad (44)$$

که در آن بردار موج برای مدی با n نیم طول موج در لایه ای به ضخامت L برابر است با $k = n\pi/L$. یک طیف تجربی در شکل ۱۷ نشان داده شده است.

تشدید پادفرومغناطیسی

پادفرومغناطیس تک محوری را که اسپینهای آن روی دو زیر شبکه ۱ و ۲ قرار دارند، در نظر می گیریم. فرض می کنیم میدان ناهمسانگردی $B_A \hat{z}$ مغناطیدگی M_1 زیر شبکه ۱ را در جهت $+z$ قرار دهد؛ میدان ناهمسانگردی (فصل ۱۲) از چگالی انرژی ناهمسانگردی $U_K(\theta_1) = K \sin^2 \theta_1$ ناشی می شود. در

اینجا θ_1 زاویه بین \mathbf{M}_1 و محور z است، بنابراین $B_A = \gamma K/M$ ، که در آن $M = |\mathbf{M}_1| = |\mathbf{M}_2|$ ، در آن $B_A \hat{z} -$ مغناطیدگی \mathbf{M}_2 را در جهت $-z$ قرار می‌دهد. اگر یک زیرشبکه در امتداد $+z$ جهت یافته باشد، زیرشبکه دیگر در امتداد $-z$ جهت خواهد یافت.

برهم‌کنش تبادلی بین \mathbf{M}_1 و \mathbf{M}_2 را در تقریب میدان میانگین بررسی می‌کنیم. میدانهای تبادلی عبارت‌اند از

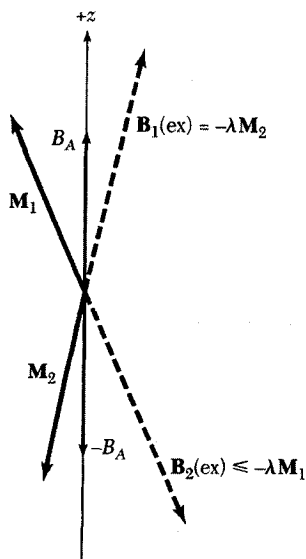
$$\mathbf{B}_1(\text{ex}) = -\lambda \mathbf{M}_2; \quad \mathbf{B}_2(\text{ex}) = -\lambda \mathbf{M}_1 \quad (45)$$

که در آن λ مثبت است. در اینجا \mathbf{B}_1 میدانی است که بر اسپینهای زیرشبکه ۱ اثر می‌کند و \mathbf{B}_2 میدانی است که بر اسپینهای زیرشبکه ۲ اثر می‌گذارد. در غیاب میدان مغناطیسی خارجی، میدان کل وارد بر \mathbf{M}_1 برابر است با $\mathbf{B}_1 = -\lambda \mathbf{M}_2 + B_A \hat{z}$ و میدان کل وارد بر \mathbf{M}_2 برابر است با $\mathbf{B}_2 = -\lambda \mathbf{M}_1 - B_A \hat{z}$ (شکل ۱۸). در روابط زیر $M_1^z = M$ و $M_2^z = -M$ قرار می‌دهیم. معادلات خطی شده حرکت عبارت‌اند از:

$$\begin{aligned} dM_1^x/dt &= \gamma[M_1^y(\gamma M + B_A) - M(-\lambda M_1^y)] \\ dM_1^y/dt &= \gamma[M(-\lambda M_1^x) - M_1^x(\lambda M + B_A)] \end{aligned} \quad (46)$$

$$\begin{aligned} dM_2^x/dt &= \gamma[M_2^y(-\lambda M - B_A) - (-M)(-\lambda M_2^y)] \\ dM_2^y/dt &= \gamma[(-M)(-\lambda M_2^x) - M_2^x(-\lambda M - B_A)] \end{aligned} \quad (47)$$

روابط $M_1^+ = M_1^x + iM_1^y$ و $M_2^+ = M_2^x + iM_2^y$ را تعریف می‌کنیم. آنگاه روابط (۴۶) و



شکل ۱۸. میدانهای مؤثر در تشدید پادفرومغناطیسی. مغناطیدگی \mathbf{M}_1 زیرشبکه ۱ تحت تأثیر میدان $B_A \hat{z} - \lambda \mathbf{M}_2$ و مغناطیدگی \mathbf{M}_2 تحت تأثیر میدان $-\lambda \mathbf{M}_1 - B_A \hat{z}$ قرار می‌گیرد. هر دو انتهای محور بلور، "محورهای آسان" مغناطیدگی را نشان می‌دهند.

(۴۷)، برای وابستگی زمانی $\exp(-i\omega t)$ ، به این صورت درمی‌آیند

$$-i\omega M_{\uparrow}^{+} = -i\gamma[M_{\uparrow}^{+}(B_A + \lambda M) + M_{\downarrow}^{+}(\lambda M)]$$

$$-i\omega M_{\downarrow}^{+} = i\gamma[M_{\downarrow}^{+}(B_A + \lambda M) + M_{\uparrow}^{+}(\lambda M)]$$

این معادلات به شرطی دارای پاسخ‌اند که با میدان تبادل $B_E \equiv \lambda M$ داشته باشیم

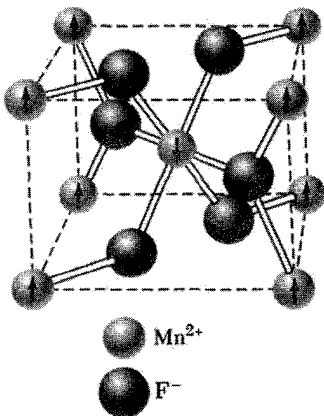
$$\begin{vmatrix} \gamma(B_A + B_E) - \omega & \gamma B_E \\ \gamma B_E & \gamma(B_A + B_E) + \omega \end{vmatrix} = 0$$

بدین ترتیب بسامد تشدید پادفرمغناطیسی با رابطه زیر داده می‌شود

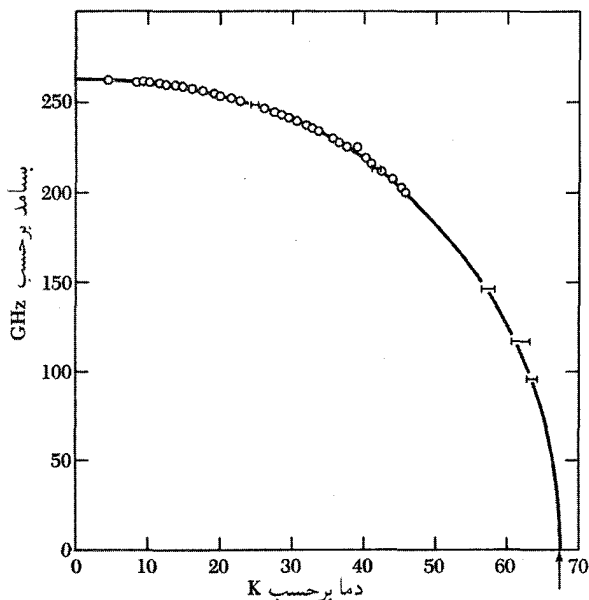
$$\omega^2 = \gamma^2 B_A (B_A + 2B_E) \quad (48)$$

MnF_2 پادفرمغناطیسی است که به‌طور وسیعی مورد مطالعه قرار گرفته است. ساختار آن در شکل ۱۹ نشان داده شده است. تغییر مشاهده‌شده ω با دما در شکل ۲۰ نشان داده شده است. کفر^۱ مقادیر B_A و B_E را در MnF_2 به‌صورت دقیقی برآورد کرده است. او مقادیر $B_E = 54^\circ kG$ و $B_A = 87.8 kG$ را در صفر مطلق برآورد کرد، در نتیجه $(2B_A B_E)^{1/2} = 10^\circ kG$. مقدار مشاهده‌شده برابر $93 kG$ است. ریچاردز^۲ بسامدهای AFMR را که تا $0^\circ K$ برونیابی شده‌اند گردآوری کرده است:

NiO	MnO	FeF ₂	MnF ₂	NiF ₂	CoF ₂	بلور
۱۰۹	۸۲٫۸	۱۵۸	۲۶٫۰	۹۳٫۳	۸۵٫۵	بسامد برحسب $10^{10} Hz$



شکل ۱۹. ساختار شیمیایی و مغناطیسی MnF_2 . پیکانها جهت و آرایش گشتاورهای مغناطیسی اتمهای منگنز را نشان می‌دهند.



شکل ۲۰. بسامد تشدید پادفرمغناطیسی برای MnF_2 برحسب دما.

تشدید پارامغناطیسی الکترون باریک‌شدگی تبدلی

پارامغناطیسی را در نظر می‌گیریم که در آن برهم‌کنش تبدلی بین اسپین الکترونی‌های همسایه اول برابر با J باشد. فرض می‌شود که دما کاملاً بالاتر از همهٔ دماهای نظم‌یافتن اسپینها، T_c ، باشد. تحت این شرایط پهنای خط تشدید اسپینی معمولاً بسیار باریکتر از پهنایی است که از برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی انتظار می‌رود. این اثر را باریک‌شدگی تبدلی می‌گویند، که شباهت زیادی به باریک‌شدگی حرکتی دارد. بسامد تبدلی $\omega_{ex} \approx J/\hbar$ را بسامد جهشها، $1/T$ ، تعبیر می‌کنیم. در این صورت با تعمیم نتیجهٔ باریک‌شدگی حرکتی (۲۸)، برای پهنای خط باریک‌شدهٔ تبدلی داریم

$$\Delta\omega \approx (\Delta\omega)_0^2 / \omega_{ex} \quad (49)$$

که در آن $(\Delta\omega)_0^2 = \gamma^2 \langle B_i^2 \rangle$ ، مربع پهنای دوقطبی استاتیکی در غیاب تبادل است. برای مثالی مفید و جالب توجه از باریک‌شدگی تبدلی می‌توان از بلور آلی پارامغناطیسی نام برد که به نشانهٔ g یا DPPH معروف است و اغلب برای مدرج کردن میدان مغناطیسی به‌کار می‌رود. این رادیکال

آزاد دارای خط تشدید است که در نیم توان دارای نیم‌پهنای $۱.۳۵G$ است، یعنی فقط چند درصد پهنای دوقطبی خالص.

شکافتگی میدان صفر

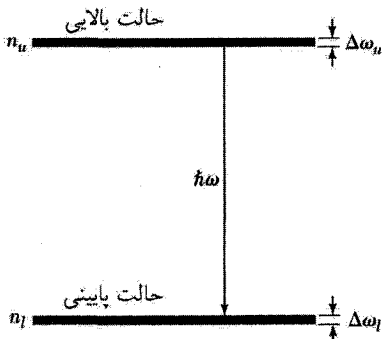
شماری از یونهای پارامغناطیسی در ترازهای انرژی حالت پایه مغناطیسی خود دارای شکافتگیهای ناشی از میدان بلور در گستره $۱۰^{۱۰}$ – $۱۰^{۱۱}$ هرتزند، که با روشهای میکروموجی می‌توان (به‌آسانی) به آنها دست یافت، یون Mn^{2+} به‌صورت ناخالصی افزودنی در بسیاری از بلورها مورد بررسی قرار گرفته است. برحسب شرایط محیطی یک شکافتگی حالت پایه در گستره $۱۰^۷$ – $۱۰^۹$ هرتز دیده شده است.

اساس کار میزر

بلورها را می‌توان به‌صورت تقویت‌کننده‌های میکروموجی و نوری و به‌صورت چشمه‌های تابش همدوس به‌کار برد. میزر، میکروموجها را با گسیل تحریک‌شده تابش تقویت می‌کند؛ لیزر، با همین روش نور را تقویت می‌کند. اساس این روش را، که از کارهای تاؤنر^۱ است، می‌توان از دستگاه مغناطیسی دوترازی شکل ۲۱ دریافت. n_u اتم در حالت بالایی و n_l اتم در حالت پایینی وجود دارند. دستگاه را از همه جهات تحت تابشی با بسامد ω قرار می‌دهیم؛ دامنه مؤلفه مغناطیسی میدان تابش برابر با B_{rf} است. احتمال گذار بین حالت‌های بالایی و پایینی به‌ازای هر اتم در واحد زمان برابر است با

$$P = \left(\frac{\mu B_{rf}}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{\Delta\omega} \quad (50)$$

در اینجا μ گشتاور مغناطیسی، و $\Delta\omega$ پهنای مرکب دوتراز است. نتیجه (50) از یک نتیجه استاندارد مکانیک کوانتومی، به‌نام قاعده طلایی فرمی، به‌دست می‌آید.



شکل ۲۱. دستگاهی دوترازی، برای تشریح کار میزر. جمعیت حالت‌های بالایی و پایینی به‌ترتیب برابرند با n_u و n_l . بسامد تابش گسیل‌یافته برابر با ω و پهنای مرکب حالتها برابر با $\Delta\omega = \Delta\omega_u + \Delta\omega_l$ است.

انرژی کل گسیل یافته از آنها در هر دو حالت بالایی و پایینی در واحد زمان عبارت است از

$$\mathcal{P} = \left(\frac{\mu B_{\text{rf}}}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{\Delta\omega} \cdot \hbar\omega \cdot (n_u - n_l) \quad (51)$$

در اینجا \mathcal{P} نمایشگر توان خروجی؛ $\hbar\omega$ انرژی هر فوتون؛ $n_u - n_l$ فزونی تعداد اتمهای n_u که در آغاز قادر به گسیل فوتون بوده‌اند، بر تعداد اتمهای n_l که قادر به جذب فوتون بوده‌اند، است.

در تعادل گرمایی $n_u < n_l$ ، بنابراین گسیل تابش خالصی وجود ندارد، ولی در شرایط غیرتعادل با $n_u > n_l$ گسیل وجود خواهد داشت. اگر با $n_u > n_l$ شروع کنیم و تابش گسیل یافته را دوباره به دستگاه بازتاب دهیم، B_{rf} را افزایش می‌دهیم و در نتیجه گسیلی با آهنگ بالاتر را تحریک می‌کنیم. این تحریک افزایش یافته تا وقتی ادامه می‌یابد که جمعیت حالت بالایی کاهش یابد و با جمعیت حالت پایینی برابر شود. شدت میدان تابش را می‌توان با قرار دادن بلور در کاواک الکترومغناطیسی زیاد کرد. مقداری اتلاف توان در دیواره‌های کاواک وجود خواهد داشت: آهنگ اتلاف توان برابر است با

$$\mathcal{P}_L = \frac{B_{\text{rf}}^2 V}{4\pi} \cdot \frac{\omega}{Q} \quad (\text{CGS}) \quad \boxed{(\text{SI}) \quad \mathcal{P}_L = \frac{B_{\text{rf}}^2}{2\mu_0} \cdot \frac{\omega}{Q}} \quad (52)$$

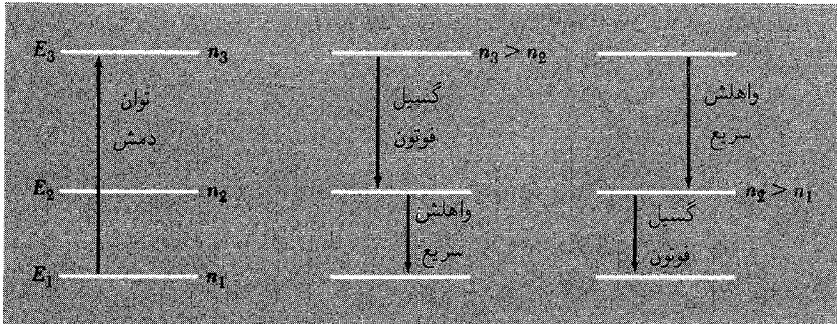
که در آن V حجم و Q ضریب Q کاواک است. درمی‌یابیم که B_{rf}^2 میانگین حجمی است. شرط عمل میز این است که توان گسیل یافته \mathcal{P} از اتلاف توان \mathcal{P}_L زیادتر باشد. هر دو کمیت، B_{rf}^2 را دربر دارند. اکنون می‌توان شرط میز را برحسب فزونی جمعیت در حالت بالایی بیان کرد.

$$n_u - n_l > \frac{V\Delta B}{4\pi\mu Q} \quad (\text{CGS}) \quad \boxed{(\text{SI}) \quad n_u - n_l > \frac{V\Delta B}{2\mu_0\mu Q}} \quad (53)$$

که در آن μ گشتاور مغناطیسی است. پهنای خط ΔB برحسب پهنای خط مرکب حالت‌های بالایی و پایینی، $\Delta\omega$ ، به صورت $\mu\Delta B = \hbar\Delta\omega$ تعریف می‌شود. مسئله اساسی در میز یا لیزر این است که فزونی جمعیت مناسبی را بتوان در حالت بالایی به دست آورد. این امر در وسایل گوناگون به روشهای مختلف انجام می‌گیرد.

میز سه ترازه

دستگاه میز سه ترازه (شکل ۲۲) راه حل زیرکانه‌ای برای مسئله فزونی جمعیت است. همان‌گونه که بلمبرگن^۱ نشان داد، چنین دستگاهی ممکن است ترازهای انرژی خود را از یونهای مغناطیسی واقع بلور بگیرد. توان



شکل ۲۲. دستگاه میز سه ترازه. دو مد ممکن از طرز کار این میز نشان داده شده‌اند، که از اشباع rf حالت‌های ۳ و ۱ شروع می‌کنند تا به $n_3 = n_1$ دست یابند.

rf با بسامد دمش $\hbar\omega_p = E_3 - E_1$ اعمال می‌شود و شدتش باید آنقدر باشد که بتواند جمعیت تراز ۳ را به‌طور اساسی با جمعیت تراز ۱ برابر نگاه‌دارد. این امر را اشباع نامند (مسئله ۶ را ببینید). اکنون آهنگ تغییر جمعیت n_2 تراز ۲ را، که از فرایندهای واهلش گرمایی عادی ناشی می‌شود، در نظر بگیرید. برحسب آهنگ P گذارهای نشان داده شده داریم

$$dn_2/dt = -n_2P(2 \rightarrow 1) - n_2P(2 \rightarrow 3) + n_3P(3 \rightarrow 2) + n_1P(1 \rightarrow 2) \quad (54)$$

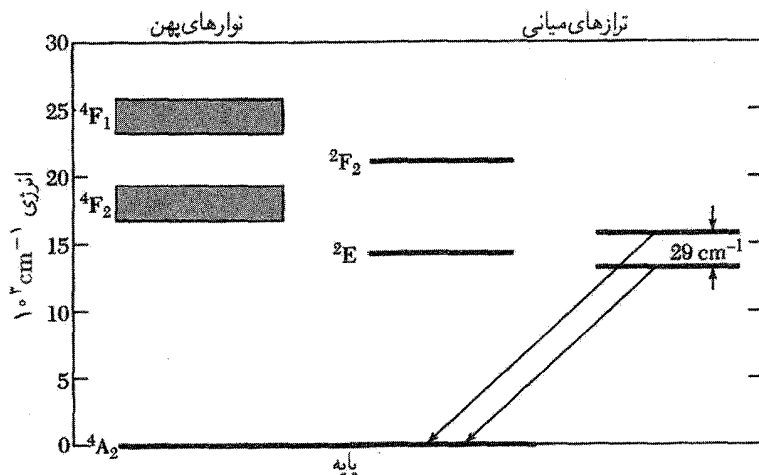
در حالت پایا $dn_2/dt = 0$ ، و به علت توان اشباعی rf داریم $n_3 = n_1$ ، و در نتیجه

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{P(3 \rightarrow 2) + P(1 \rightarrow 2)}{P(2 \rightarrow 1) + P(2 \rightarrow 3)} \quad (55)$$

آهنگ گذارها تحت تأثیر بسیاری از جزئیات یون پارامغناطیسی و محیط اطرافش قرار می‌گیرد، ولی چنین دستگاهی به‌ندرت ناموفق می‌شود، زیرا یا $n_2 > n_1$ و بین ترازهای ۲ و ۱ عمل میز خواهیم داشت، یا در غیراین صورت $n_2 < n_1 = n_3$ و بین ترازهای ۳ و ۲ عمل میز خواهیم داشت. ترازهای انرژی یون Er^{3+} در تقویت‌کننده‌های تار نوری مخابراتی به‌کار می‌روند. این یون به‌طور نوری از تراز ۱ به تراز ۳ دمیده می‌شود؛ واپاشی غیرتابشی سریع از تراز ۳ به تراز ۲ وجود دارد. علامت در طول موج $1.55 \mu\text{m}$ با گسیل تحریک‌شده از تراز ۲ به تراز ۱ تقویت می‌شود. طول موج برای انتشار بلندبرد در تار نوری مطلوب است. پهنای نوار از مرتبه $4 \times 10^{12} \text{ Hz}$ است.

لیزرها

بلور یاقوت، که در میز میکروموجی به‌کار رفت، اولین بلوری بود که برای نشان دادن عمل میز نوری مورد استفاده قرار گرفت، ولی مجموعه متفاوتی از ترازهای انرژی Cr^{3+} استفاده می‌شوند (شکل ۲۳). تقریباً

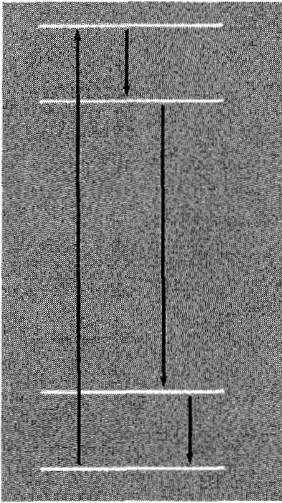


شکل ۲۳. نمودار تراز انرژی Cr³⁺ در یاقوت که در کار کردن لیزر به کار می‌رود. برانگیختگی اولیه به نوارهای پهن صورت می‌گیرد. آنها با گسیل فوتونها به ترازهای میانی واپاشیده می‌شوند و هنگام گذار یون به تراز پایه، ترازهای میانی فوتونها را تابش می‌کنند.

در ۱۵۰۰۰ cm⁻¹ بالای حالت پایه، یک زوج حالت قرار دارد که با 2E مشخص می‌شود و فاصله آنها ۲۹ cm⁻¹ است. در بالای 2E دو نوار پهن از حالت‌های انرژی وجود دارند که با 4F₁ و 4F₂ مشخص می‌شوند. چون این نوارها پهن‌اند، می‌توانند با جذب نور از چشمه‌های نوری با نوار پهن، مانند لامپهای فلاش زنون، به‌طور مؤثری اشغال شوند.

به‌هنگام کار کردن لیزر یاقوتی، هر دو نوار پهن 4F به‌وسیله نور نوار پهن اشغال می‌شوند. اتمهایی که بدین‌ترتیب برانگیخته شده‌اند، در ۱۰^{-۷} ثانیه از طریق فرایندهای بدون تابش با گسیل فوتونها به حالت‌های 2E واپاشیده می‌شوند. گسیل فوتون از حالت پایینی 2E به حالت پایه به آهستگی، در زمانی حدود ۵ × ۱۰^{-۳} روی می‌دهد، در نتیجه یک جمعیت بزرگ برانگیخته می‌تواند در 2E جمع شود. برای اینکه لیزر کار کند، این جمعیت باید از جمعیت حالت پایه بیشتر شود.

اگر ۱۰^{۲۰} یون Cr³⁺ در ۳ cm^۳ در حالت برانگیخته وجود داشته باشد، انرژی انبار شده در یاقوت برابر با ۱۰^۸ erg cm^{-۳} است. اگر تمامی این انرژی ذخیره شده در فوران کوتاهی خارج شود، گسیل لیزر یاقوتی می‌تواند با توان بسیار زیاد رخ دهد. بازده کل تبدیل انرژی الکتریکی ورودی به نور لیزر خروجی در لیزر یاقوتی حدود یک درصد است. یکی دیگر از لیزرهای متداول حالت جامد، لیزر شیشه‌ای نئودیمیم است که از شیشه کلسیم تنگستات آلاینده به یونهای Nd³⁺ ساخته شده است. این لیزر به‌صورت دستگاه چهارترازه (شکل ۲۴) کار می‌کند. در اینجا برای اینکه لیزر کار کند نیازی به تخلیه کامل حالت پایه نیست.



شکل ۲۴. دستگاه لیزر چهارترازه، مانند لیزر شیشه‌ای نئودیمیم.

چکیده

(در دستگاه CGS)

- بسامد تشدید اسپین آزاد برابر است با $\omega_0 = \gamma B_0$ ، که در آن $\gamma = \mu/\hbar I$ نسبت ژیرومغناطیسی است.
- معادلات بلوخ عبارت‌اند از

$$dM_x/dt = \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{B})_x - M_x/T_2$$

$$dM_y/dt = \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{B})_y - M_y/T_2$$

$$dM_z/dt = \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{B})_z + (M_0 - M_z)/T_1$$

- نیم پهنای تشدید در نیم توان برابر است با $(\Delta\omega)_{1/2} = 1/T_2$
- پهنای خط دوقطبی در شبکه صلب برابر است با $(\Delta B)_0 \approx \mu/a^3$
- اگر گشتاورهای مغناطیسی سیار و دارای زمان مشخصه $\tau \ll 1/(\Delta\omega)$ باشند، پهنای خط با ضریب τ کاهش می‌یابد. در این حد $1/T_2 \approx (\Delta\omega)^2 \tau$ با در نظر گرفتن جفت‌شدگی تبادلی در پارامغناطیس، پهنای خط تقریباً برابر با $\omega_{ex}^2 (\Delta\omega)$ می‌شود.
- بسامد تشدید فرومغناطیسی در یک بیضوی با ضریبهای وامغناطیدگی N_x ، N_y و N_z برابر است با $\omega_0^2 = \gamma^2 [B_0 + (N_y - N_z)M][B_0 + (N_x - N_z)M]$

• بسامد تشدید پاد فرومغناطیسی نمونه کروی در میدان اعمال شده صفر برابر است با

$$\omega_0^2 = \gamma^2 B_A (B_A + 2B_E)$$

در اینجا B_A میدان ناهمسانگردی و B_E میدان تبادلگی است.

• شرط کار کردن میز این است که $n_u - n_l > V \Delta B / \lambda \pi \mu Q$.

مسائل

۱. مدار الکتریکی معادل. یک پیچیه خالی با القای L_0 را در نظر بگیرید که با مقاومت R_0 به طور متوالی بسته شده است؛ نشان دهید که اگر این پیچه با یک دستگاه اسپینی که با مؤلفه‌های پذیرفتاری $\chi'(\omega)$ و $\chi''(\omega)$ مشخص می‌شود کاملاً بر شود، القا در بسامد ω برابر با $L = [1 + 4\pi\chi'(\omega)]L_0$ می‌شود و با مقاومت مؤثر $R = 4\pi\omega\chi''(\omega)L_0 + R_0$ متوالی خواهد شد. در این مسئله $\chi = \chi' + i\chi''$ برای میدان rf با قطبش خطی تعریف می‌شود. راهنمایی: مقاومت ظاهری مدار را در نظر بگیرید. (در واحدهای CGS)

۲. دستگاه مختصات دوار. بردار $\mathbf{F}(t) = F_x(t)\hat{x} + F_y(t)\hat{y} + F_z(t)\hat{z}$ را تعریف می‌کنیم. فرض می‌کنیم دستگاه مختصات بردارهای \hat{x} ، \hat{y} ، و \hat{z} با سرعت زاویه‌ای لحظه‌ای Ω دوران کند، در نتیجه $d\hat{x}/dt = \Omega_y\hat{z} - \Omega_z\hat{y}$ و الی آخر. (الف) نشان دهید که $d\mathbf{F}/dt = (d\mathbf{F}/dt)_R + \Omega \times \mathbf{F}$ که در آن $(d\mathbf{F}/dt)_R$ مشتق زمانی \mathbf{F} در چارچوب دوار R است. (ب) نشان دهید که (۷) را می‌توان به صورت $(d\mathbf{M}/dt)_R = \gamma\mathbf{M} \times (\mathbf{B}_a + \Omega/\gamma)$ نوشت که معادله حرکت \mathbf{M} در دستگاه مختصات دوار است. تبدیل به دستگاههای دوار فوق‌العاده مفید است؛ این روش در کتابها به طور گسترده‌ای مورد استفاده قرار می‌گیرد. (ج) فرض کنید $\Omega = -\gamma B_0 \hat{z}$ ؛ در نتیجه در چارچوب دوار هیچ میدان مغناطیسی استاتیکی وجود ندارد. اکنون در چارچوب دوار برای زمان t یک تپ dc به صورت $B_0 \hat{x}$ را اعمال می‌کنیم. اگر در آغاز مغناطیدگی در امتداد \hat{z} باشد، عبارتی را برای طول t ی تپ به گونه‌ای به دست آورید که جهت مغناطیدگی در انتهای تپ در امتداد $-\hat{z}$ باشد. (از آثار واهلش چشم‌پوشی کنید). (د) این تپ را در چارچوب مرجع آزمایشگاه توصیف کنید. ۳. آثار فوق‌ریز روی ESR در فلزات. فرض می‌کنیم اسپین یک الکترون رسانش در فلز، تحت تأثیر میدان مغناطیسی مؤثر ناشی از برهم‌کنش فوق‌ریز اسپین الکترون با اسپین هسته قرار می‌گیرد. مؤلفه z این میدان را که بر الکترون رسانش اثر می‌کند به صورت زیر اختیار کنید:

$$B_i = \left(\frac{a}{N}\right) \sum_{j=1}^N I_j^z$$

که در آن I_j^z با احتمال مساوی می‌تواند $\pm 1/2$ باشد. (الف) نشان دهید که $\langle B_i^y \rangle = (a/2N)^2 N$ (ب) نشان دهید که، برای $N \ll 1$ ، $\langle B_i^z \rangle = 3(a/2N)^2 N^2$.

۴. FMR در میدان ناهمسازگردی. یک نمونه کروی از بلور فرومغناطیسی تک‌محوری را با چگالی انرژی ناهمسازگردی به شکل $U_K = K \sin^2 \theta$ که در آن θ زاویه بین مغناطیدگی و محور z است، در نظر بگیرید. فرض می‌کنیم K مثبت باشد. نشان دهید که بسامد تشدید فرومغناطیسی در میدان مغناطیسی خارجی \hat{z} B_0 به صورت $\omega_0 = \gamma(B_0 + B_A)$ است، که در آن $B_A = 2K/M_s$.

۵. تشدید بسامد تبادلی. فری مغناطیسی با دوز شبکه A و B را با مغناطیدگیهای M_B و M_A در نظر بگیرید؛ وقتی دستگاه اسپینی ساکن است M_B مخالف با M_A است. γ_A و γ_B نسبتهای ژیرومغناطیسی و $B_A = -\lambda M_B$ و $B_B = -\lambda M_A$ میدانهای مولکولی‌اند. نشان دهید که در

$$\omega_0^2 = \lambda^2 (\gamma_A |M_B| - \gamma_B |M_A|)^2$$

تشدید وجود دارد که آن را تشدید بسامد تبادلی می‌نامند.

۶. اشباع Rf. یک دستگاه اسپینی دوترازه در تعادل در دمای T مفروض است که در میدان مغناطیسی \hat{z} دارای جمعیتهای N_1 و N_2 و آهنگهای گذار W_{12} و W_{21} است. یک علامت rf که آهنگ گذار W_{rf} را به دست می‌دهد اعمال می‌کنیم. (الف) معادله‌ای برای dM_z/dt به دست آورید و نشان دهید که در حالت پایا داریم:

$$M_z = M_0 / (1 + 2W_{rf}T_1)$$

که در آن $1/T_1 = W_{12} + W_{21}$. بهتر است بنویسیم $n = N_1 - N_2$ ؛ $N = N_1 + N_2$ و $n_0 = N(W_{21} - W_{12}) / (W_{21} + W_{12})$. مشاهده می‌کنیم تا زمانی که $2W_{rf}T_1 \gg 1$ ، جذب انرژی از میدان rf توزیع جمعیت را از مقدار تعادل گرمایی آن به‌طور چشمگیری تغییر نمی‌دهد. (ب) با به‌کار بردن عبارت مربوط به n ، تعیین کنید که انرژی با چه آهنگی از میدان rf جذب می‌شود. وقتی W_{rf} به $1/2T_1$ می‌رسد چه اتفاقی می‌افتد؟ این اثر را اشباع می‌نامند، و شروع آن را می‌توان برای اندازه‌گیری T_1 به‌کار برد.

پلاسمونها، پولاریتونها، و پولارونها

تابع دی‌الکتریک گاز الکترونی

تابع دی‌الکتریک $\epsilon(\omega, \mathbf{K})$ گاز الکترون، که وابستگی آن به بسامد و بردار موج قوی است، پیامدهای چشمگیری در مورد ویژگیهای فیزیکی جامدات در بر دارد. در یک حد، $\epsilon(\omega, \mathbf{K})$ برانگیختگیهای جمعی دریای فرمی، یعنی پلاسمونهای حجمی و سطحی، را توصیف می‌کند. در حد دیگر، $\epsilon(\omega, \mathbf{K})$ استتار الکتروستاتیکی برهم کنشهای الکترون-الکترون، الکترون-شبکه، و الکترون-ناخالصی را در بلورها توصیف می‌کند.

همچنین برای به دست آوردن طیف پولاریتون، تابع دی‌الکتریک بلور یونی را به کار می‌بریم. سپس در مورد ویژگیهای پولارونها بحث می‌کنیم. ولی نخست به گاز الکترون در فلزات می‌پردازیم.

تعریفهای تابع دی‌الکتریک. ثابت دی‌الکتریک ϵ در مبحث الکتروستاتیک برحسب میدان الکتریکی

\mathbf{E} و قطبیدگی \mathbf{P} ، یعنی چگالی گشتاورهای دوقطبی، به صورت زیر تعریف می‌شود

$$(CGS) \quad \mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = \epsilon\mathbf{E} ; \quad (SI) \quad \mathbf{D} = \epsilon_0\mathbf{E} + \mathbf{P} = \epsilon\epsilon_0\mathbf{E} \quad (1)$$

ϵ با چنین تعریفی، به نام گذردهی نسبی نیز معروف است.

انگیزه به‌کار بردن جابه‌جایی \mathbf{D} این است که بردار \mathbf{D} همان‌طور به چگالی بار اعمال‌شده خارجی ρ_{ext} مربوط می‌شود که \mathbf{E} به چگالی بار کل $\rho = \rho_{ext} + \rho_{ind}$ چگالی باری است که ρ_{ext} در دستگاه القا می‌کند.

بنابراین رابطه واگرایی به صورت زیر است

(CGS)	(SI)	(۲)
$\text{div}\mathbf{D} = \text{div}\epsilon\mathbf{E} = 4\pi\rho_{ext}$	$\text{div}\mathbf{D} = \text{div}\epsilon_0\mathbf{E} = \rho_{ext}$	(۳)
$\text{div}\mathbf{E} = 4\pi\rho = 4\pi(\rho_{ext} + \rho_{ind})$	$\text{div}\mathbf{E} = \rho/\epsilon_0 = (\rho_{ext} + \rho_{ind})/\epsilon_0$	

قسمتهایی از این فصل در دستگاه CGS نوشته خواهند شد؛ برای به‌دست آوردن نتایج در دستگاه SI، $1/\epsilon_0$ را به جای 4π قرار می‌دهیم.

در قسمتهای بعد به روابط بین مؤلفه‌های فوریه \mathbf{D} ، \mathbf{E} ، ρ ، و پتانسیل الکتروستاتیکی φ نیاز خواهیم داشت. در اینجا برای اختصار وابستگی به بسامد را نشان نمی‌دهیم. $\epsilon(\mathbf{K})$ را به گونه‌ای تعریف می‌کنیم که رابطه زیر برقرار باشد

$$\mathbf{D}(\mathbf{K}) = \epsilon(\mathbf{K})\mathbf{E}(\mathbf{K}) \quad (3\text{الف})$$

آنگاه (۳) به این صورت در می‌آید

$$\text{div}\mathbf{E} = \text{div} \sum \mathbf{E}(\mathbf{K})\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) = 4\pi \sum \rho(\mathbf{K})\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) \quad (3\text{ب})$$

و (۲) چنین می‌شود

$$\text{div}\mathbf{D} = \text{div} \sum \epsilon(\mathbf{K})\mathbf{E}(\mathbf{K})\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) = 4\pi \sum \rho_{exp}(\mathbf{K})\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) \quad (3\text{ج})$$

هر یک از این معادلات باید جمله به جمله برقرار شوند؛ یکی را بر دیگری تقسیم می‌کنیم تا عبارت

زیر به‌دست آید.

$$\epsilon(\mathbf{K}) = \frac{\rho_{exp}(\mathbf{K})}{\rho(\mathbf{K})} = 1 - \frac{\rho_{ind}(\mathbf{K})}{\rho(\mathbf{K})} \quad (3\text{د})$$

پتانسیل الکتروستاتیکی φ_{ext} که با $-\nabla\varphi_{ext} = \mathbf{D}$ تعریف می‌شود، در معادله پواسون

$\nabla^2\varphi_{ext} = -4\pi\rho_{ext}$ صدق می‌کند؛ پتانسیل الکتروستاتیکی φ هم که با $-\nabla\varphi = \mathbf{E}$ تعریف

می‌شود، در معادله $\nabla^2 \varphi = -4\pi\rho$ صدق می‌کند. بنابراین مؤلفه‌های فوریه آنها، با استفاده از رابطه (د۳)، باید در معادله زیر صدق کنند:

$$\frac{\varphi_{\text{exp}}(\mathbf{K})}{\varphi(\mathbf{K})} = \frac{\rho_{\text{ext}}(\mathbf{K})}{\rho(\mathbf{K})} = \epsilon(\mathbf{K}) \quad (\text{ه۳})$$

از این رابطه در بررسی پتانسیل کولنی استتار شده استفاده می‌کنیم.

نورشناسی پلاسما

پاسخ دی‌الکتریک به طول موج بلند $\epsilon(\omega, \theta)$ یا $\epsilon(\omega)$ گاز الکترون، از معادله حرکت الکترون آزاد در میدان الکتریکی به دست می‌آید.

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -eE \quad (۴)$$

اگر x و E دارای وابستگی زمانی $e^{-i\omega t}$ باشند، خواهیم داشت

$$-\omega^2 m x = -eE; \quad x = \frac{eE}{m\omega^2} \quad (۵)$$

گشتاور دوقطبی الکترون برابر است با $-ex = -e^2 E / m\omega^2$ ، و قطبیدگی که به صورت گشتاور دوقطبی در واحد حجم تعریف می‌شود برابر است با

$$P = -n e x = -\frac{n e^2}{m\omega^2} E \quad (۶)$$

که در آن n تراکم الکترونهاست.

تابع دی‌الکتریک در بسامد ω برابر است با

$$\epsilon(\omega) \equiv \frac{D(\omega)}{E(\omega)} \equiv 1 + 4\pi \frac{P(\omega)}{E(\omega)} \quad (\text{CGS}) \quad (۷)$$

$$\epsilon(\omega) = \frac{D(\omega)}{\epsilon_0 E(\omega)} = 1 + \frac{P(\omega)}{\epsilon_0 E(\omega)} \quad (\text{SI})$$

تابع دی‌الکتریک گاز الکترون آزاد، با استفاده از روابط (۶) و (۷) چنین است

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{4\pi n e^2}{m\omega^2}; \quad (\text{SI}) \quad \epsilon(\omega) = 1 - \frac{n e^2}{\omega_0 m\omega^2} \quad (۸)$$

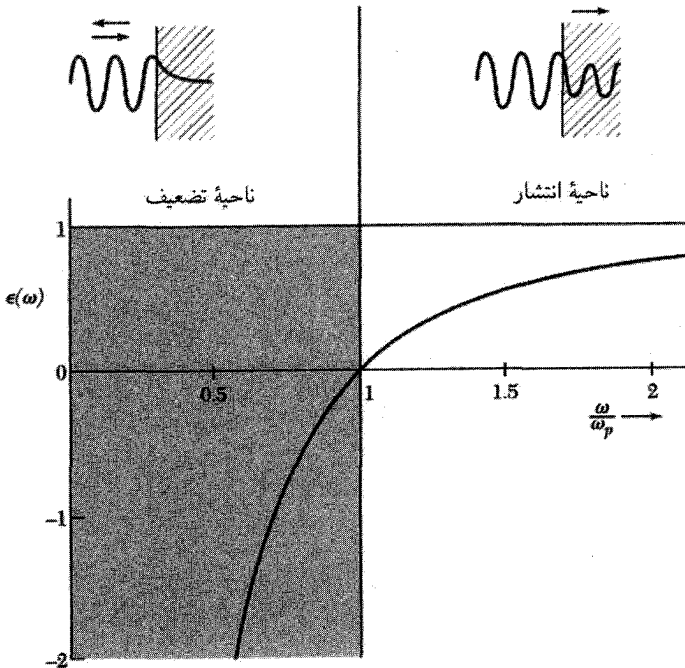
بسامد پلاسما با رابطه

$$(CGS) \quad \omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}; \quad (SI) \quad \omega_p^2 \equiv \frac{n e^2}{\epsilon_0 m} \quad (9)$$

تعریف می‌شود. پلاسما محیطی است که تراکم بارهای منفی و مثبت آن مساوی و در آن لااقل یک نوع بار متحرک است. در جامد، بارهای منفی الکترونها رسانش با یک تراکم مساوی از بارهای مثبت مغزهای یونی موازنه می‌شوند. تابع دی‌الکتریک (۸) را به صورت زیر می‌نویسیم

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (10)$$

این تابع در شکل ۱ رسم شده است.



شکل ۱. تابع دی‌الکتریک $\epsilon(\omega)$ یا $\epsilon(\omega, 0)$ گاز الکترون آزاد برحسب ω/ω_p بسامد پلاسماست. امواج الکترومغناطیسی فقط وقتی بدون میرایی منتشر می‌شوند که ϵ مثبت و حقیقی باشد. وقتی ϵ منفی باشد، امواج الکترومغناطیسی کاملاً از محیط بازتاب می‌یابند.

اگر زمينه مغز یونی مثبت دارای ثابت دی الکترونیک $\epsilon(\infty)$ باشد، که اساساً تا بسامدهایی کاملاً بالاتر از ω_p ثابت است، تابع (۸) به صورت زیر در می آید

$$\epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) \frac{-4\pi ne^2}{m\omega^2} = \epsilon(\infty) [1 - \bar{\omega}_p^2/\omega^2] \quad (11)$$

که $\bar{\omega}_p$ به صورت زیر تعریف می شود

$$\bar{\omega}_p^2 = \frac{4\pi ne^2}{\epsilon(\infty)m} \quad (12)$$

توجه کنید که به ازای $\omega = \bar{\omega}_p$ داریم $\epsilon = 0$.

رابطه پاشیدگی امواج الکترومغناطیسی

در محیط همسانگرد غیرمغناطیسی معادله موج الکترومغناطیسی به صورت زیر است

$$(CGS) \quad \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 \mathbf{E}; \quad (SI) \quad \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = \nabla^2 \mathbf{E} \quad (13)$$

در پی پاسخی هستیم که در آن $\mathbf{E} \propto \exp(-i\omega t) \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})$ و $\mathbf{D} = \epsilon(\omega, \mathbf{K}) \mathbf{E}$ ؛ بنابراین برای امواج الکترومغناطیسی، رابطه پاشیدگی زیر را خواهیم داشت:

$$(CGS) \quad \epsilon(\omega, \mathbf{K}) \omega^2 = c^2 K^2; \quad (SI) \quad \epsilon(\omega, \mathbf{K}) \epsilon_0 \mu_0 \omega^2 = K^2 \quad (14)$$

این رابطه اطلاعات زیادی به ما می دهد. حالات زیر را در نظر بگیرید:

- ϵ حقیقی و بزرگتر از صفر. به ازای ω حقیقی، K حقیقی است و موج الکترومغناطیسی عرضی با سرعت فاز $c/\epsilon^{1/2}$ منتشر می شود.
- ϵ حقیقی و کوچکتر از صفر به ازای ω حقیقی، K موهومی است و موج با طول مشخصه $\lambda/|K|$ میرا می شود.
- ϵ مختلط به ازای ω حقیقی، K مختلط است و امواج در فضا میرا می شوند.
- $\epsilon = \infty$ این رابطه بدان معنی است که دستگاه در غیاب نیروی اعمال شده دارای یک پاسخ متناهی است؛ بنابراین، قطبهای $\epsilon(\omega, \mathbf{K})$ بسامد نوسانهای آزاد محیط را تعریف می کنند.
- $\epsilon = 0$ خواهیم دید که امواج قطبی شده طولی فقط به ازای صفرهای ϵ میسرند.

مدهای اپتیکی عرضی در پلاسما

رابطه پاشیدگی (۱۴) با استفاده از رابطه (۱۱) برای $\epsilon(\omega)$ ، به صورت زیر در می آید

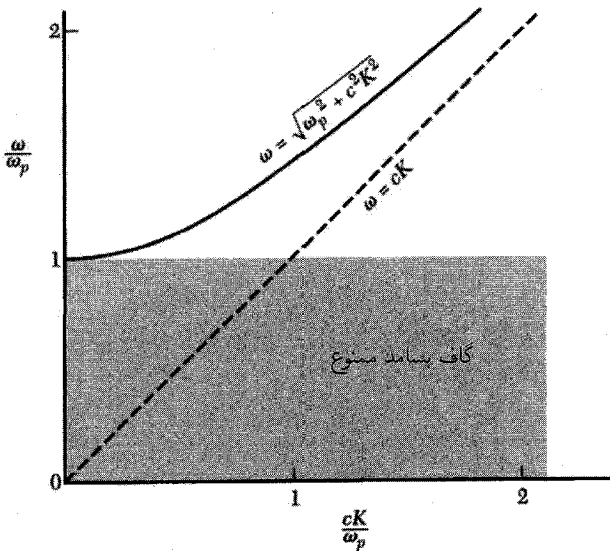
$$(CGS) \quad \epsilon(\omega)\omega^2 = \epsilon(\infty)(\omega^2 - \bar{\omega}_p^2) = c^2 K^2 \quad (15)$$

به ازای $\omega < \bar{\omega}_p$ داریم $K^2 < 0$ ، در نتیجه K موهومی است. پاسخها در گستره بسامدی $0 < \omega < \bar{\omega}_p$ به شکل $\exp(-|K|x)$ هستند. در این ناحیه از بسامد، امواجی که روی محیط فرود می آیند، منتشر نمی شوند، بلکه کاملاً بازتاب می یابند.

گاز الکترون فقط وقتی $\omega > \bar{\omega}_p$ شفاف است، زیرا در اینجا تابع دی الکترونیک مثبت حقیقی است. در این ناحیه پاشیدگی را می توان به صورت زیر نوشت

$$(CGS) \quad \omega^2 = \bar{\omega}_p^2 + c^2 K^2 / \epsilon(\infty) \quad (16)$$

این رابطه امواج الکترومغناطیسی عرضی را در پلاسما توصیف می کند (شکل ۲). مقادیر بسامد پلاسمای ω_p و طول موج فضای آزاد $\lambda_p \equiv 2\pi c / \omega_p$ برای تراکمهای الکترونی موردنظر



شکل ۲. رابطه پاشیدگی امواج الکترومغناطیسی عرضی در پلاسما. سرعت گروه، $v_g = d\omega/dK$ ، برابر با شیب منحنی پاشیدگی است. با اینکه تابع دی الکترونیک بین صفر و یک است سرعت گروه از سرعت نور در خلأ کمتر است.

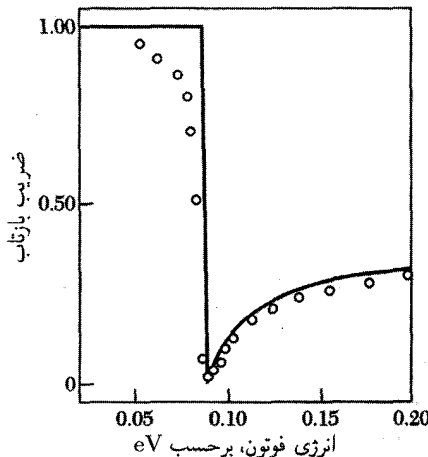
جدول ۱. حدهای تراکسیل فرابنفش فلزات قلیایی برحسب Å

Cs	Rb	K	Na	Li	
۳۶۲۰	۳۲۲۰	۲۸۷۰	۲۰۹۰	۱۵۵۰	λ_p محاسبه شده
-	۳۴۰۰	۳۱۵۰	۲۱۰۰	۱۵۵۰	λ_p مشاهده شده

در زیر داده شده‌اند. موج در صورتی منتشر می‌شود که طول موج فضای آزاد آن از λ_p کوچکتر باشد؛ در غیر این صورت موج بازتابیده می‌شود.

10^{10}	10^{14}	10^{18}	10^{22}	n (cm ³ /الکترون)
5.7×10^9	5.7×10^{11}	5.7×10^{13}	5.7×10^{15}	$(s^{-1})\omega_p$
۳۳	۰.۳۳	3.3×10^{-3}	3.3×10^{-5}	(cm) λ_p

شفافیت فلزات قلیایی در فرابنفش. از بحث قبلی درباره تابع دی‌الکتریک نتیجه می‌گیریم که فلزات ساده باید نور را در ناحیه مرئی بازتاب‌دهنده و برای نور فرابنفش شفاف باشند. مقایسه‌ای بین طول موجهای قطع محاسبه شده و مشاهده شده در جدول ۱ ارائه شده است. بازتاب نور از فلز کاملاً شبیه بازتاب امواج رادیویی از یون‌سپهر است، زیرا الکترونهای آزاد یون‌سپهر ثابت دی‌الکتریک را در بسامدهای پایین منفی می‌کنند. نتایج تجربی برای InSb، با $n = 4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ، در شکل ۳ نشان داده شده‌اند، که بسامد پلاسما نزدیک به ۰.۹ eV است.



شکل ۳. ضریب بازتاب ایندیم آنتیمونید با $n = 4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

نوسانهای طولی پلاسما

صفرهای تابع دی‌الکتریک بسامد مدهای طولی را تعیین می‌کنند. یعنی شرط

$$\epsilon(\omega_L) = 0 \quad (17)$$

بسامد طولی ω_L را در نزدیکی $K = 0$ تعیین می‌کند.

با توجه به شکل هندسی موج قطبشی طولی، یک میدان واقطبییدگی $\mathbf{E} = -4\pi\mathbf{P}$ وجود دارد که در زیر مورد بحث قرار می‌گیرد. بنابراین برای موج طولی در پلاسما یا به‌طور عمومیت در بلور $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = 0$ ، در SI، $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = 0$. هنگامی که تابع دی‌الکتریک گاز الکترون صفر باشد، داریم

$$\epsilon(\omega_L) = 1 - \omega_p^2 / \omega_L^2 = 0 \quad (18)$$

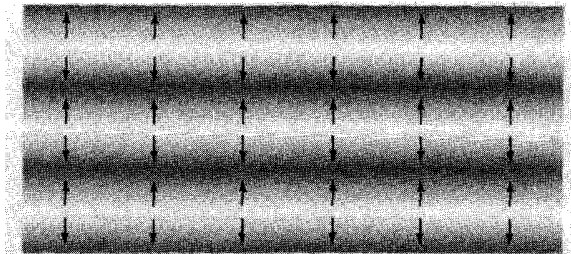
در نتیجه $\omega_L = \omega_p$. بنابراین به ازای بسامد پلاسما، که قبلاً به‌صورت بسامد قطع امواج عرضی الکترومغناطیسی در معادله (۱۵) تعریف شد، یک مد نوسانی طولی آزاد برای گاز الکترون وجود دارد (شکل ۴). در شکل ۵ نوسان طولی پلاسما با $K = 0$ به‌صورت جابه‌جایی یکنواخت گاز الکترون در تیغه نازک فلزی نشان داده شده است. گاز الکترون نسبت به زمینه یونی مثبت به‌صورت کامل حرکت می‌کند. جابه‌جایی U ، میدان الکتریکی $E = 4\pi n e u$ را به‌وجود می‌آورد که به‌صورت نیروی بازگرداننده عمل می‌کند.

معادله حرکت واحد حجم گاز الکترون با تراکم n به‌صورت زیر است

$$(CGS) \quad nm \frac{d^2 u}{dt^2} = -neE = -4\pi n^2 e^2 u \quad (19)$$

یا

$$(CGS) \quad \frac{d^2 u}{dt^2} + \omega_p^2 u = 0; \omega_p = \left(\frac{4\pi n e^2}{m} \right)^{1/2} \quad (20)$$



شکل ۴. نوسان پلاسما. پیکانها جهت جابه‌جایی الکترونها را نشان می‌دهند.

که معادله حرکت نوسانگر هماهنگ ساده با بسامد ω_p ، یعنی بسامد پلاسما، است. این عبارت برای ω_p همانند رابطه (۹) است که در ارتباط دیگری به دست آمد. در SI، جابه جایی u ، میدان الکتریکی $E = neu/\epsilon_0$ را ایجاد می‌کند، که در نتیجه $\omega_p = (ne^2/\epsilon_0 m)^{1/2}$.

نوسان پلاسما با بردار موج کوچک تقریباً دارای بسامد ω_p است. رابطه پاشیدگی برای نوسانهای طولی در گاز فرمی به صورت

$$\omega \cong \omega_p (1 + 3k^2 v_F^2 / 10 \omega_p^2 + \dots) \quad (21)$$

به بردار موج وابسته است، که در آن سرعت الکترون در انرژی فرمی است.

پلاسمونها

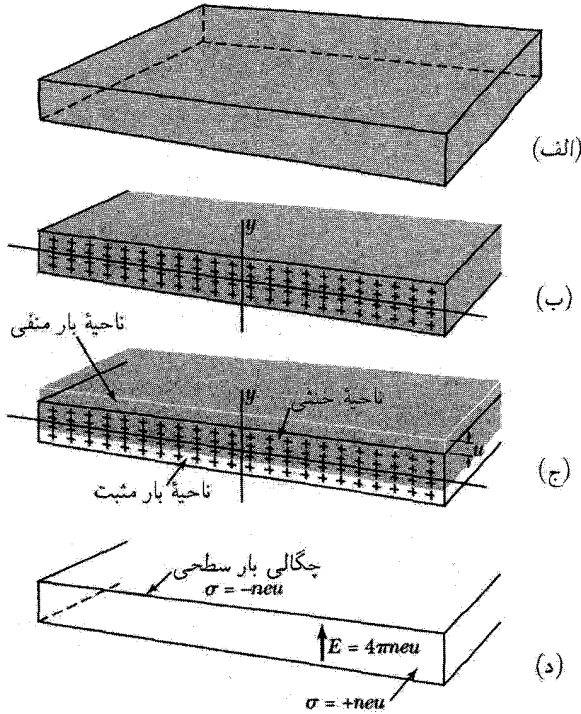
نوسان پلاسما در فلزات عبارت است از برانگیختگی طولی جمعی گاز الکترون رسانش. پلاسمون، کوانتوم نوسان پلاسماست؛ با عبور دادن الکترونی از یک فیلم فلزی نازک (شکلهای ۶ و ۷) یا بازتاب یک الکترون یا یک فوتون از یک فیلم، می‌توان یک پلاسمون برانگیخت. بار الکترون با افت و خیزهای میدان الکتروستاتیکی نوسانهای پلاسما جفت می‌شود. الکترون بازتابیده یا تراگسیلیده اتلاف انرژی‌ای برابر با مضارب درستی از انرژی پلاسمون نشان می‌دهد.

طیف برانگیختگیهای تجربی برای Al و Mg در شکل ۸ نشان داده شده است. مقایسه‌ای بین مقادیر مشاهده شده و محاسبه شده انرژی پلاسمونها در جدول ۲ ارائه شده است؛ داده‌های بیشتری در گردآوریهای ردرا^۱ و دینلز^۲ ارائه شده‌اند. یادآور می‌شود که در پستی تعریف شده در رابطه (۱۲) آثار مغز یونی با استفاده از $\epsilon(\infty)$ گنجانده شده است.

نوسانهای جمعی پلاسما را می‌توان در فیلمهای دی‌الکتریک نیز برانگیخت؛ جدول ۲ نتایج مربوط به چند دی‌الکتریک را نیز شامل می‌شود. انرژیهای محاسبه شده پلاسما برای Ge، Si، و InSb بر مبنای چهار الکترون ظرفیت به ازای هر اتم است. نوسان پلاسما در دی‌الکتریک از نظر فیزیکی با نوسان پلاسما در فلز یکسان است: تمامی دریای الکترون ظرفیت نسبت به مغزهای یونی به عقب و جلو نوسان می‌کند.

استتار الکتروستاتیکی

میدان الکتریکی بار مثبتی که در گاز الکترونی غوطه‌ور است با افزایش r سریعتر از $1/r$ کاهش می‌یابد، زیرا گاز الکترونی به گرد این بار جمع شده و آن را استتار می‌کند. استتار الکتروستاتیکی را می‌توان با وابستگی تابع دی‌الکتریک استاتیکی $\epsilon(\omega, \mathbf{K})$ به بردار موج توصیف کرد. پاسخ الکترونها را به میدان الکتروستاتیکی خارجی اعمال شده در نظر می‌گیریم. با گاز یکنواختی از الکترونها با تراکم بار $-n_0 e$ شروع می‌کنیم که در



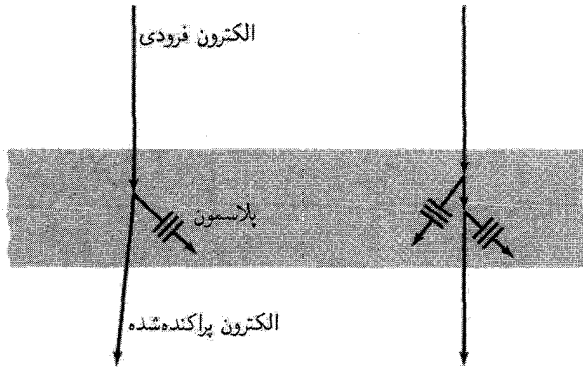
شکل ۵. در (الف) تیغه نازک یا فیلمی از یک فلز نشان داده شده است. در (ب) سطح مقطعی نشان داده شده که در آن مغزهای یونی مثبت با علامتهای + و دریای الکترون با زمینه خاکستری مشخص شده است. این تیغه از نظر الکتریکی خنثی است. در (ج) بار منفی به طور یکنواخت به اندازه فاصله کوچک u که در شکل به طور مبالغه آمیزی نشان داده شده به طرف بالا جابه جا شده است. این جابه جایی، همان گونه که در (د) نشان داده شده است، در سطح بالایی تیغه چگالی سطحی بار $-neu$ و در سطح پایینی چگالی $+neu$ را برقرار می کند، که n تراکم الکترونهاست. میدان الکتریکی $E = 4\pi neu$ درون تیغه ایجاد می شود. این میدان تمایل دارد که دریای الکترون را به موقعیت تعادل (ب) برگرداند. در SI، $E = neu/\epsilon_0$ است.

زمینه آن بارهای مثبت با تراکم $n_0 e$ قرار دارند. حال زمینه بار مثبت به طور مکانیکی تغییر شکل می یابد تا یک تغییر سینوسی در چگالی بار در جهت x ایجاد شود

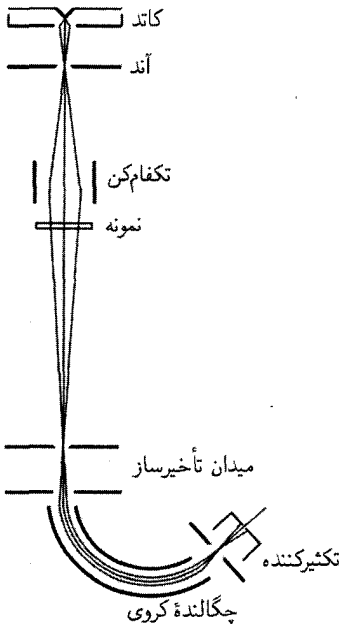
$$\rho^+(x) = n_0 e + \rho_{\text{ext}}(K) \sin Kx \quad (22)$$

جمله $\rho_{\text{ext}}(K) \sin Kx$ باعث ایجاد میدان الکتروستاتیکی می شود که آن را میدان خارجی وارد بر گاز الکترون می نامیم.

پتانسیل الکتروستاتیکی φ یک توزیع بار از معادله پواسون $\nabla^2 \varphi = -4\pi \rho$ که با استفاده از رابطه



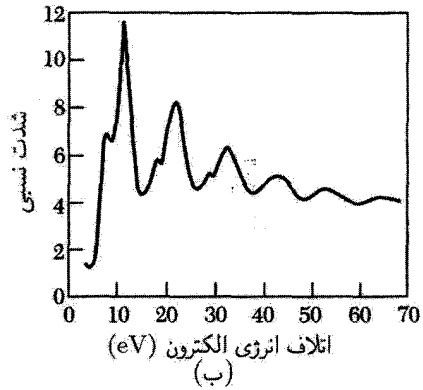
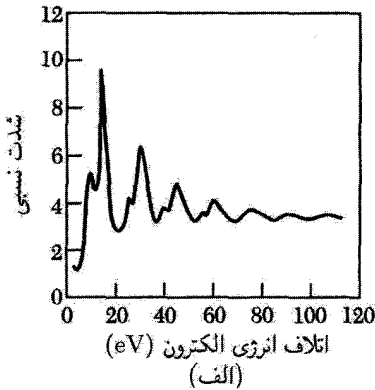
شکل ۶. پراکندگی ناکشسان الکترون پلاسمونی در یک فیلم فلزی ایجاد می‌کند. انرژی الکترون فرودی نوعاً برابر با ۱ تا ۱۰ keV است؛ انرژی پلاسمون ممکن است از مرتبه ۱۰ eV باشد. رویدادی نیز نشان داده شده است که در آن دو پلاسمون به وجود می‌آیند.



شکل ۷. طیف‌سنجی با آنالیزور الکتروستاتیکی برای بررسی برانگیختگی پلاسمونها توسط الکترونها

(۳) $E = -\nabla\varphi$ حاصل می‌شود، به دست می‌دهد. برای بار مثبت داریم

$$\varphi = \varphi_{\text{ext}}(K) \sin Kx; \quad \rho = \rho_{\text{ext}}(K) \sin Kx \quad (۲۳)$$



شکل ۸. طیفهای اتلاف انرژی برای الکترونیهای با انرژی اولیه 2020 eV که از فیلمهای (الف) آلومینیم و (ب) منیزیم بازتاب یافته‌اند. ۱۲ قله اتلاف که در Al مشاهده می‌شوند از ترکیب اتلافهای 103 eV و 153 eV ساخته شده‌اند. اتلاف 103 eV به پلاسماونهای سطحی و اتلاف 153 eV به پلاسماونهای حجمی مربوط است. ۱۰ قله اتلاف که در Mg مشاهده می‌شود از ترکیب پلاسماونهای سطحی 107 eV و پلاسماونهای حجمی 106 eV ساخته شده‌اند. پلاسماونهای سطحی در مسئله ۱ بررسی می‌شوند.

معادله پواسون رابطه زیر را ارائه می‌دهد

$$K^2 \varphi_{\text{ext}}(K) = 4\pi \rho_{\text{ext}}(K) \quad (24)$$

گاز الکترون به علت تأثیر پتانسیل الکتروستاتیکی $\phi_{\text{ext}}(K)$ توزیع بار مثبت و همچنین تأثیر پتانسیل الکتروستاتیکی القاشده $\phi_{\text{ind}}(K) \sin Kx$ ناشی از تغییر شکل خود گاز الکترون، که هنوز نامعلوم است، تغییر شکل می‌یابد. چگالی بار الکترونی برابر است با

$$\rho^-(x) = -n_0 e + \rho_{\text{ind}}(K) \sin(Kx) \quad (25)$$

که در آن $\rho_{\text{ind}}(K)$ دامنه تغییرات چگالی بار القاشده در گاز الکترون است. می‌خواهیم $\rho_{\text{ind}}(K)$ را برحسب $\rho_{\text{ext}}(K)$ به دست آوریم.

دامنه پتانسیل الکتروستاتیکی کل $\varphi(K) = \varphi_{\text{ext}}(K) + \varphi_{\text{ind}}(K)$ توزیع بارهای مثبت و منفی از طریق معادله پواسون به تغییرات چگالی بار کل $\rho(K) = \rho_{\text{ext}}(K) + \rho_{\text{ind}}(K)$ مربوط می‌شود. بنابراین، مانند معادله (۲۴)، خواهیم داشت

$$K^2 \varphi(K) = 4\pi \rho(K) \quad (26)$$

برای ادامه کار به معادله دیگری نیاز داریم که پتانسیل الکتروستاتیکی را به تراکم الکترونی مربوط کند. حال تقریب توماس-فرمی را بررسی می‌کنیم. این تقریب بر مبنای این فرض استوار است که یک پتانسیل

جدول ۲. انرژی پلاسمونهای حجمی بر حسب eV.

مقدار محاسبه شده		مقدار مشاهده شده	ماده
$\hbar\bar{\omega}_p$	$\hbar\omega_p$		
			فلزها
۷۹۶	۸۰۲	۷۱۲	Li
۵۵۸	۵۹۵	۵۷۱	Na
۳۸۶	۴۲۹	۳۷۲	K
	۱۰۹	۱۰۶	Mg
	۱۵٫۸	۱۵٫۳	Al
			دی الکتربها
	۱۶٫۰	۱۶٫۴ - ۱۶٫۹	Si
	۱۶٫۰	۱۶٫۰ - ۱۶٫۴	Ge
	۱۲٫۰	۱۲٫۰ - ۱۳٫۰	InSb

شیمیایی داخلی موضعی را می توان به صورت تابعی از تراکم الکترونی آن نقطه تعریف کرد. اکنون پتانسیل الکتروشیمیایی کل گاز الکترون در حالت تعادل باید ثابت و مستقل از مکان باشد. در ناحیه ای که سهم الکتروستاتیکی پتانسیل شیمیایی وجود ندارد، در صفر مطلق، بر طبق رابطه (۱۷) فصل ۶، خواهیم داشت

$$\mu = \epsilon_F^\circ = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_0)^{2/3} \quad (27)$$

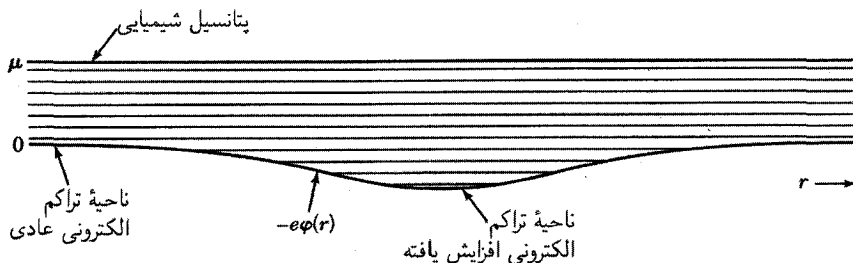
در ناحیه ای که پتانسیل الکتروستاتیکی برابر $\varphi(x)$ باشد، پتانسیل الکتروشیمیایی (شکل ۹) ثابت و برابر است با

$$\mu = \epsilon_F(x) - e\varphi(x) \simeq \frac{\hbar^2}{2m} [3\pi^2 n(x)]^{2/3} - e\varphi(x) \cong \frac{\hbar^2}{2m} [3\pi^2 n_0]^{2/3} \quad (28)$$

که در آن $\epsilon_F(x)$ مقدار مکانی انرژی فرمی است.

عبارت (۲۸) برای پتانسیلهای الکتروستاتیکی ای معتبر است که در مقایسه با طول موج الکترون در تراز فرمی، به ویژه با تقریب $q \ll k_F$ ، به کندی تغییر می کنند. با استفاده از بسط رشته تیلور ϵ_F معادله (۲۸) را می توان چنین نوشت

$$\frac{d\epsilon_F}{dn_0} [n(x) - n_0] \cong e\varphi(x) \quad (29)$$



شکل ۹. پتانسیل الکتروشیمیایی در تعادل گرمایی و بخشی ثابت است؛ برای آنکه آن را ثابت نگهداریم، در ناحیه‌هایی از فضا که انرژی پتانسیل پایین است تراکم الکترونی را زیاد و هرجا پتانسیل بالا باشد این تراکم را کم می‌کنیم

با استفاده از رابطه (۲۷) داریم $d\epsilon_F/dn_0 = 2\epsilon_F/3n_0$ در نتیجه

$$n(x) - n_0 \cong \frac{3}{2} n_0 \frac{e\phi(x)}{\epsilon_F} \quad (30)$$

طرف چپ این معادله بخش القاشده تراکم الکترون است؛ بنابراین مؤلفه‌های فوریه این معادله عبارت‌اند از

$$\rho_{\text{ind}}(K) = -(3n_0 e^2 / 2\epsilon_F) \phi(K) \quad (31)$$

و با استفاده از (۲۶) این معادله به صورت زیر در می‌آید

$$\rho_{\text{ind}}(K) = -(6\pi n_0 e^2 / \epsilon_F K^2) \rho(K) \quad (32)$$

با استفاده از رابطه (۳) داریم

$$\epsilon(\infty, K) = 1 - \frac{\rho_{\text{ind}}(K)}{\rho(K)} = 1 + k_s^2 / K^2 \quad (33)$$

بالاخره، پس از مرتب کردن جملات داریم

$$k_s^2 = 6\pi n_0 e^2 / \epsilon_F = 2(3/\pi)^{1/3} n_0^{1/3} / a_0 = 4\pi e^2 D(\epsilon_F) \quad (34)$$

که در آن a_0 شعاع بور و $D(\epsilon_F)$ چگالی حالتها برای گاز الکترون آزاد است. تقریب (۳۳) برای $\epsilon(\infty, K)$ تابع دی‌الکتریک توماس-فرمی نامیده می‌شود و $1/k_s$ ، همان‌گونه که در رابطه (۴۰) خواهیم دید، طول استتار توماس-فرمی است. برای مس با $n_0 = 8.5 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ طول استتار برابر است با 0.55 \AA .

دو عبارت حدی برای تابع دی‌الکتریک گاز الکترون به دست آورده‌ایم

$$\epsilon(\omega, K) = 1 + \frac{k_s^2}{K^2}; \quad \epsilon(\omega, 0) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (35)$$

مشاهده می‌شود که حد $\epsilon(\omega, K)$ ، هنگامی که $K \rightarrow 0$ با حد $\epsilon(\omega, 0)$ وقتی $\omega \rightarrow 0$ برابر نیست. این بدان معنی است که باید در مورد رفتار تابع دی‌الکتریک در نزدیکی مبدأ صفحه $\omega-K$ دقت زیادی مبذول داشت. نظریه کامل دربارهٔ تابع عمومی $\epsilon(\omega, K)$ مرهون لیندهارد است.^۱

پتانسیل کولنی استتار شده. بار نقطه‌ای q واقع در دریایی از الکترونهاى رسانش را در نظر می‌گیریم. معادلهٔ پواسون برای پتانسیل کولنی استتار نشده عبارت است از

$$\nabla^2 \varphi_0 = -4\pi q \delta(\mathbf{r}) \quad (36)$$

و می‌دانیم که $\varphi_0 = q/r$ است. حال عبارت زیر را می‌نویسیم

$$\varphi_0(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3} \int d\mathbf{K} \varphi_0(\mathbf{K}) \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) \quad (37)$$

در رابطه (۳۶) از نمایش فوریه‌ای تابع دلتا استفاده می‌کنیم

$$\delta(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3} \int d\mathbf{K} \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) \quad (38)$$

$$K^2 \varphi_0(K) = 4\pi q$$

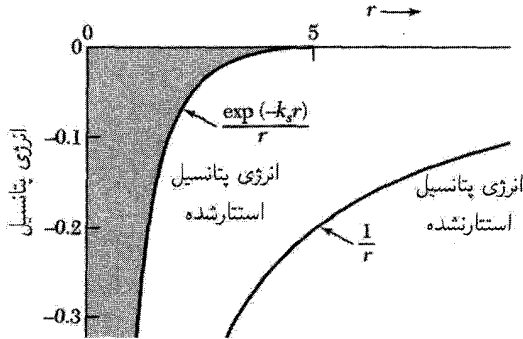
با استفاده از (۳۳)

$$\frac{\varphi_0(K)}{\varphi(K)} = \epsilon(K)$$

که در آن $\varphi(K)$ پتانسیل کل یا پتانسیل استتار شده است. شکل توماس-فرمی، (۳۳)، را برای $\epsilon(K)$ به کار می‌بریم و خواهیم یافت

$$\varphi(\mathbf{K}) = \frac{4\pi q}{K^2 + k_p^2} \quad (39)$$

۱. بحث مطلوبی در مورد تابع دی‌الکتریک لیندهارد در فصل ۵ کتاب



شکل ۱۰ الف. مقایسه پتانسیلهای کولنی استتارنشده واحد بار مثبت استاتیکی. طول استتار k_s^{-1} برابر واحد اختیار شده است. برهم کنش استتار شده استاتیکی در تقریب توماس-فرمی، که برای بردار موجهای پایین $q \ll k_F$ برقرار است، منظور می شود. محاسبات پیچیده تر برای تمام بردار موجها ایجاد نوسانهای فضایی، موسوم به نوسانهای فریدل^۱، در نمایش نوسانهای فریدل برحسب $2k_F r$ می کند که در صفحه ۱۱۴ کتاب QTS ترسیم شده اند.

پتانسیل کولنی استتار شده، همان طور که در شکل ۱۰ الف آمده، برابر است با تبدیل $\varphi(\mathbf{K})$:

$$\begin{aligned} \varphi(r) &= \frac{4\pi q}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dK \frac{2\pi K^2}{K^2 + k_s^2} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \exp(iKr \cos \theta) \\ &= \frac{2q}{\pi r} \int_0^\infty dK \frac{K \sin Kr}{K^2 + k_s^2} = \frac{q}{r} \exp(-k_s r) \end{aligned} \quad (40)$$

پارامتر استتار k_s با رابطه (۳۴) تعریف می شود. ضریب نمایی برد پتانسیل کولنی را کاهش می دهد. با قرار دادن $n_0 \rightarrow 0$ ، پتانسیل محض q/r حاصل می شود، زیرا در این صورت $k_s \rightarrow 0$. در حد خلا داریم $\varphi(K) = 4\pi q/K^2$

یک کاربرد برهم کنش استتار شده در مقاومت ویژه بعضی از آلیاژهاست. اتمهای رشته Ga, Zn, Cu, Ge, و As ظرفیتهای ۱، ۲، ۳، ۴، و ۵ را دارند. وقتی یک اتم Ge, Ga, Zn, یا As به صورت جانشین به Cu فلزی افزوده شود، در صورتی که همه الکترونها ظرفیت آن به نوار رسانش فلز میزبان ببینند، این اتم نسبت به Cu بار اضافی ای برابر با ۱، ۲، ۳، یا ۴ خواهد داشت. اتم خارجی الکترونها رسانش را، با برهم کنشی که با پتانسیل کولنی استتار شده داده می شود، پراکنده می کند. این پراکندگی در مقاومت ویژه الکتریکی باقیمانده شرکت می جوید و محاسبات مات^۲ در مورد افزایش مقاومت ویژه با تجربه سازگاری نسبتاً خوبی دارند.

مؤلفه شبه پتانسیل $U(0)$. در تشریح شکل ۲۲ (ب) از فصل ۹ نتیجه ای که در نظریه شبه پتانسیل مهم است بیان کردیم. «برای k بسیار کوچک پتانسیل به $-\frac{1}{4}$ انرژی فرمی می رسد.» این نتیجه را، که به حد یون استتار یافته

فلزات معروف است، می توان از معادله (۳۹) به دست آورد. وقتی آن را به انرژی پتانسیل الکترونی با بار e در داخل فلزی با ظرفیت z و n_0 یون در واحد حجم تبدیل کنیم، مؤلفه انرژی پتانسیل در $k = 0$ به صورت زیر می شود

$$U(0) = -e z n_0 \varphi(0) = -4\pi z n_0 e^2 / k_s^2 \quad (41)$$

در چنین وضعیتی نتیجه (۳۴) برای k_s^2 به صورت زیر خواهد بود

$$k_s^2 = 6\pi z n_0 e^2 / \epsilon_F \quad (42)$$

در نتیجه

$$U(0) = -\frac{2}{3}\epsilon_F \quad (43)$$

گذار فلز-عایق مات

بلوری که از یک اتم هیدروژن به ازای هر یاخته بسط تشکیل شده است، طبق مدل الکترون مستقل، همیشه فلز است، زیرا همواره یک نوار انرژی نیمه-پر وجود دارد که در آن انتقال بار می تواند صورت گیرد. بلوری با یک مولکول هیدروژن در یاخته بسط موضوع دیگری است، زیرا یک نوار می تواند با دو الکترون پر شود. تحت فشار بسیار بالا، مانند فشار سیاره مشتری، ممکن است هیدروژن به صورت فلزی درآید.

ولی شبکه ای از اتمهای هیدروژن را در صفر مطلق در نظر می گیریم: آیا این شبکه فلز است یا عایق؟ پاسخ به ثابت شبکه بستگی دارد، مقادیر کوچک a به فلز و مقادیر بزرگ آن به عایق منجر می شوند. مات برآورد اولیه ای از اندازه بحرانی a_c ثابت شبکه انجام داد که حالت فلزی را از حالت عایق جدا می سازد. $a_c = 4.5a$ ، که در آن $a_0 = \hbar^2 / me^2$ شعاع اولین مدار بور اتم هیدروژن است.

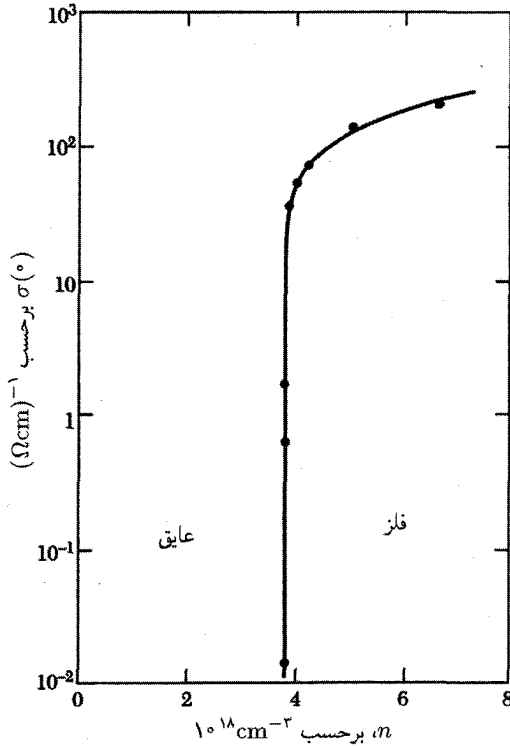
برای نزدیک شدن به این مسئله، از حالت فلزی شروع می کنیم که در آن الکترون رسانش با برهم کنش کولنی استتار شده ای از هر پروتون مواجه می شود:

$$U(r) = -(e^2/r)\exp(-k_s r) \quad (44)$$

که در آن، مانند (۳۴)، $k_s^2 = 3.939n_0^{1/3}/a_0$ و n_0 تراکم الکترونی است. در تراکمهای بالا، k_s بزرگ است و پتانسیل حالت مقید ندارد، در نتیجه باید فلز داشته باشیم.

معلوم شده است که اگر k_s از مقدار $1.19/a_0$ کوچکتر باشد پتانسیل دارای یک حالت مقید است. با امکان چنین حالت مقیدی، ممکن است الکترونها به گرد پروتونها جمع شوند تا عایق تشکیل شود. این نابرابری را می توان برحسب n_0 به این صورت نوشت:

$$3.939n_0^{1/3}/a_0 < 1.42/a_0^2 \quad (45)$$



شکل ۱۰ ب. نمودار نیمه‌لگاریتمی رسانش «دمای صفر» تجربی σ (°) برحسب غلظت دهنده‌های n برای دهنده‌های فسفر در سیلیسیم.

با $n_0 = 1/a^3$ برای شبکه‌ی مکعبی ساده، در صورتی می‌توانیم عایق داشته باشیم که $a_c > 2.78a_0$ ، که به نتیجه $4.9a_0$ مات که با روش متفاوتی به دست آمد، نزدیک است.

عبارت گذار فلز-عایق برای شرایطی آمده است که در آن رسانش الکتریکی فلز برحسب بعضی از پارامترهای خارجی، که ممکن است ترکیب، فشار، کرنش، یا میدان مغناطیسی باشد، از فلز به عایق تبدیل شود. فاز فلزی معمولاً ممکن است برحسب مدل الکترون مستقل متصور شود؛ از فاز عایق ممکن است برهم‌کنشهای مهم الکترون-الکترون به ذهن خطور کند. جایگاههایی که به صورت کاتوره‌ای اشغال می‌شوند، جنبه‌های نو و جالب توجهی به مسئله می‌دهند، جنبه‌هایی که در نظریه‌ی فرونشست^۱ جای دارد. بحث درباره‌ی گذار فرونشستی خارج از محدوده‌ی این کتاب است.

وقتی یک نیمرسانا با غلظتهای افزایشنده‌ی اتمهای دهنده (یا پذیرنده) آغشته می‌شود، یک گذار در فاز فلزی رسانا رخ می‌دهد. نتایج تجربی برای اتمهای p سیلیسیم در شکل ۱۰ ب) نشان داده شده است.

در اینجا گذار عایق-فلز وقتی رخ می دهد که غلظت آن قدر زیاد است که تابعهای موج حالت پایه الکترونها روی اتمهای ناخالصی همسایه به طور قابل ملاحظه ای همپوشانی داشته باشند.

مقدار مشاهده شده غلظت بحرانی در دستگاه آلیاژی Si : P، همان گونه که شکل نشان می دهد، برابر است با $n_c = 3.74 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$. اگر شعاع حالت پایه یک دهنده در Si در تقریب کروی برابر با 10^{-8}cm باشد، آنگاه با توجه به معیار مات $a_c = 1.44 \times 10^{-6} \text{cm}$. عقیده بر آن است که اتمهای P جایگاههای شبکه ای را به طور کاتوره ای اشغال می کنند، ولی اگر شبکه هایشان مکعبی ساده بودند، غلظت بحرانی مات چنین بود:

$$n_c = 1/a_c^3 = 0.33 \times 10^{18} \text{cm}^{-3} \quad (46)$$

که ظاهراً کمتر از مقدار مشاهده شده است. در کتابهای مربوط به نیم رساناها مرسوم است که نیم رسانای قویاً آغشته شده در گستره فلزی را نیم رسانای واگن بنامند.

استتار و فونونها در فلزات

یکی از کاربردهای جالب دو شکل حدی فوق برای تابع دی الکتریک در مورد فونونهای اکوستیکی طولی در فلزات است. برای مدهای طولی، تابع دی الکتریک کل یونها به اضافه الکترونها باید طبق رابطه (۱۷) صفر باشد. در صورتی که سرعت صوت از سرعت فرمی الکترونها کمتر باشد، می توانیم از تابع دی الکتریک توماس-فرمی

$$\epsilon_{el}(\omega, K) = 1 + k_s^2 / K^2 \quad (47)$$

برای الکترونها استفاده کنیم. همچنین، اگر یونها به اندازه کافی از یکدیگر فاصله داشته باشند و مستقل از یکدیگر حرکت کنند، می توانیم برای آنها حد $\epsilon(\omega, 0)$ را همراه با جرم مناسب M به کار ببریم.

تابع دی الکتریک کل، برای شبکه به اضافه الکترونها، ولی بدون قطبش پذیری مغزهای هسته های یونی،

برابر است با

$$\epsilon(\omega, K) = 1 - \frac{4\pi n e^2}{M\omega^2} + \frac{k_s^2}{K^2} \quad (48)$$

برای مقادیر کوچک K و ω از جمله ۱ صرف نظر می کنیم. به ازای یک صفر $\epsilon(\omega, K)$ یا استفاده از

$$\epsilon_F \equiv \frac{1}{4} m v_F^2$$

$$\omega^2 \frac{4\pi n e^2}{M k_s^2} K^2 = \frac{4\pi n e^2}{M} \cdot \frac{\epsilon_F}{4\pi n e^2} K^2 = \frac{m}{3M} v_F^2 K^2 \quad (49)$$

یا

$$\omega = vK; \quad v = (m/3M)^{1/2} v_F \quad (50)$$

این رابطه فونونهای اکوستیکی با طول موج بلند را توصیف می کند.

این نتیجه با سرعت مشاهده شده امواج طولی در فلزات قلیایی سازگاری کاملاً خوبی دارد. برای پتاسیم $v = 1.8 \times 10^5 \text{ cm s}^{-1}$ محاسبه می‌شود. سرعت صوت طولی مشاهده شده در 4K در جهت $[100]$ برابر است با $2.2 \times 10^5 \text{ cm s}^{-1}$.

در مورد یونهای مثبت غوطه‌ور در دریای الکترون، $\epsilon(\omega, K)$ یک صفر دیگر هم دارد. برای بسامدهای بالا سهم دی‌الکتریکی $\omega_p^2/\omega^2 - \omega_p^2/\omega^2$ گاز الکترون را به کار می‌بریم

$$\epsilon(\omega, 0) = 1 - \frac{4\pi ne^2}{M\omega^2} - \frac{4\pi ne^2}{m\omega^2} \quad (51)$$

این، تابع هنگامی که

$$\omega^2 = \frac{4\pi ne^2}{\mu}; \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{M} + \frac{1}{m} \quad (52)$$

صفر خواهد شد. این بسامد پلاسمای (۲۰) الکترون است، ولی در آن، به دلیل حرکت یونهای مثبت، تصحیح جرم کاهیده انجام شده است.

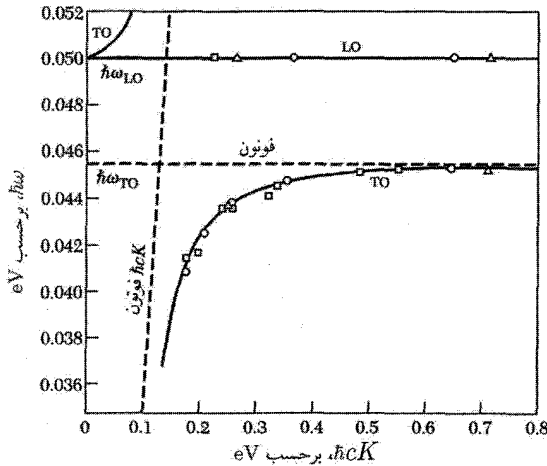
پولاریتونها

فونونهای اپتیکی طولی و فونونهای اپتیکی عرضی در فصل ۴ مورد بحث قرار گرفتند، ولی بررسی برهم‌کنش فونونهای اپتیکی عرضی با امواج الکترومغناطیسی عرضی را به تعویق انداختیم. وقتی این دو موج در تشدیدند، جفت‌شدگی فونون-فونون سرشت انتشار را کاملاً عوض می‌کند، و به دلایلی که هیچ ارتباطی با دوره‌ای بودن شبکه ندارند، نوار ممنوع به وجود می‌آید.

مقصود از تشدید، حالتی است که در آن بسامدها و بردار موجهای هر دو موج تقریباً با یکدیگر برابرند. ناحیه تقاطع دو منحنی خط چین در شکل ۱۱ ناحیه تشدید است. دو منحنی خط چین روابط باشیدگی فونونها و فونونهای اپتیکی عرضی را در غیاب جفت‌شدگی بین آنها نشان می‌دهند. ولی، در واقع، جفت‌شدگی همیشه به طور ضمنی در معادلات ماکسول وجود دارد و با تابع دی‌الکتریک بیان می‌شود. کوانتوم میدان موج عرضی فونون-فونون جفت شده پلاریتون نام دارد.

در این بخش مشاهده می‌کنیم که چگونه این جفت‌شدگی پاسخگوی روابط باشیدگی‌ای است که در شکل به صورت منحنیهای توپر نشان داده شده‌اند. تمام اینها در مقادیر بسیار کوچک بردار موج، در مقایسه با مرز منطقه، صورت می‌گیرد، زیرا در محل تقاطع $\omega \approx 10^{13} \text{ s}^{-1}$ (فونون) = ω (فونون) = ck (فونون) و بنابراین $k \approx 300 \text{ cm}^{-1}$.

هشدار: با اینکه نماد ω_L لزوماً در نظریه ظاهر خواهد شد، این آثار به فونونهای اپتیکی طولی مربوط نیستند. درون بلور فونونهای طولی با فونونهای عرضی جفت نمی‌شوند.



شکل ۱۱. نموداری از انرژیها و بردار موجهای مشاهده شده برای پولاریتونها و فونونهای LO در GaP منحنیهای پاشیدگی نظری با خطوط توپر نشان داده شده اند. منحنیهای پاشیدگی برای فونونها و فونونهای جفت شده با خط چینهای کوتاه نشان داده شده اند.

جفت شدگی میدان الکتریکی E ی فوتون با قطبیدگی دی الکتریک P ی فونون TO با این معادله موج الکترومغناطیسی توصیف می شود:

$$(CGS) \quad c^2 K^2 E = \omega^2 (E + 4\pi P) \quad (53)$$

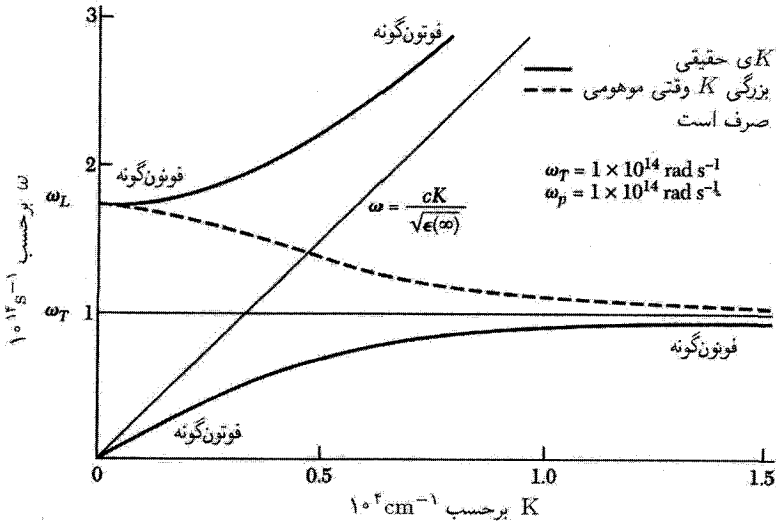
در بردار موجهای کوچک، بسامد فونون TO، یعنی ω_T ، مستقل از K است. قطبیدگی با جابه جایی یونهای مثبت نسبت به یونهای منفی متناسب است، در نتیجه معادله حرکت قطبیدگی نظیر معادله نوسانگر است و می توان آن را با قرار دادن $P = Nqu$ به صورت زیر نوشت

$$-\omega^2 P + \omega_T^2 P = \left(\frac{Nq^2}{M} \right) E \quad (54)$$

که در آن تعداد N زوج یون با بار مؤثر q و جرم کاهیده M در واحد حجم وجود دارد. برای سادگی از سهم الکترونی در قطبیدگی چشم پوشی می کنیم. معادلات (53) و (54) وقتی یک پاسخ دارند که

$$\begin{vmatrix} \omega^2 - c^2 K^2 & 4\pi\omega^2 \\ Nq^2/M & \omega^2 - \omega_T^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (55)$$

این معادله، رابطه پاشیدگی پولاریتون، را، که در شکلهای ۱۱ و ۱۲ رسم شده است، ارائه می دهد. به ازای



شکل ۱۲. مدهای جفت شده فوتونها و فوتونهای اپتیکی عرضی در بلور یونی خط افقی نازک نوسانگرهایی را نمایش می‌دهد که در غیاب جفت‌شدگی با میدان الکترومغناطیسی دارای بسامد ω_T اند، و خط نازکی با $\omega = cK/\sqrt{\epsilon(\infty)}$ نامگذاری شده مربوط به امواج الکترومغناطیسی در بلور است که با نوسانگرهای ω_T شبکه جفت نشده‌اند. خطوط درشت، روابط پاشیدگی در حضور جفت‌شدگی بین نوسانگرهای شبکه و موج الکترومغناطیسی‌اند. یک اثر جفت‌شدگی این است که بین ω_T و ω_L گاف بسامد به وجود می‌آید. در این گاف بردار موج کاملاً موهومی است، که بزرگی آن در شکل با خط چین نشان داده شده است. موج در این گاف به صورت $\exp(-|K|x)$ تضعیف می‌شود و از منحنی مشاهده می‌کنیم که تضعیف در نزدیکی ω_T بسیار قویتر است تا در نزدیکی ω_L . سرشت شاخه‌ها با K تغییر می‌کند؛ در نزدیکی تقاطع اسمی ناحیه‌ای با جنبه‌های مکانیکی-الکتریکی مخلوط وجود دارد. سرانجام، توجه کنید که آشکارا سرعت گروه نور در محیط همیشه کمتر از c است، زیرا شیب $\delta\omega/\delta K$ برای روابط پاشیدگی واقعی (خطوط درشت) همه جا کمتر از شیب، برای فوتون جفت‌نشده در فضای آزاد است.

$K = 0$ دو ریشه وجود دارد، $\omega = 0$ برای فوتون و

$$\omega^2 = \omega_T^2 + 4\pi Nq^2/M \quad (56)$$

برای پولاریتون. در اینجا ω_T بسامد فوتون TO در غیاب جفت‌شدگی با فوتونهاست. تابع دی‌الکتریک که از رابطه (۵۴) به دست می‌آید عبارت است از:

$$\epsilon(\omega) = 1 + 4\pi P/E = 1 + \frac{4\pi Nq^2/M}{\omega_T^2 - \omega^2} \quad (57)$$

اگر مغزهای یونی در قطبیدگی سهم اپتیکی الکترونی داشته باشند، این سهم نیز باید به حساب بیاید. در گستره بسامد از صفر تا فرسوخ می‌نویسیم

$$\epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) + \frac{4\pi Nq^2/M}{\omega_T^2 - \omega^2} \quad (58)$$

که با تعریف $\epsilon(\infty)$ به عنوان ثابت دی‌الکتریک اپتیکی، که برابر است با مربع شاخص شکست اپتیکی، سازگار است.

با قرار دادن $\omega = 0$ تابع دی‌الکتریک استاتیکی را به دست می‌آوریم

$$\epsilon(0) = \epsilon(\infty) + \frac{4\pi Nq^2}{M\omega_T^2} \quad (59)$$

که می‌توان آن را با رابطه (۵۸) ترکیب کرد تا $\epsilon(\omega)$ را برحسب پارامترهای در دسترس به دست آورد:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) + [\epsilon(0) - \epsilon(\infty)] \frac{\omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2}$$

یا

$$\epsilon(\omega) = \frac{\omega_T^2 \epsilon(0) - \omega^2 \epsilon(\infty)}{\omega_T^2 - \omega^2} = \epsilon(\infty) \left(\frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2} \right) \quad (60)$$

صفر $\epsilon(\omega)$ بسامد فونون اپتیکی طولی ω_L را مشخص می‌کند، نمودار $\epsilon(\omega)$ نیز بسامد ω_T را مشخص می‌کند. صفر می‌دهد

$$\epsilon(\infty)\omega_L^2 = \epsilon(0)\omega_T^2 \quad (61)$$

همان‌گونه که در شکل ۱۳ نشان داده شده است، امواج در ناحیه‌ای از بسامد که در آن $\epsilon(\omega)$ منفی است، یعنی بین موضع ϵ در $\omega = \omega_T$ و $\omega = \omega_L$ صفر آن در $\omega = \omega_L$ منتشر نمی‌شوند. در ϵ منفی امواج منتشر نمی‌شوند، زیرا در این صورت K برای ω حقیقی مجازی است و $\exp(-iKx) \rightarrow \exp(-|K|x)$ یعنی در فضا میراست. صفر $\epsilon(\infty)$ ، طبق بحث قبلی ما، برابر با بسامد LO در K پایین است، شکل ۱۴.

بسامد ω_L درست به‌گونه ω_P ، دارای دو مفهوم است، یکی به صورت بسامد LO در K پایین و دیگری به صورت بسامد قطع بالایی نوار ممنوع برای انتشار موج الکترومغناطیسی. مقدار ω_L در هر دو بسامد یکسان است.

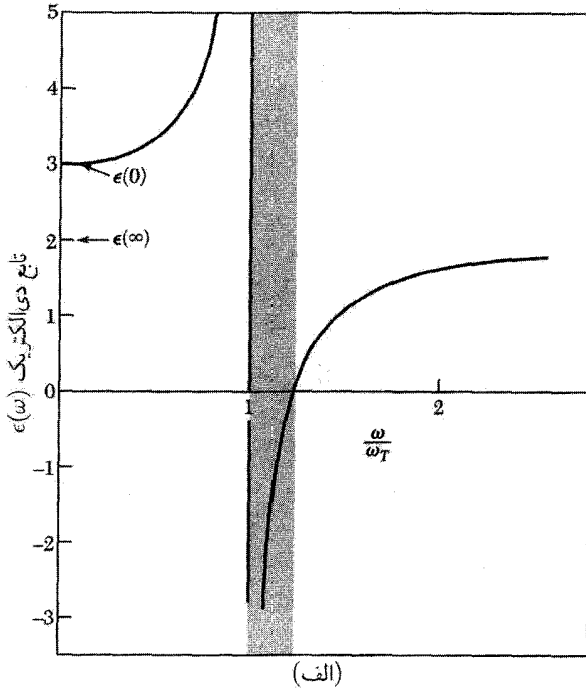
رابطه LST

معادله (۶۱) را به صورت زیر می‌نویسیم

$$\frac{\omega_L^2}{\omega_T^2} = \frac{\epsilon(0)}{\epsilon(\infty)} \quad (62)$$

که در آن $\epsilon(0)$ ثابت دی‌الکتریک استاتیکی و $\epsilon(\infty)$ حد بسامد بالای تابع دی‌الکتریک است که برای در نظر گرفتن سهم الکترونی مغزهای یونی تعریف شده است. این نتیجه رابطه لیدن-زاکس-تلر^۱ است.

1. Lyddane-Sachs-Teller

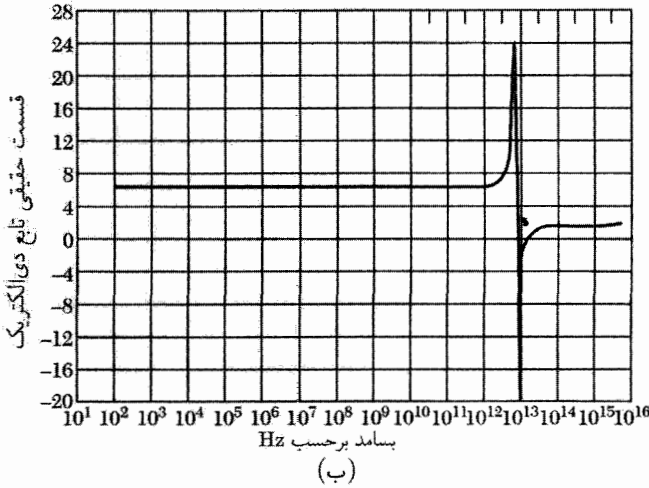


شکل ۱۳ الف. $\epsilon(\omega)$ با استفاده از رابطه (۶۰) برای $\epsilon(\infty) = ۲$ و $\epsilon(0) = ۳$. ثابت دی‌الکتریک بین $\omega = \omega_T$ و $\omega_L = (\frac{3}{2})^{1/2} \omega_T$ یعنی بین موضع (بینهایت) $\epsilon(\omega)$ و صفر $\epsilon(\omega)$ منفی است. امواج الکترومغناطیسی فرودی در نواحی سایه‌زده $\omega_T < \omega < \omega_L$ در محیط منتشر نمی‌شوند، بلکه در مرز بازتابیده می‌شوند.

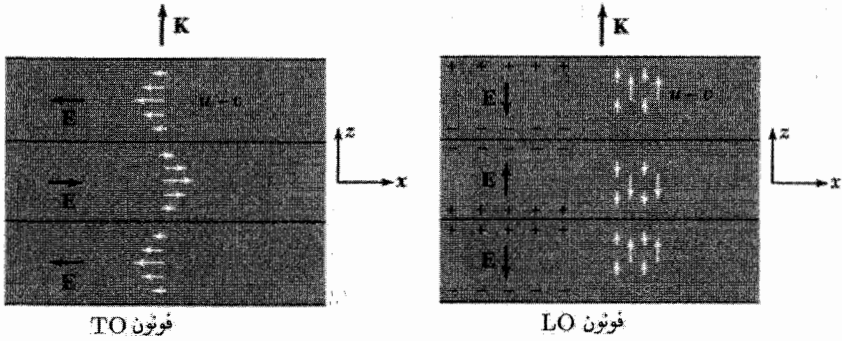
برای به‌دست آوردن این رابطه یک بلور مکعبی با دو اتم در یاخته بسط در نظر گرفته شده است. برای مدهای نرم با $\omega_T \rightarrow 0$ مشاهده می‌کنیم $\epsilon(0) \rightarrow \infty$ ، که یک مشخصه فروالکتریسیته است. امواج الکترومغناطیسی نامیرایی که بسامدشان درون این گاف قرار می‌گیرد نمی‌توانند در بلور ضخیم منتشر شوند. در این ناحیه از بسامد، انتظار می‌رود که ضریب بازتاب سطح بلور بزرگ باشد (مانند شکل ۱۵).

برای فیلمهایی که دارای ضخامتی کمتر از یک طول موج‌اند وضعیت تغییر می‌کند. زیرا برای بسامدهای درون گاف، موج مانند $\exp(-|K|x)$ میرا می‌شود و برای مقادیر کوچک $|K|$ نزدیک به ω_L پرتو ممکن است از فیلم عبور کند؛ ولی برای مقادیر بزرگ $|K|$ نزدیک به ω_T ، موج بازتاب می‌یابد. همان‌گونه که در شکل ۱۶ نشان داده شده است، بسامد ω_L فونونهای اپتیکی طولی را می‌توان با استفاده از بازتاب در فرود غیرعمودی مشاهده کرد.

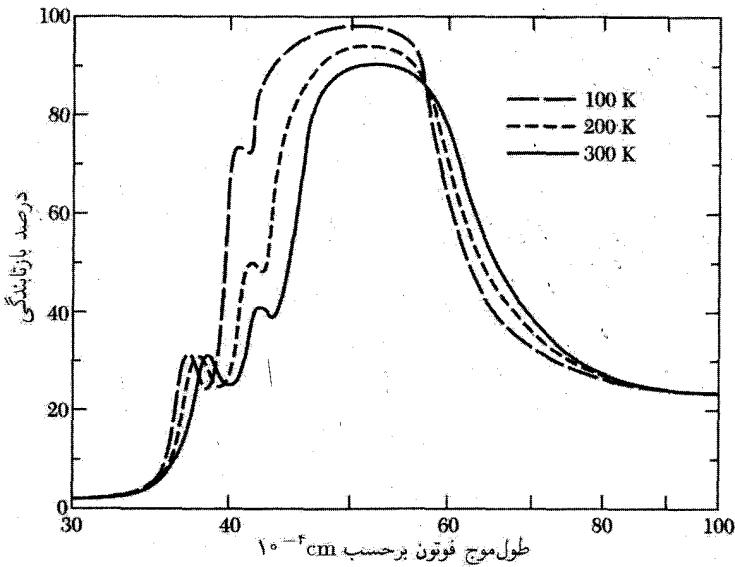
مقادیر تجربی $\epsilon(0)$ ، $\epsilon(\infty)$ و ω_T همراه با مقادیر ω_L که با استفاده از رابطه LST، معادله (۶۲) ،



شکل ۱۳. پ. تابع دی الکتریک (قسمت حقیقی) SrF_2 ، که روی گستره بسامد وسیعی اندازه گیری شده است، کاهش قطبش پذیری را در یک گستره وسیع بسامدی نشان می دهد.



شکل ۱۴. جابه جایی نسبی یونهای مثبت و منفی در یک لحظه از زمان برای موجی با مد اپتیکی که در امتداد z حرکت می کند. صفحه های گرهی (جابه جایی صفر) نشان داده شده اند؛ برای فونونهای با طول موج بلند، صفحات گرهی به اندازه صفحات زیادی از آنها از یکدیگر فاصله دارند. در مد فونون اپتیکی عرضی، جابه جایی ذره بر بردار موج \mathbf{K} عمود است؛ میدان الکتریکی ماکروسکوپی در یک محیط نامتناهی برای مد نشان داده شده فقط در امتداد $\pm x$ قرار دارد، و با استفاده از تقارن مسئله $\partial E_x / \partial x = 0$. به این نتیجه می رسیم که برای فونون TO داریم $\text{div} \mathbf{E} = 0$. در مد فونون اپتیکی طولی جابه جایی ذرات و در نتیجه قطبیدگی دی الکتریک \mathbf{P} با بردار موج موازی است. میدان الکتریکی ماکروسکوپی \mathbf{E} در رابطه $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P} = 0$ در CGS یا $\epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = 0$ در SI صدق می کند؛ با استفاده از تقارن، \mathbf{P} و \mathbf{E} با محور z موازی اند و $\partial E_x / \partial z \neq 0$. بنابراین برای فونون LO داریم $\text{div} \mathbf{E} \neq 0$ و $\epsilon(\omega) \text{div} \mathbf{E} = 0$ فقط وقتی صفر است که داشته باشیم $\epsilon(\omega) = 0$.



شکل ۱۵. ضریب بازتاب بلور NaCl برحسب طول موج در دماهای مختلف. مقادیر اسمی ω_L و ω_T در دمای اتاق، به ترتیب، به طول موجهای $38 \times 10^{-2} \text{ cm}$ و $61 \times 10^{-2} \text{ cm}$ مربوط اند.

محاسبه شده اند، در جدول ۳ ارائه شده اند. مقادیر ω_L/ω_T حاصل از پراکندگی ناکشسان نوترون را با مقادیر تجربی $[\epsilon(0)/\epsilon(\infty)]^{1/2}$ که از اندازه گیریهای الکتریکی به دست آمده اند مقایسه می کنیم:

	NaI	KBr	GaAs
ω_L/ω_T	1.44 ± 0.05	1.39 ± 0.02	1.07 ± 0.02
$[\epsilon(0)/\epsilon(\infty)]^{1/2}$	1.45 ± 0.03	1.38 ± 0.03	1.08

سازگاری با رابطه LST عالی است.

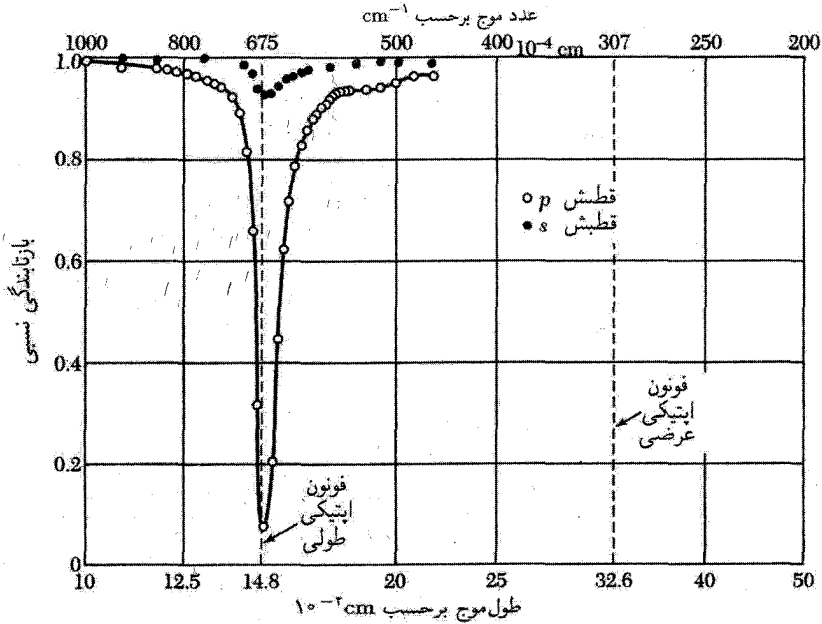
برهم کنش الکترون-الکترون

مایع فرمی

الکترونهاى رسانش به دلیل برهم کنش با یکدیگر، از طریق برهم کنش الکتروستاتیکی، با هم برخورد می کنند. همچنین، الکترون متحرک در گاز الکترون (اطراف خود واکنش لختی ایجاد می کند و در نتیجه جرم مؤثرش زیاد می شود. آثار برهم کنشهای الکترون-الکترون معمولاً در چارچوب نظریه لاندائو در مورد مایع فرمی

جدول ۳. پارامترهای شبکه، عمدتاً در 300°K

بلور	ثابت دی‌الکتریک استاتیکی $\epsilon(\infty)$	ثابت دی‌الکتریک اپتیکی $\epsilon(\omega)$	ω_T برحسب 10^{13}s^{-1} تجربی	ω_L برحسب 10^{13}s^{-1} رابطه LST
LiH	۱۲٫۹	۳٫۶	۱۱	۲۱
LiF	۸٫۹	۱٫۹	۵٫۸	۱۲
LiCl	۱۲٫۰	۲٫۷	۳٫۶	۷٫۵
LiBr	۱۳٫۲	۳٫۲	۳٫۰	۶٫۱
NaF	۵٫۱	۱٫۷	۴٫۵	۷٫۸
NaCl	۵٫۹	۲٫۲۵	۳٫۱	۵٫۰
NaBr	۶٫۴	۲٫۶	۲٫۵	۳٫۹
KF	۵٫۵	۱٫۵	۳٫۶	۶٫۱
KCl	۴٫۸۵	۲٫۱	۲٫۷	۴٫۰
KI	۵٫۱	۲٫۷	۱٫۹	۲٫۶
RbF	۶٫۵	۱٫۹	۲٫۹	۵٫۴
RbI	۵٫۵	۲٫۶	۱٫۴	۱٫۹
CsCl	۷٫۲	۲٫۶	۱٫۹	۳٫۱
CsI	۵٫۶۵	۳٫۰	۱٫۲	۱٫۶
TlCl	۳۱٫۹	۵٫۱	۱٫۲	۳٫۰
TlBr	۲۹٫۸	۵٫۴	۰٫۸۱	۱٫۹
AgCl	۱۲٫۳	۴٫۰	۱٫۹	۳٫۴
AgBr	۱۳٫۱	۴٫۶	۱٫۵	۲٫۵
MgO	۹٫۸	۲٫۹۵	۷٫۵	۱۴
GaP	۱۰٫۷	۸٫۵	۶٫۹	۷٫۶
GaAs	۱۳٫۱۳	۱۰٫۹	۵٫۱	۵٫۵
GaSb	۱۵٫۶۹	۱۴٫۴	۴٫۳	۴٫۹
InP	۱۲٫۳۷	۹٫۶	۵٫۷	۶٫۵
InAs	۱۴٫۵۵	۱۲٫۳	۴٫۱	۴٫۵
InSb	۱۷٫۸۸	۱۵٫۶	۳٫۵	۳٫۷
SiC	۹٫۶	۶٫۷	۱۴٫۹	۱۷٫۹
C	۵٫۵	۵٫۵	۲۵٫۱	۲۵٫۱
Si	۱۱٫۷	۱۱٫۷	۹٫۹	۹٫۹
Ge	۱۵٫۸	۱۵٫۸	۵٫۷	۵٫۷

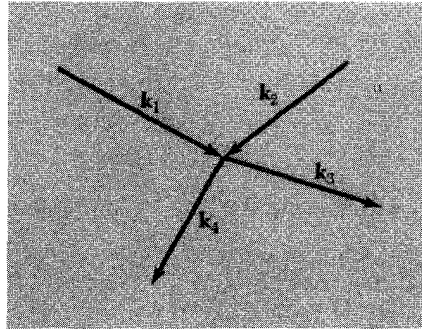


شکل ۱۶. بازتابندگی برحسب طول موج، برای تابش فرودی نزدیک به 30° ، در فیلمی از LiF که پشت آن نقره اندود شده است. فونون اپتیکی طولی تابش قطبی شده (p) در صفحه عمود بر فیلم را قویاً جذب می‌کند، ولی تابش قطبی شده (s) موازی با فیلم را تقریباً اصلاً جذب نمی‌کند.

توصیف می‌شود. هدف این نظریه توجیه یکسان ابر برهم‌کنشهاست. گاز فرمی دستگاهی است شامل فرمیونهای بدون برهم‌کنش، همین دستگاه همراه با برهم‌کنش مایع فرمی است.

نظریه لاندائو برانگیختگیهای تک ذره‌ای و کم انرژی دستگاه الکترونیهای برهم‌کنش دار را به خوبی توضیح می‌دهد. این برانگیختگیهای تک ذره‌ای را شبه ذره می‌نامیم که با برانگیختگیهای تک ذره‌ای گاز الکترون آزاد تناظر یک به یک دارند. شبه ذره را می‌توان به صورت تک ذره‌ای تصور کرد که با ابر واپیچشی در گاز الکترون همراه است. یکی از نتایج برهم‌کنش کولنی بین الکترونها این است که جرم مؤثر الکترون را تغییر می‌دهد؛ در فلزات قلیایی این افزایش تقریباً از مرتبه ۲۵ درصد است.

برخوردهای الکترون-الکترون. یک ویژگی حیرت‌انگیز فلزات این است که در آنها الکترونیهای رسانش؛ با اینکه فاصله‌شان به کوچکی 2\AA است، می‌توانند در بین برخوردهای با یکدیگر فواصلی طولانی بپیمایند. مسافت آزاد میانگین برای برخوردهای الکترون-الکترون در دمای اطاق از 10^4\AA و در 1K از 10cm طولانیتر است.



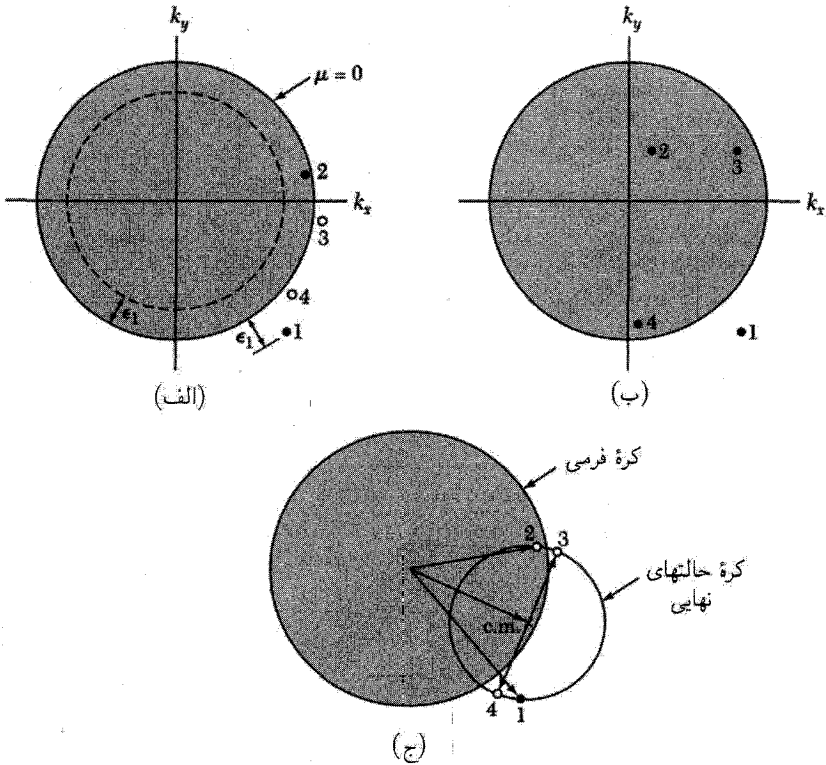
شکل ۱۷. برخوردی بین دو الکترون با بردارهای موج k_1 و k_2 . ذرات پس از برخورد دارای بردارهای موج k_3 و k_4 خواهند شد. اصل طرد پاؤلی برخوردهایی را مجاز می‌داند که فقط به حالت‌های k_3 و k_4 بینجامند، که قبل از برخورد خالی بوده‌اند.

دو عامل باعث می‌شوند که این مسافت‌های آزاد میانگین طولانی باشند. بدون این دو عامل، مدل الکترون آزاد برای فلزات بی‌ارزش می‌شد. مؤثرترین عامل اصل طرد (شکل ۱۷) است و عامل دوم استتار برهم‌کنش کولنی بین دو الکترون است.

اکنون نشان می‌دهیم که چگونه اصل طرد فراوانی برخوردهای یک الکترون را که دارای انرژی برانگیختگی کوچک ϵ_1 در خارج از کره فرمی (شکل ۱۸) است، کاهش می‌دهد. اثر اصل طرد را روی برخورد دو جسمی $4 + 3 \rightarrow 2 + 1$ ، بین یک الکترون در اوربیتال برانگیخته ۱ و الکترون دیگر در اوربیتال ۲ در دریای فرمی، برآورد می‌کنیم. مناسب است که همه انرژیها را با تراز فرمی μ ، که صفر انرژی در نظر گرفته می‌شود، مقایسه کنیم؛ در نتیجه ϵ_1 مثبت و ϵ_2 منفی خواهد بود. اوربیتال‌های ۳ و ۴ الکترون‌ها پس از برخورد، به دلیل اصل طرد پاؤلی و با در نظر گرفتن اینکه تمام اوربیتال‌های داخل کره قبلاً اشغال شده‌اند، باید خارج از کره فرمی قرار گیرند؛ در نتیجه هم ϵ_3 و هم ϵ_4 باید مثبت باشند.

بایستگی انرژی مستلزم آن است که $\epsilon_1 < |\epsilon_2|$ ، زیرا در غیر این صورت $\epsilon_1 + \epsilon_2 = \epsilon_3 + \epsilon_4$ نمی‌تواند مثبت باشد. یعنی برخوردها فقط هنگامی امکان‌پذیرند که اوربیتال ۲، مانند شکل ۱۸ (الف)، در داخل پوسته‌ای به ضخامت ϵ_1 درون سطح فرمی قرار گیرند. در نتیجه کسری تقریباً برابر با ϵ_1/ϵ_2 از الکترون‌های اوربیتال‌های پرهدف مناسبی برای الکترون‌های ۱ فراهم کنند. ولی حتی اگر الکترون هدف ۲ در پوسته انرژی مناسب باشد، به دلیل اصل طرد پاؤلی فقط کسر کوچکی از اوربیتال‌های نهایی مجازند، که با بایستگی انرژی و تکان سازگار باشند. این مطلب یک ضریب دیگر ϵ_1/ϵ_2 به دست می‌دهد.

در شکل ۱۸ (ج) کره کوچکی نشان داده‌ایم که روی آن تمام زوج اوربیتال‌های ۳ و ۴ که در دو طرف یک قطر قرار دارند در قوانین بایستگی صدق می‌کنند، ولی برخوردها فقط در صورتی رخ می‌دهند که دو



شکل ۱۸. در (الف) الکترونی که در اوربیتالهای اولیه ۱ و ۲ هستند، برخورد می‌کنند. اگر اوربیتالهای ۳ و ۴ در ابتدا خالی باشند، الکترونی ۱ و ۲ می‌توانند پس از برخورد، اوربیتالهای ۳ و ۴ را اشغال کنند. انرژی و تکانه پایسته‌اند. در (ب) الکترونها در اوربیتالهای ۱ و ۲ هیچ اوربیتال خالی موجودی که انرژی را در برخورد پایسته نگاه دارد، ندارند. انرژی و تکانه برای اوربیتالهایی نظیر ۳ و ۴ پایسته است، ولی سایر الکترونها قبلاً این اوربیتالها را پر کرده‌اند. در (ج) بردار موج مرکز جرم ۱ و ۲ را با \times نشان داده‌ایم. انرژی و تکانه برای تمام زوج اوربیتالهای ۳ و ۴ به شرطی پایسته است که در دو انتهای یک قطر کرة کوچک قرار داشته باشند. کرة کوچک حول مرکز جرم رسم شده است و از ۱ و ۲ می‌گذرد. از آنجا که به علت اصل طرد پاولی ۳ و ۴ هر دو باید خارج از کرة فرمی قرار گیرند، تنها برخی از زوجهای ۳ و ۴ مجازند، تقریباً کسر ϵ_1/ϵ_F از اوربیتالها مجازند.

اوربیتال ۳ و ۴ در خارج از دریای فرمی قرار گیرند. حاصلضرب دو کسر فوق برابر است با $(\epsilon_1/\epsilon_F)^2$. اگر ϵ_1 با $1K$ و ϵ_F با $5 \times 10^4 K$ متناظر باشد، داریم $10^{-10} \approx 4 \times 10^{-10}$. اصل طرد آهنگ برخورد را با این ضریب کاهش می‌دهد.

این استدلال برای توزیع گرمایی الکترونها در دمای پایین، به گونه‌ای که $k_B T \ll \epsilon_F$ تغییر نمی‌کند. به جای ϵ_1 انرژی گرمایی را که تقریباً برابر $k_B T$ است قرار می‌دهیم، و حال آهنگ برخوردهای الکترون-الکترون

با ضریب $(k_B T / \epsilon_F)^2$ نسبت به مقدار کلاسیکی کاهش می‌یابد، در نتیجه سطح مقطع مؤثر برخورد σ برابر است با

$$\sigma \approx (k_B T / \epsilon_F)^2 \sigma_0. \quad (۶۳)$$

که در آن σ_0 سطح مقطع برهم‌کنش کولنی استوار شده است.

برد برهم‌کنش یک الکترون با الکترون دیگر طبق رابطه (۳۴) از مرتبه طول استوار، $1/k_s$ ، است. محاسبات عددی نشان می‌دهند که سطح مقطع مؤثر همراه با استوار برای برخوردهای بین الکترونها در فلزات نوعی از مرتبه 10^{-15} تا 10^{-2} cm^2 است. تأثیر زمینه‌ گاز الکترونی در برخوردهای الکترون-الکترون باعث می‌شود که مقدار σ در مقایسه با مقداری که از معادله پراکندگی رادفورد برای پتانسیل کولنی استوار نشده انتظار می‌رود، کوچکتر شود، ولی ضریب $(k_B T / \epsilon_F)^2$ پاولی بیشترین کاهش را در σ ایجاد می‌کند. در یک فلز نوعی، $k_B T / \epsilon_F$ در دمای اتاق تقریباً برابر است با 10^{-2} ، در نتیجه

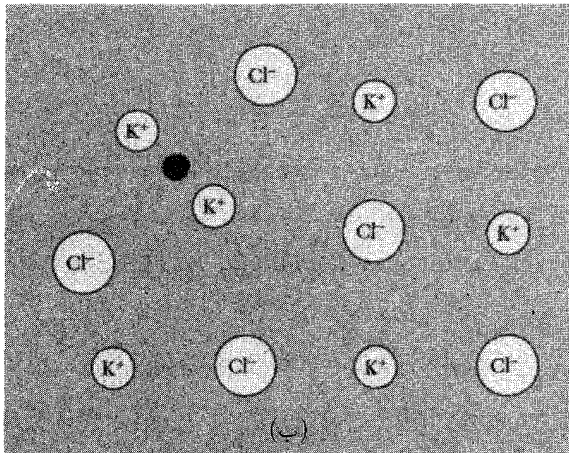
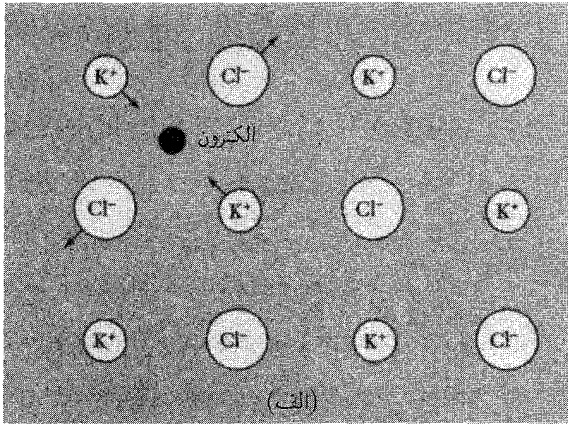
$$\sigma \sim 10^{-4} \sigma_0 \sim 10^{-19} \text{cm}^2$$

مسافت آزاد میانگین برای برخوردهای الکترون-الکترون در دمای اتاق برابر است با $l \approx 1/n\sigma \sim 10^{-4} \text{cm}$ که از مسافت آزاد میانگین مربوط به برخوردهای الکترون-فونون لااقل به اندازه 10 برابر بلندتر است، در نتیجه در دمای اتاق برخورد با فونونها نقش برتر را داراست. در دماهای هلیوم مایع سهمی متناسب با T^2 در مقاومت ویژه ایندیم و آلومینیم گزارش شده است. این امر با سطح مقطع پراکندگی الکترون-الکترون (۶۳) سازگار است. مسافت آزاد میانگین در ایندیم در 2K ، همان‌گونه که از رابطه (۶۳) انتظار می‌رود، از مرتبه 30cm است. بنابراین اصل پاولی یکی از مسائل اصلی در نظریه فلزات را توضیح می‌دهد: چگونه است که الکترونها بدون برخورد با یکدیگر فواصل طولانی را می‌پیمایند.

برهم‌کنش الکترون-فونون: پولارونها

متداولترین اثر برهم‌کنش الکترون-فونون در بستگی مقاومت ویژه الکتریکی به دما دیده می‌شود. مقاومت ویژه الکتریکی برای مس خالص در 0°C برابر با 1.55 میکرواهم-سانتیمتر و در 100°C برابر با 2.28 میکرواهم-سانتیمتر است. فونونها الکترونها را پراکنده می‌کنند، و هر چه دما بالاتر رود فونونهای بیشتری وجود دارند و بنابراین پراکندگی بیشتر است. بالای دمای دبی، تعداد فونونهای گرمایی تقریباً با دمای مطلق متناسب است، و در می‌یابیم که در این ناحیه از دما مقاومت ویژه هر فلزی که به طور معقولی خالص باشد متناسب با دمای مطلق افزایش می‌یابد.

یکی از اثرهای کمتر محسوس در برهم‌کنش الکترون-فونون افزایش ظاهری جرم الکترون در فلزات و عایقه‌هاست. زیرا الکترون، مغزهای یونی سنگین را به دنبال خود می‌کشد. در عایق، ترکیب الکترون با میدان



شکل ۱۹. تشکیل پولارون. (الف) یک الکترون رسانش در شبکه صلب بلور یونی KCl نشان داده شده است. نیروهای وارد بر یونهای مجاور الکترون نشان داده شده‌اند. (ب) الکترون در یک شبکه کشسان یا تغییر شکل‌پذیر نشان داده شده است. الکترون به‌اضافه میدان کرنش وابسته به آن پولارون نامیده می‌شود. جابه‌جایی یونها لختی مؤثر و در نتیجه جرم مؤثر الکترون را زیاد می‌کند؛ در KCl جرم با ضریب ۲٫۵، نسبت به جرم نظریه نواری در شبکه صلب، افزایش پیدا می‌کند. در وضعیتهای فرین، اغلب در مورد حفره‌ها، ذره ممکن است در شبکه خودگرفتار (موضعی) شود. نیروهایی که الکترون بر آنها وارد می‌کند، در بلورهای کووالانسی ضعیفتر از این نیروها در بلورهای یونی است، از این رو تغییر شکلهای پولارونی در بلورهای کووالانسی کوچک‌اند.

کرنش آن پولارون نامیده می‌شود (شکل ۱۹). این اثر در بلورهای یونی، به‌دلیل برهم‌کنش کولنی قوی بین یونها و الکترونها، بزرگ است. در بلورهای کووالان این اثر ضعیف است، زیرا اتمهای خنثی تنها برهم‌کنش ضعیفی با الکترونها دارند.

جدول ۴. ثابتهای جفت‌شدگی α ی پولارونی، جرمهای m_{pol}^* و جرمهای نواری m^* برای الکترونها در نوار رسانش

GaAs	InSb	PbS	ZnO	AgBr	AgCl	KBr	KCl	بلور
۰٫۰۶	۰٫۱۴	۰٫۱۶	۰٫۸۵	۱٫۶۹	۲٫۰۰	۳٫۵۲	۳٫۹۷	α
-	۰٫۱۴	-	-	۰٫۳۳	۰٫۵۱	۰٫۹۳	۱٫۲۵	m_{pol}^*/m
-	۰٫۱۴	-	-	۰٫۲۴	۰٫۳۵	۰٫۴۳	۰٫۵۰	m^*/m
-	۱٫۰	-	-	۱٫۴	۱٫۵	۲٫۲	۲٫۵	m_{pol}^*/m^*

قدرت برهم‌کنش الکترون-شبهه با ثابت جفت‌شدگی بدون بعد α ، که با رابطه زیر داده می‌شود، اندازه‌گیری می‌شود

$$\frac{1}{2}\alpha = \frac{\text{انرژی تغییر شکل}}{\hbar\omega_L} \quad (۶۴)$$

که ω_L بسامد فونون اپتیکی طولی در نزدیکی بردار موج صفر است. $\frac{1}{2}\alpha$ را «تعداد فونونهایی که یک الکترون متحرک کند را در بلور احاطه می‌کنند» در نظر می‌گیریم.

مقادیر α که از نظریه و آزمایشهای گوناگون استنتاج شده‌اند در جدول ۴ با اقتباس از براون داده شده‌اند. مقادیر α در بلورهای یونی بزرگ و در بلورهای کووالانس کوچک‌اند. مقادیر جرم مؤثر پولارون m_{pol}^* از آزمایشهای تشدید سیکلوترونی به دست آمده‌اند. مقادیر داده شده برای جرم مؤثر نواری m^* با استفاده از m_{pol}^* محاسبه شده‌اند. در آخرین سطر جدول ضریب m_{pol}^*/m^* آمده است که تغییر شکل جرم نواری را با این ضریب افزایش می‌دهد.

این نظریه جرم مؤثر پولارون m_{pol}^* را با رابطه زیر به جرم مؤثر نواری m^* الکترون در شبکه تغییر شکل نیافته مربوط می‌کند

$$m_{\text{pol}}^* \cong m^* \left(\frac{1 - 0.0008\alpha^2}{1 - \frac{1}{2}\alpha + 0.0034\alpha^2} \right) \quad (۶۵)$$

به ازای $\alpha \ll 1$ طرف راست این رابطه تقریباً برابر با $m^* \left(1 + \frac{1}{2}\alpha \right)$ می‌شود. از آنجا که ثابت جفت‌شدگی α همیشه مثبت است، همان‌گونه که از لختی یونها انتظار می‌رود، جرم پولارون از جرم خالص آن بیشتر است.

متداول است که از پولارونهای بزرگ و کوچک سخن بگوییم. الکترون وابسته به یک پولارون بزرگ در یک نوار حرکت می‌کند، ولی جرم آن اندکی زیاد می‌شود؛ اینها پولارونهایی‌اند که در بالا مورد بحث قرار گرفتند. الکترون وابسته به پولارون کوچک اکثر اوقات خود را در دام یک تک یون می‌گذراند. در دماهای بالا،

این الکترون با جهشی که به طور گرمایی فعال می شود از یک جایگاه به جایگاه دیگر می رود؛ در دماهای پایین، این الکترون به کندی درون بلور تونل می زند، گویی در نواری با جرم مؤثر زیاد قرار دارد.

حفره ها یا الکترونها می توانند با القای یک تغییر شکل موضعی نامتقارن در شبکه خود گرفتار شوند. بیشترین احتمال وقوع این حالت وقتی است که لبه نوار واگن و بلور قطبی باشد (مانند هالیدهای قلیایی یا هالید نقره). در این مورد جفت شدگی ذره به شبکه قوی است. لبه نوار ظرفیت اغلب از لبه نوار رسانش واگن است. به نظر می رسد که حفره ها در همه هالیدهای قلیایی و در هالید نقره خودگرفتارند.

رسانندگی جامدات یونی در دمای اتاق برای حرکت یونها در بلور عموماً بسیار پایین، کمتر از $10^{-6} / (\Omega\text{-cm})$ است، ولی خانواده ای از ترکیبات گزارش شده اند که رسانندگی آنها در 20°C برابر با $10^{-2} / (\Omega\text{-cm})$ است. این ترکیبات به صورت MAg_4I_5 اند که M نشانگر Rb, K, یا NH_4 است. یونهای Ag^+ فقط کسری از جایگاههای معادل و موجود شبکه را اشغال می کنند، و رسانندگی یونی از طریق جهش یک یون نقره از یک جایگاه به جایگاه خالی نزدیک به آن صورت می گیرد. ساختارهای بلوری آنها نیز دارای کانالهای باز موازی اند.

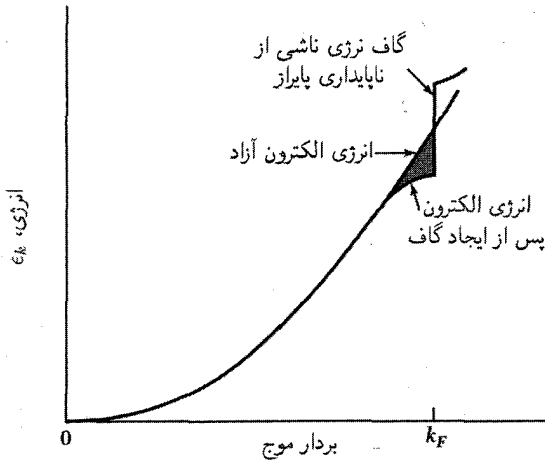
ناپایداری پایریلز در فلزات خطی

یک فلز یک بعدی را در نظر بگیرید که در آن الکترون در دمای صفر مطلق تمام اوربیتالهای نوار رسانش را تا بردار موج k_F پر کند. بنابر نظر پایریلز، این فلز خطی نسبت به تغییر شکل استاتیکی شبکه با بردار موج $G = 2k_F$ ناپایدار است. چنین تغییر شکلی در سطح فرمی گاف انرژی ایجاد می کند، که در نتیجه آن انرژی الکترونها به زیرگاف انرژی پایین آورده می شود شکل 20° . تغییر شکل تا آنجا ادامه می یابد که توسط افزایش انرژی کشسان محدود شود: تغییر شکل در تعادل، Δ ، با ریشه معادله زیر داده می شود

$$\frac{d}{d\Delta} (E_{\text{کشسان}} + E_{\text{الکترونی}}) = 0 \quad (66)$$

کرنش کشسان $\Delta \cos 2k_F x$ را در نظر بگیرید. میانگین فضایی این کرنش کشسان در واحد طول برابر است با $\frac{1}{4} C \Delta^2 \langle \cos^2 2k_F x \rangle = \frac{1}{4} C \Delta^2$ ، که در آن C ثابت نیروی فلز خطی است. اکنون الکترونی E را محاسبه کنیم. فرض کنید سهم یون در پتانسیل شبکه که الکترون رسانش با آن روبه رو می شود، با تغییر شکل متناسب باشد: $U(x) = 2A\Delta \cos 2k_F x$. از رابطه (51) فصل ۷ داریم

$$\epsilon_K = (\hbar^2/2m)(k_F^2 + K^2) \pm [4(\hbar^2 k_F^2/2m)(\hbar^2 K^2/2m) + A^2 \Delta^2]^{1/2} \quad (67)$$



شکل ۲۰. نایابیداری پایلرز. تغییر شکل شبکه انرژی الکترونی را که بردار موج آنها نزدیک به سطح فرمی است، پایین می‌آورد.

مناسب است که کمیات زیر را تعریف کنیم

$$x_K \equiv \hbar^2 K^2 / m; \quad x_F \equiv \hbar^2 k_F^2 / m; \quad x \equiv \hbar^2 K k_F / m$$

علامت منفی را در رابطه (۶۷) ننگه می‌داریم و رابطه زیر را تشکیل می‌دهیم

$$\frac{d\epsilon_K}{d\Delta} = \frac{-A^2 \Delta}{(x_F x_K + A^2 \Delta^2)^{1/2}}$$

که از آنجا، با در نظر گرفتن اینکه dK/π تعداد اوربیتالها در واحد طول است، خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \frac{dE_{\text{الکترونی}}}{d\Delta} &= \frac{2}{\pi} \int_0^{k_F} dK \frac{d\epsilon_K}{d\Delta} = -\frac{2A^2 \Delta / \pi}{(x_F x_K + A^2 \Delta^2)^{1/2}} \int_0^{k_F} dK \\ &= -\frac{2A^2 \Delta / \pi}{(x_F x_K + A^2 \Delta^2)^{1/2}} \int_0^{x_F} \frac{dx}{(x^2 + A^2 \Delta^2)^{1/2}} \\ &= -\frac{2A^2 \Delta / \pi}{(x_F x_K + A^2 \Delta^2)^{1/2}} \sinh^{-1}(x_F / A\Delta) \end{aligned}$$

با توجه به مطالب فوق، تغییر شکل در تعادل برابر است با ریشه معادله زیر

$$\frac{1}{2} C \Delta - \frac{2A^2 m \Delta / \pi \hbar^2 k_F}{(x_F x_K + A^2 \Delta^2)^{1/2}} \sinh^{-1}(\hbar^2 k_F^2 / m A \Delta) = 0$$

ریشه Δ که مربوط به انرژی کمینه است با رابطه زیر داده می شود

$$\hbar^2 k_F^2 / m A \Delta = \sinh(-\hbar^2 k_F \pi C / 4 m A^2) \quad (68)$$

اگر شناسه \sinh در رابطه (68) خیلی بزرگتر از یک باشد، داریم

$$|A| \Delta \simeq (2 \hbar^2 k_F^2 / m) \exp(-\hbar^2 k_F \pi C / 4 m A^2) \quad (69)$$

فرض می کنیم $k_F \leq \frac{1}{4} k_{\max}$.

این نتیجه به شکل معادله گاف انرژی در نظریه BCS ابر رسانایی، فصل ۱۰، است. تغییر شکل Δ یک اثر جمعی همه الکترونهاست. اگر پهنای نوار رسانش را برابر با $W = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ ، چگالی اوربیتالها در تراز فرمی را برابر با $N(0) = 2m / \pi \hbar^2 k_F$ ، و انرژی برهم کنش مؤثر الکترون-الکترون را برابر با $V = 2A^2 / C$ قرار دهیم، می توانیم رابطه (69) را به صورت زیر بنویسیم

$$|A| \Delta \simeq 4W \exp[-1/N(0)V] \quad (70)$$

که شبیه به معادله گاف انرژی BCS است. مثالی از عایق پایلز TaS_3 است.

چکیده

(برحسب واحدهای CGS)

• تابع دی الکتریک را می توان برحسب مؤلفه های چگالی بار القاشده و اعمال شده در \mathbf{K}, ω تعریف کرد:

$$\epsilon(\omega, \mathbf{K}) = \frac{\rho_{\text{ext}}(\omega, \mathbf{K})}{\rho_{\text{ext}}(\omega, \mathbf{K}) + \rho_{\text{ind}}(\omega, \mathbf{K})}$$

- بسامد پلاσμα، $\bar{\omega}_p = [4\pi n e^2 / \epsilon(\infty) m]^{1/2}$ ، بسامد نوسان طولی جمعی یکنواخت گاز الکترون نسبت به زمینه ای از یونهای مثبت ثابت است. این بسامد با بسامد قطع پایین برای انتشار امواج الکترومغناطیسی عرضی در پلاσμα نیز برابر است.
- قطبهای تابع دی الکتریک، ω_T و صفرهای آن، ω_L را تعریف می کنند.
- در پلاσμα برهم کنش کولنی استتار می شود؛ و به صورت $(q/r) \exp(-k_s r)$ در می آید، که طول استتار برابر است با $1/k_s = (\epsilon_F / 6\pi n_e e^2)^{1/2}$.
- وقتی فاصله همسایه اول، a ، از مرتبه $4a$ باشد، که a شعاع اولین مدار بور در عایق است، ممکن است انتقال فلز-عایق رخ دهد. فاز فلزی به ازای مقادیر کوچکتر a وجود دارد.

• پلاریتون کوانتوم میدانهای جفت‌شده فونون TO- فوتون است. این جفت‌شدگی را معادلات ماکسول تأمین می‌کنند. ناحیه طیفی $\omega_L < \omega < \omega_T$ برای انتشار امواج الکترومغناطیسی ممنوع است.

• رابطه لیدن-زاکس-تلر به صورت $\omega_L^2/\omega_T^2 = \epsilon(\infty)/\epsilon(\infty)$ است.

مسائل

۱. پلاسمونهای سطح. یک پلاسمای نیمه‌بینهایت را در طرف مثبت $z = 0$ در نظر بگیرید. یک پاسخ معادله لاپلاس $\nabla^2 \varphi = 0$ در این پلازما به صورت $\varphi_i(x, z) = A \cos kx e^{-kz}$ است که از آنجا $E_{zi} = kA \cos kx e^{-kz}$ و $E_{xi} = kA \sin kx e^{-kz}$. (الف) نشان دهید که $\varphi_o(x, z) = A \cos kx e^{kz}$ در خلا به ازای $z < 0$ ، در این شرط مرزی که مؤلفه مماسی \mathbf{E} در مرز پیوسته است صدق می‌کند؛ یعنی E_{x0} را پیدا کنید. (ب) توجه کنید که $\mathbf{D}_i = \epsilon(\omega)\mathbf{E}_i$ ؛ $\mathbf{D}_o = \mathbf{E}_o$. نشان دهید این شرط مرزی که مؤلفه عمودی \mathbf{D} باید در مرز پیوسته باشد ایجاب می‌کند که $\epsilon(\omega) = -1$ ، که از آنجا، با استفاده از رابطه (۱۰)، نتیجه اشترن-فرل، برای بسامد ω_s یک نوسان پلاسمای سطح، به دست می‌آید:

$$\omega_s^2 = \frac{1}{2} \omega_p^2 \quad (71)$$

۲. پلاسمونهای فصل مشترک. صفحه $z = 0$ را که فصل مشترک فلز ۱ در $z > 0$ و فلز ۲ در $z < 0$ است در نظر می‌گیریم. بسامد پلاسمون حجمی در فلز ۱ برابر است با ω_{p1} و در فلز ۲ برابر است با ω_{p2} ، ثابت دی‌الکتریک در هر دو فلز با ثابت دی‌الکتریک گاز الکترون آزاد برابر است. نشان دهید که بسامد پلاسمونهای سطح مربوط به فصل مشترک برابر است با:

$$\omega = \left[\frac{1}{2} (\omega_{p1}^2 + \omega_{p2}^2) \right]^{1/2}$$

۳. امواج آلفن. جامدی را در نظر بگیرید که در آن تراکم الکترونها، با جرم m_e و حفره‌ها، با جرم m_h برابر باشد. این وضعیت می‌تواند در نیمه فلز یا در نیمرسانای جبران شده رخ دهد. جامد را در میدان مغناطیسی یکنواخت $\mathbf{B} = B\hat{z}$ قرار دهید. مختصه $x + iy = \xi$ را که برای حرکت با قطبش دایره‌ای مناسب است به کار می‌بریم. وابستگی زمانی عمر به صورت $e^{-i\omega t}$ است. فرض کنید که $\omega_e = eB/m_e c$ و $\omega_h = eB/m_h c$. (الف) نشان دهید که در CGS، $\xi_e = eE^+/m_e \omega(\omega + \omega_e)$ و $\xi_h = -eE^+/m_h \omega(\omega - \omega_h)$ عبارت‌اند از جابه‌جاییهای الکترونها و حفره‌ها در میدان الکتریکی $E^+ e^{-i\omega t} = (E_x + iE_y)e^{-i\omega t}$. (ب) نشان دهید که قطبیدگی دی‌الکتریک $P^+ = n(\xi_h - \xi_e)$ را برای $\omega_h \ll \omega_e$ و $\omega \ll \omega_e$ می‌توان به صورت $P^+ = nc^2(m_h + m_e)E^+/B^2$ و تابع دی‌الکتریک را

به صورت $\epsilon(\omega) \equiv \epsilon_l \pi P^+ / E^+ = \epsilon_l + 4\pi c^2 \rho / B^2$ نوشت، که ϵ_l ثابت دی الکتریک شبکه میزبان و $\rho = n(m_e + m_h)$ چگالی جرمی حاملهاست. اگر بتوان از ϵ_l چشم‌پوشی کرد. رابطه پاشیدگی $\epsilon(\omega) = c^2 K^2$ برای امواج الکترومغناطیسی که در جهت z منتشر می‌شوند به صورت $\omega^2 = (B^2 / 4\pi \rho) K^2$ درمی‌آید. چنین امواجی را امواج آلفن می‌نامند و با سرعت ثابت $B / (4\pi \rho)^{1/2}$ منتشر می‌شوند. اگر $B = 10^6 \text{ kG}$ ، $m = 10^{-27} \text{ g}$ ؛ $m = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ، $B = 10^6 \text{ kG}$ ، این سرعت تقریباً برابر با 10^8 cm/s خواهد بود. امواج آلفن در نیمه فلزات و در قطره‌های الکترون-حفره در ژرمانیم (فصل ۱۵) دیده شده‌اند.

۴. امواج مارپیچی (الف) روش مسئله ۳ را در نمونه‌ای که فقط دارای یک نوع حامل، مثلاً حفره با غلظت p باشد در حد $\omega \ll \omega_h = eB/m_h c$ به کار برید. نشان دهید که $\epsilon(\omega) \cong 4\pi p r e^2 / m_h \omega \omega_h$ در آن $D^+(\omega) = \epsilon(\omega) E^+(\omega)$ از جمله ϵ_l در ϵ چشم‌پوشی شده است. (ب) همچنین نشان دهید که رابطه پاشیدگی در CGS به صورت $\omega = (Bc/4\pi p r e) K^2$ درمی‌آید، که همان رابطه پاشیدگی مارپیچی است. بسامد مارپیچی را به ازای $K = 1 \text{ cm}^{-1}$ و $B = 1000 \text{ G}$ در فلز سدیم برآورد کنید. (این بسامد مد منفی است؛ علامت بسامد در مدهای قطبی شده دایره‌ای به جهت دوران مربوط می‌شود.)

۵. مد پلاسمونی کره. بسامد مد پلاسمونی یکنواخت کره توسط میدان واقطبییدگی کره، $\mathbf{E} = -4\pi \mathbf{P} / 3$ تعیین می‌شود، که در آن $\mathbf{P} = -ner$ قطبییدگی و \mathbf{r} میانگین جابه‌جایی الکترونها، با تراکم n است. با استفاده از $\mathbf{F} = ma$ نشان دهید که بسامد تشدید گاز الکترون برابر است با $\omega_p^2 = 4\pi n e^2 / 3m$. چون همه الکترونها در ارتعاش شرکت می‌کنند، این برانگیختگی را برانگیختگی جمعی یا مد جمعی گاز الکترون می‌نامند.

۶. بسامد مغناطو پلاسمایی. از روش مسئله ۵ استفاده کنید و بسامد پلاسمونی یکنواخت را که در میدان مغناطیسی یکنواخت و ثابت \mathbf{B} قرار دارد پیدا کنید. \mathbf{B} را در امتداد محور z بگیرید. این پاسخ باید در یک حد به سوی سیکلوترون $\omega_c = eB/mc$ و در حد دیگر به سوی $\omega_p = (4\pi n e^2 / 3m)^{1/2}$ برود. حرکت را در صفحه xy در نظر بگیرید.

۷. شاخه فوتون در بردار موج پایین. (الف) وقتی $\epsilon(\infty)$ نیز به حساب آید رابطه (۵۶) به چه صورتی درمی‌آید؟ (ب) نشان دهید که پاسخی برای رابطه (۵۱) وجود دارد که به ازای بردار موج کوچک به صورت $\omega = cK / \sqrt{\epsilon(\infty)}$ درمی‌آید. این پاسخ همان است که برای فوتون در بلوری با شاخص شکست $n^2 = \epsilon$ انتظار می‌رود.

۸. بسامد پلاسمای و رسانندگی الکتریکی. اخیراً به کمک بررسیهای اپتیکی آشکار شده است که رسانای آلی در دمای اتاق دارای بسامد پلاسمای $\omega_p = 1.8 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ و زمان واهلش الکترونی $\tau = 2.83 \times 10^{-15} \text{ s}$ است: (الف) رسانندگی الکتریکی را با استفاده از این داده‌ها حساب کنید. جرم

حامل معلوم نیست و در اینجا به آن احتیاجی نیست. $\epsilon(\infty)$ را برابر با یک بگیرید. نتیجه را به واحد $(\Omega \text{cm})^{-1}$ تبدیل کنید. (ب) تراکم الکترونی رسانش، با استفاده از ساختار شیمیایی و ساختار بلوری، برابر است با $10^{21} \text{cm}^{-3} \times 4.7$ جرم مؤثر الکترون m^* را حساب کنید.

۹. مدول حجمی گاز فرمی. نشان دهید که سهم انرژی جنبشی در مدول حجمی گاز الکترون در صفر مطلق برابر است با $B = \frac{1}{2} n m v_F^2$. مناسب است که از رابطه (60) فصل ۶ استفاده شود. از این نتیجه برای B می‌توان استفاده کرد و سرعت صوت را، که در سیال تراکم‌پذیر برابر است با $v = (B/\rho)^{1/2}$ ، پیدا کرد. در نتیجه $v = (m/3M)^{1/2} v_F$ ، که با رابطه (46) سازگار است. در این برآوردها از برهم‌کنشهای جاذب چشم‌پوشی می‌شود.

۱۰. پاسخ گاز الکترونی. گاهی در کتابهای الکترومغناطیس به اشتباه اظهار می‌شود که رسانندگی استاتیکی σ ، که در واحدهای گاوسی دارای بعد بسامد است، بسامد پاسخ فلز را به میدانی الکتریکی که به طور ناگهانی اعمال شود، اندازه می‌گیرد. با به کار بردن این عبارت در مورد مس در دمای اتاق آن را نقد کنید. مقاومت ویژه تقریباً برابر با $1 \mu\Omega \text{cm}$ ، تراکم الکترونی برابر با $8 \times 10^{22} \text{cm}^{-3}$ ، مسیر آزاد میانگین تقریباً برابر با 400Å ، و سرعت فرمی برابر با $1.6 \times 10^8 \text{cm/s}$ است. به همه این داده‌ها لزوماً احتیاج نیست. مرتبه بزرگی سه بسامد σ ، ω_p و $1/\tau$ را که ممکن است به این مسئله مربوط باشند، پیدا کنید. مسئله پاسخ $x(t)$ این دستگاه به میدان الکتریکی $E(t < 0) = 0$ ؛ $E(t > 0) = 1$ را طرح و حل کنید. دستگاه یک ورقه مسی است و میدان عمود بر ورقه اعمال می‌شود. میرایی را نیز در نظر بگیرید. معادله دیفرانسیل را با روشهای مقدماتی حل کنید.

۱۱*. پلاسمونهای گاف و برهم‌کنش وان در والس. دو محیط نیمه‌بینهایت را با سطوح تخت ($z = 0, d$) در نظر بگیرید. تابع دی‌الکتریک این دو محیط همانند، برابر است با $\epsilon(\omega)$. برای پلاسمونهای سطحی که نسبت به گاف متقارن باشند، نشان دهید که بسامد باید در رابطه $\epsilon(\omega) = -\tanh(Kd/2)$ صدق کند، که در آن $K^2 = k_x^2 + k_y^2$. پتانسیل الکتریکی به شکل $\varphi = f(z)\exp(ik_x x + ik_y y - i\omega t)$ خواهد بود.

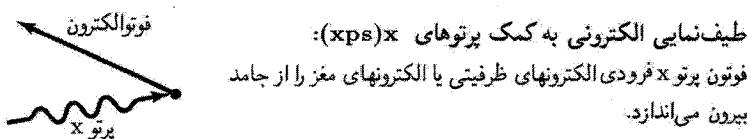
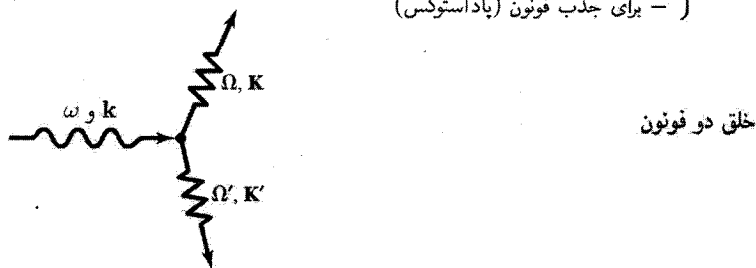
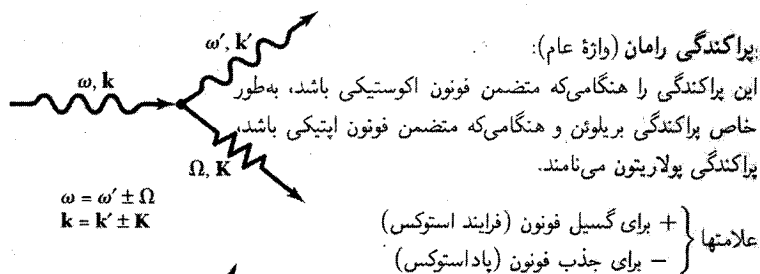
به دنبال پاسخهای غیرتأخیری — یعنی به دنبال پاسخهای معادله لاپلاس به جای پاسخهای معادله موج — بگردید. مجموع انرژیهای نقطه صفر تمام مدهای گاف برابر است با بخش غیرتأخیری جاذبه وان در والس بین دو نمونه.

فرایندهای اپتیکی و اکسیتونها

در فصل قبل، تابع دی‌الکتریک $\epsilon(\omega, \mathbf{K})$ برای توصیف پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیسی معرفی شد (شکل ۱). تابع دی‌الکتریک به طور حساسی به ساختار نواری الکترونی بلور بستگی دارد، و بررسیهای تابع دی‌الکتریک، با استفاده از طیف‌نمایی اپتیکی، در تعیین ساختار نواری کلی بلور بسیار سودمند است. در حقیقت، طیف‌نمایی اپتیکی به مهمترین ابزار تجربی برای تعیین ساختار نواری تبدیل شده است.

در ناحیه‌های طیفی فروسرخ، مرئی، و فرابنفش بردار موج تابش در مقایسه با کوتاهترین بردار شبکه وارون بسیار کوچک است، از این رو آن را معمولاً می‌توان صفر فرض کرد. در نتیجه با بخشهای حقیقی ϵ' و موهومی ϵ'' تابع دی‌الکتریک به ازای بردار موج صفر، یعنی $\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega)$ ، سروکار داریم که به صورت $\epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ نیز نوشته می‌شود.

ولی تابع دی‌الکتریک مستقیماً به طور تجربی، از اندازه‌گیریهای اپتیکی به دست نمی‌آید. کمتهایی که به طور مستقیم دستیافتنی‌اند، عبارت‌اند از بازتابندگی $R(\omega)$ ، شاخص شکست $n(\omega)$ ، و ضریب خاموشی



شکل ۱. انواع بسیاری از آزمایشها وجود دارند که در آنها نور با برانگیختگیهای موج‌گونه درون بلور برهم‌کنش می‌کند. در اینجا چند فرایند جذب نشان داده شده است.

$K(\omega)$ نخستین هدف ما مرتبط ساختن کمیت‌های مشاهده‌پذیر از طریق تجربه، با بخشهای حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک است.

بازتاب اپتیکی

اندازه‌گیرهای اپتیکی‌ای که کاملترین اطلاعات را درباره دستگاه الکترونی به دست می‌دهند، اندازه‌گیرهای ضریب بازتاب نور تحت تابش عمود بر تک‌بلور هستند. ضریب بازتاب $r(\omega)$ تابعی است مختلط که در سطح بلور به صورت نسبت میدان الکتریکی بازتابیده $E(\text{refl})$ به میدان الکتریکی فرودی $E(\text{inc})$ تعریف می‌شود: که در آن مؤلفه‌های دامنه، $\rho(\omega)$ و فاز، $\theta(\omega)$ ، ضریب بازتاب را از یکدیگر جدا کرده‌ایم.

$$\frac{E(\text{refl})}{E(\text{inc})} \equiv r(\omega) \equiv \rho(\omega) \exp(i\theta(\omega)) \quad (1)$$

شاخص شکست $n(\omega)$ و ضریب خاموشی $K(\omega)$ در بلور به صورت زیر به ضریب بازتاب تحت

تابش عمودی مربوط می‌شوند

$$r(\omega) = \frac{n + iK - 1}{n + iK + 1} \quad (2)$$

این رابطه در مسئله ۳، با استفاده از پیوستگی مؤلفه‌های E و B موازی با سطح بلور به دست می‌آید. $n(\omega)$ و $K(\omega)$ بنا به تعریف به صورت زیر به تابع دی‌الکتریک $\epsilon(\omega)$ مربوط می‌شوند

$$\sqrt{\epsilon(\omega)} \equiv n(\omega) + iK(\omega) \equiv N(\omega) \quad (۳)$$

که در آن $N(\omega)$ شاخص شکست مختلط است. $K(\omega)$ را که در اینجا به کار برده شده است با بردار موج اشتباه نکنید.

اگر موج متحرک فرودی دارای بردار موج k باشد، آنگاه مؤلفه y موجی که در راستای x حرکت می‌کند، به قرار زیر است

$$E_y(\text{inc}) = E_{y0} \exp[i(kx - \omega t)] \quad (۴)$$

موج تراگسیل یافته در محیط تضعیف می‌شود، زیرا با استفاده از رابطه پاشیدگی امواج الکترومغناطیسی، بردار موج در محیط با رابطه $(n + iK)k$ به k فرودی در خلا مربوط می‌شود:

$$E_y(\text{trans}) \propto \exp\{i[(n + iK)kx - \omega t]\} = \exp(-Kkx) \exp[i(nkx - \omega t)] \quad (۵)$$

یکی از کمیت‌هایی که در آزمایشها اندازه گرفته می‌شود، بازتابندگی R است، که به صورت نسبت شدت بازتابیده به شدت فرودی تعریف می‌شود:

$$R = E^*(\text{refl})E(\text{refl})/E^*(\text{inc})E(\text{inc}) = r^*r = \rho^2 \quad (۶)$$

اندازه‌گیری فاز، $\theta(\omega)$ ، موج بازتابیده مشکل است، ولی در ادامه نشان می‌دهیم که آن را می‌توان از بازتابندگی اندازه‌گیری شده $R(\omega)$ ، در صورتی که در همه بسامدها معلوم باشد، محاسبه کرد.

با دانستن $R(\omega)$ و $\theta(\omega)$ ، می‌توانیم با استفاده از رابطه (۲) $n(\omega)$ و $K(\omega)$ را به دست آوریم. این کمیتها را در (۳) به کار می‌بریم و $\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega)$ را که در آن $\epsilon'(\omega)$ و $\epsilon''(\omega)$ بخشهای حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک‌اند، به دست می‌آوریم. برگردان رابطه (۳) رابطه‌های زیر را می‌دهد

$$\epsilon'(\omega) = n^2 - K^2, \quad \epsilon''(\omega) = 2nK \quad (۷)$$

اکنون نشان می‌دهیم که چگونه می‌توان فاز $\theta(\omega)$ را به صورت انتگرالی روی بازتابندگی $R(\omega)$ به دست آورد؛ به روشی مشابه، بخشهای حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک را به هم مربوط می‌کنیم. به این طریق می‌توانیم هر چیزی را به کمک $R(\omega)$ تجربی پیدا کنیم.

رابطه‌های کریمرز-کرونیگ

با استفاده از رابطه‌های کریمرز-کرونیگ می‌توانیم بخش حقیقی پاسخ یک دستگاه کنش‌پذیر خطی را به دست آوریم به شرط آنکه بخش موهومی پاسخ در تمام بسامدها معلوم باشد، و برعکس. این رابطه‌ها، در تحلیل آزمایشهای اپتیکی روی جامدها، نقش اصلی را ایفا می‌کنند.

پاسخ هر دستگاه کنش‌پذیر خطی را می‌توان به صورت برهم‌نهی پاسخهای مجموعه‌ای از نوسانگرهای هماهنگ میرا با جرمهای M_j نمایش داد. تابع پاسخ $\alpha(\omega) = \alpha'(\omega) + i\alpha''(\omega)$ مجموعه نوسانگرها را به این صورت تعریف می‌کنیم

$$x_\omega = \alpha(\omega)F_\omega \quad (۸)$$

که در آن میدان نیروی اعمال شده، بخش حقیقی $F_\omega \exp(-i\omega t)$ ، و جابه‌جایی کل $x = \sum_j x_j$ بخش حقیقی $x_\omega \exp(-i\omega t)$ است. از معادله حرکت

$$M_j(d^2/dt^2 + \rho_j d/dt + \omega_j^2)x_j = F$$

تابع مختلط پاسخ دستگاه نوسانگر زیر را داریم

$$\alpha(\omega) = \sum_j \frac{f_j}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega\rho_j} = \sum_j f_j \frac{\omega_j^2 - \omega^2 + i\omega\rho_j}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\rho_j^2} \quad (۹)$$

که در دستگاه کنش‌پذیر ثابتهای $f_j = 1/M_j$ و بسامدهای واهلش ρ_j جملگی مثبت‌اند.

اگر $\alpha(\omega)$ قطبش‌پذیری دی‌الکتریکی اتمهای با غلظت n باشد، f به صورت یک قدرت نوسانگری ضرب در ne^2/m خواهد بود؛ گفته می‌شود که چنین تابع پاسخ دی‌الکتریکی به شکل کریمرز-هایزنبرگ است. رابطه‌هایی که به دست می‌آوریم در مورد رسانندگی الکتریکی $\sigma(\omega)$ در قانون اهم، $j_\omega = \sigma(\omega)E_\omega$ نیز صادق است.

نیاز نداریم شکل ویژه رابطه (۹) را در نظر بگیریم، بلکه از سه ویژگی تابع پاسخ که به صورت تابعی از متغیر مختلط ω در نظر گرفته می‌شود، استفاده می‌کنیم. هر تابعی با ویژگیهای زیر در رابطه‌های کریمرز-کرونیگ (۱۱) صدق می‌کند:

(الف) قطبهای $\alpha(\omega)$ جملگی زیر محور حقیقی باشند.

(ب) انتگرال $\alpha(\omega)/\omega$ گرد نیم‌دایره نامتناهی در نیمه بالایی صفحه ω مختلط صفر شود. کافی است که وقتی $|w| \rightarrow \infty$ ، $\alpha(w)$ به طور یکنواخت به صفر بگراید.

(ج) برای ω حقیقی، تابع $\alpha'(\omega)$ زوج و تابع $\alpha''(\omega)$ فرد باشد.

انتگرال کوشی به شکل زیر را در نظر بگیرید

$$\alpha(\omega) = \frac{1}{\pi i} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha(s)}{s - \omega} ds \quad (10)$$

که در آن P ، به گونه‌ای که در یادداشت ریاضی در ادامه مطرح می‌شود، بخش اصلی انتگرال است. طرف راست باید با انتگرالی روی نیم‌دایره‌ای در بینهایت در نیم‌صفحه بالایی کامل شود، ولی در ویژگی (ب) دیدیم که این انتگرال صفر می‌شود.

بخشهای حقیقی رابطه (۱۰) را با یکدیگر مساوی قرار می‌دهیم و به دست می‌آوریم

$$\alpha'(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha''(s)}{s - \omega} ds = \frac{1}{\pi} P \left[\int_0^{\infty} \frac{\alpha''(s)}{s - \omega} ds + \int_{-\infty}^0 \frac{\alpha''(p)}{p - \omega} dp \right]$$

در انتگرال آخر s را به جای $-p$ قرار می‌دهیم و از ویژگی (ج) مبنی بر اینکه $\alpha''(-s) = -\alpha''(s)$ استفاده می‌کنیم؛ در نتیجه این انتگرال به صورت زیر در می‌آید

$$\int_0^{\infty} \frac{\alpha''(s)}{s + \omega} ds$$

و با استفاده از

$$\frac{1}{s - \omega} + \frac{1}{s + \omega} = \frac{2s}{s^2 - \omega^2}$$

داریم

$$\alpha'(\omega) = \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{s \alpha''(s)}{s^2 - \omega^2} ds \quad (11 \text{ الف})$$

این یکی از رابطه‌های کریمز-کرونینگ است. رابطه دیگر با برابر نهادن بخشهای موهومی معادله (۱۰)

به دست می‌آید:

$$\alpha''(\omega) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha'(s)}{s - \omega} ds = -\frac{1}{\pi} P \left[\int_0^{\infty} \frac{\alpha'(s)}{s - \omega} ds - \int_0^{\infty} \frac{\alpha'(s)}{s + \omega} ds \right]$$

که از آن نتیجه می‌شود

$$\alpha''(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{s \alpha'(s)}{s^2 - \omega^2} ds \quad (11 \text{ ب})$$

در ادامه از این رابطه‌ها برای تحلیل داده‌های بازتابندگی ایتیکی استفاده خواهد شد؛ این مهمترین کاربرد آنهاست.

رابطه‌های کریمرزکرونیگ را برای $r(\omega)$ به کار می‌بریم، که به صورت تابع پاسخ بین امواج فرودی و بازتابیده در روابط (۱) و (۶) در نظر گرفته می‌شود.
 رابطه (۱۱) را در مورد کمیت زیر به کار می‌بریم

$$\ln r(\omega) = \ln R^{1/2}(\omega) + i\theta(\omega) \quad (12)$$

تا فاز را برحسب بازتابندگی به دست آوریم:

$$\theta(\omega) = -\frac{\omega}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\ln R(s)}{s^2 - \omega^2} ds \quad (13)$$

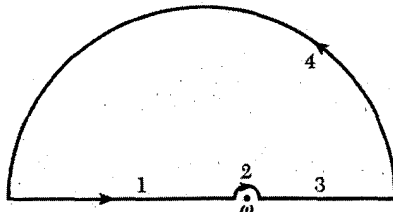
انتگرال جزء به جزء می‌گیریم تا رابطه‌ای به دست آوریم که بیشی در مورد سهمهای زاویه فاز ارائه دهد:

$$\theta(\omega) = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \ln \left| \frac{s + \omega}{s - \omega} \right| \frac{d \ln R(s)}{ds} ds \quad (14)$$

ناحیه‌های طیفی‌ای که در آنها بازتابندگی ثابت است سهمی در انتگرال ندارند؛ علاوه بر این نواحی طیفی $s \gg \omega$ و $s \ll \omega$ سهم عمده‌ای ندارند، زیرا تابع $\ln |(s + \omega)/(s - \omega)|$ در این نواحی کوچک است.

یادداشت ریاضی. برای به دست آوردن انتگرال کوشی (1°)، انتگرال $\int \alpha(s)(s - \omega)^{-1} ds$ را روی پربند شکل ۲ می‌گیریم. تابع $\alpha(s)$ در نیم صفحه بالایی تحلیلی است، در نتیجه مقدار این انتگرال صفر است. سهم قطعه (۴)، در صورتی صفر می‌شود که با $|s| \rightarrow \infty$ ، انتگرالده $\alpha(s)/s$ سریعتر از $|s|^{-1}$ به صفر بگراید. برای تابع پاسخ (۹) انتگرالده به صورت $|s|^{-3}$ به صفر می‌گراید؛ و برای رسانندگی $\sigma(s)$ ، انتگرالده به صورت $|s|^{-2}$ به صفر می‌گراید. سهم قطعه (۲) در انتگرال، در حد $|u| \rightarrow 0$ به قرار زیر است

$$\int_{(\gamma)} \frac{\alpha(s)}{s - \omega} ds \rightarrow \alpha(\omega) \int_{\pi}^{\circ} \frac{iue^{i\theta} d\theta}{ue^{i\theta}} = -\pi i \alpha(\omega)$$



شکل ۲. پربند برای مقدار اصلی انتگرال کوشی.

که در آن $s = \omega + u e^{i\theta}$. قطعه‌های (۱) و (۳) بنا به تعریف، بخش اصلی انتگرال بین $-\infty$ و ∞ را تشکیل می‌دهند. از آنجا که انتگرال روی (۴) + (۳) + (۲) + (۱) باید صفر شود، همانند رابطه (۱۰)، داریم

$$\int_{(1)} + \int_{(3)} \equiv P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha(s)}{s - \omega} ds = \pi i \alpha(\omega) \quad (15)$$

مثال: رسانندگی گاز الکترونی بدون برخورد. گازی از الکترونهاى آزاد را در حدی در نظر بگیرید، که فراوانی برخوردها به صفر بگراید. با استفاده از رابطه (۹) و اتحاد دیراک و با $f = 1/m$ ، تابع پاسخ برابر است با

$$\alpha(\omega) = -\frac{1}{m\omega} \lim_{\rho \rightarrow 0} \frac{1}{\omega + i\rho} = -\frac{1}{m\omega} \left[\frac{1}{\omega} - i\pi\delta(\omega) \right] \quad (16)$$

شان می‌دهیم که تابع دلتای معادله (۱۶) در رابطه کریمزیکرونیگ (۱۱الف) صدق می‌کند. از رابطه (۱۱الف) داریم

$$\alpha'(\omega) = \frac{2}{m} \int_0^{\infty} \frac{\delta(s)}{s^2 - \omega^2} ds = -\frac{1}{m\omega^2} \quad (17)$$

که با رابطه (۱۶) سازگار است.

رسانندگی الکتریکی $\sigma(\omega)$ را از تابع دی‌الکتریک زیر به دست می‌آوریم

$$\epsilon(\omega) - 1 = 4\pi P_{\omega}/E_{\omega} = -4\pi n e x_{\omega}/E_{\omega} = 4\pi n e^2 \alpha(\omega) \quad (18)$$

که در آن $\alpha(\omega) = x_{\omega}/(-e)E_{\omega}$ یا تساوی را به کار می‌بریم

$$\sigma(\omega) = (-i\omega/4\pi)[\epsilon(\omega) - 1] \quad (19)$$

زیرا معادله ماکسول را می‌توان به صورت $c \text{ curl } \mathbf{H} = -i\omega\epsilon(\omega)\mathbf{E}$ یا $c \text{ curl } \mathbf{H} = 4\pi\sigma(\omega)\mathbf{E} - i\omega\mathbf{E}$ نوشت. روابط (۱۶)، (۱۸)، و (۱۹) را ترکیب و رسانندگی گاز الکترونی بدون برخورد را پیدا می‌کنیم

$$\sigma'(\omega) + i\sigma''(\omega) = \frac{ne^2}{m} \left[\pi\delta(\omega) + \frac{i}{\omega} \right] \quad (20)$$

برای الکترونهاى بدون برخورد، بخش حقیقی رسانندگی در $\omega = 0$ دارای تابع دلتاست.

گذارهای بین نواری الکترونی

این امر که طیف‌نمایی اپتیکی به صورت ابزار تجربی مهمی برای تعیین ساختار نواری درآمد، شگفت‌انگیز بود. نخست به این دلیل که نوارهای جذب و بازتاب بلورها پهن‌اند و هنگامی که انرژی فوتون بیش از گاف نواری باشد، نوارهای جذب و بازتاب توابع بی‌شکلی از انرژی فونون‌اند. دلیل دوم آنکه جذب بین نواری مستقیم فونون $\hbar\omega$ در همه نقاطی از منطقه بریلوئن رخ می‌دهد، که برای آنها انرژی پایسته است.

$$\hbar\omega = \epsilon_c(\mathbf{k}) - \epsilon_v(\mathbf{k}) \quad (21)$$

که در آن c یک نوار خالی و v یک نوار پر است. جذب کل برای یک ω معلوم برابر است با انتگرالی روی تمامی گذارهای در منطقه که (۲۱) را برآورده می‌کند.

سه عامل زیر این طیفها را توجیه کردند:

- نوارهای پهن مانند یک خط طیفی که میرایی آن را بسیار پهن کرده باشد نیستند، بلکه این نوارها حامل اطلاعات زیادی‌اند که با مشتق‌گیری از بازتابندگی به دست می‌آیند (شکل ۳)؛ برای مثال، مشتق‌گیری نسبت به طول موج، میدان الکتریکی، دما، فشار، یا تنش تک‌محوری. طیف‌نمایی مشتقها، طیف‌نمایی مدولاسیونی نامیده می‌شود.
- رابطه (۲۱) ساختار طیفی در بلور را نفی نمی‌کند، زیرا گذارها در بسامدهایی انباشته می‌شوند که برای آنها نوارهای c و v موازی‌اند، یعنی در بسامدهایی که رابطه زیر برقرار باشد

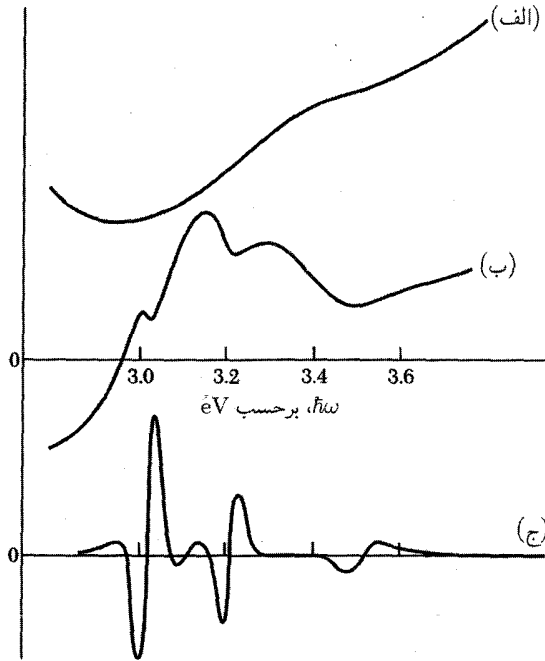
$$\nabla_{\mathbf{k}}[\epsilon_c(\mathbf{k}) - \epsilon_v(\mathbf{k})] = 0 \quad (22)$$

در این نقطه‌های بحرانی در فضای \mathbf{k} ، چگالی توأم حالت‌های $D_v(\epsilon_v)$ و $D_c(\epsilon_v + \hbar\omega)$ ، تکین است، با استدلالی همانند آنچه در فرمول (۳۷) فصل ۵ برای اثبات تکین بودن چگالی مدهای فونونی، $D(\omega)$ ، به ازای صفرهای $\nabla_{\mathbf{k}}\omega$ به کار بردیم.

- روش شبه‌پتانسیل برای محاسبه نوارهای انرژی در تعیین مکانها در منطقه بریلوئن برای نقطه‌های بحرانی‌ای که در طیفهای مدولاسیونی یافت می‌شوند، سودمند واقع می‌شود. اختلافهای انرژی نواره‌ها را می‌توان با دقتی مثل ۱eV محاسبه کرد. سپس می‌توان برای بهتر کردن محاسبات شبه‌پتانسیلی، نتایج تجربی را پس‌خورانید.

اکسیتونها

طیفهای بازتابش و جذب اغلب برای انرژیهای فوتونی‌ای که درست زیر گاف انرژی‌اند، یعنی در جایی که ممکن است انتظار داشته باشیم بلور شفاف باشد، ساختاری نشان می‌دهند. این ساختار به دلیل جذب فوتون همراه با خلق زوج الکترون-حفره مقید ایجاد می‌شود. درست همان گونه که یک الکترون به یک



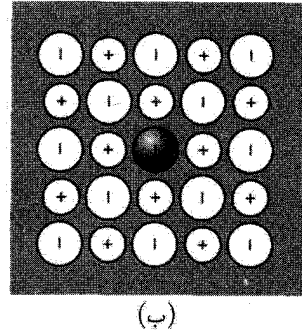
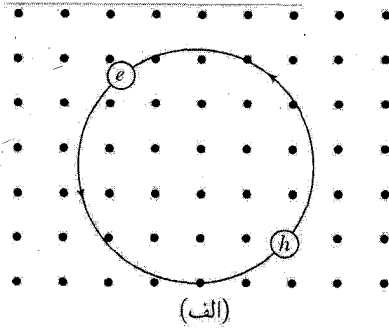
شکل ۳. مقایسه (الف) بازتابندگی، (ب) مشتق بازتابندگی نسبت به طول موج (مشتق اول) و (ج) الکترو بازتابندگی (مشتق سوم) برای ژرمانیم در ناحیه طیفی بین 3.0 eV تا 3.6 eV .

پروتون مقید می‌شود و اتم هیدروژن خنثی تشکیل می‌دهد، الکترون و حفره نیز می‌توانند توسط برهم‌کنش کولنی جاذب خود به یکدیگر مقید شوند.

زوج الکترون-حفره مقید اکسیژن نام دارد، شکل ۴. اکسیژن می‌تواند درون بلور حرکت کند و انرژی را منتقل سازد؛ ولی باری منتقل نمی‌کند، زیرا از نظر الکتریکی خنثی است. اکسیژن مشابه پوزیترونیم است که از یک الکترون و یک پوزیترون تشکیل می‌شود.

اکسیژن‌ها می‌توانند در هر بلور عایقی تشکیل شوند. اگر گاف نواری غیرمستقیم باشد، اکسیژن‌های نزدیک به گاف مستقیم ممکن است، نسبت به واپاشی به الکترون و حفره آزاد، ناپایدار باشند. همه اکسیژن‌ها نسبت به فرایند باز ترکیب نهایی که در آن الکترون به داخل حفره می‌افتد، ناپایدارند. اکسیژن‌ها ممکن است تجمع‌هایی نیز تشکیل دهند، نظیر بای اکسیژن که از تجمع دو اکسیژن حاصل می‌شود.

دیدیم که هرگاه فوتونی با انرژی ای بیش از گاف انرژی در بلور جذب شود، یک الکترون و حفره آزاد ایجاد می‌شود. آستانه این فرایند، در فرایند مستقیم، $\hbar\omega > E_g$ است. در فرایند غیرمستقیم با همیاری



شکل ۴. (الف) اکسیوتون یک زوج الکترون-حفره مقید است که معمولاً همراه یکدیگر آزادانه در بلور حرکت می‌کنند. اکسیوتون از بعضی لحاظ شبیه به اتم پوزیترونیم است، که از یک پوزیترون و یک الکترون تشکیل می‌شود. اکسیوتون نشان داده شده یک اکسیوتون مات-وانیه است: این اکسیوتون به‌طور ضعیف مقید است و فاصله متوسط الکترون-حفره در آن در مقایسه با ثابت شبکه بزرگ است. (ب) یک اکسیوتون قویاً مقید یا اکسیوتون فرنکل که روی یک اتم در بلور هالید قلیایی جایگزیده است. اکسیوتون فرنکل ایده‌آل مانند موج در سرتاسر بلور حرکت می‌کند، ولی الکترون همواره نزدیک به حفره باقی ماند.

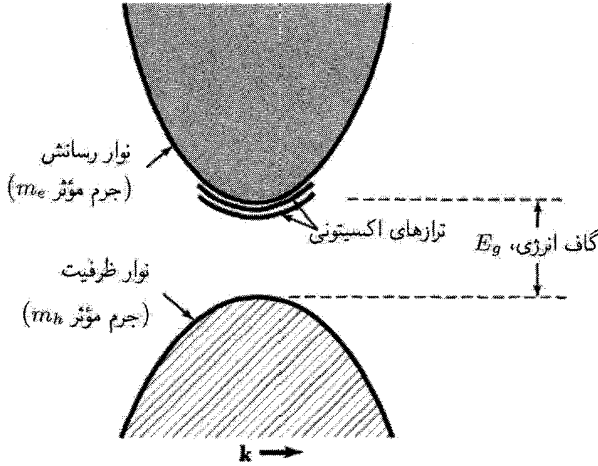
جدول ۱. انرژی بستگی اکسیوتونها، برحسب meV

۴۴۰	RbCl	۵۶	BaO	۱۴٫۷	Si
(۱۰۰۰)	LiF	۴٫۰	InP	۴٫۱۵	Ge
۲۰	AgBr	(۰٫۴)	InSb	۴٫۲	GaAs
۳۰	AgCl	۴۸۰	KI	۳٫۵	GaP
۱۱	TlCl	۴۰۰	KCl	۲٫۹	CdS
۶	TlBr	۴۰۰	KBr	۱٫۵	CdSe

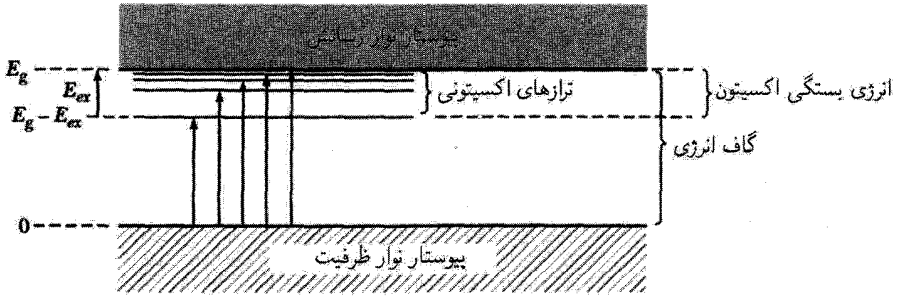
فونون در فصل ۸، آستانه به اندازه انرژی فونون $\hbar\Omega$ پایینتر است. ولی در تشکیل اکسیوتونها، انرژی از این آستانه‌ها به اندازه انرژی بستگی اکسیوتون پایین می‌آید. این انرژی همان گونه که در جدول ۱ نشان داده شده است ممکن است در گستره ۱ meV تا ۱ eV باشد.

اکسیوتونها می‌توانند با جذب فوتون در هر نقطه بحرانی (۲۲) تشکیل شوند، زیرا اگر $\nabla_{\mathbf{k}}\epsilon_v = \nabla_{\mathbf{k}}\epsilon_c$ ، سرعت‌های گروه الکترون و حفره برابر خواهند بود و این ذره‌ها می‌توانند با جاذبه کولنی خود به یکدیگر مقید شوند. گذارهایی که به تشکیل اکسیوتونها در زیرگاف انرژی منجر می‌شوند در شکل‌های ۵ و ۶ نشان داده شده‌اند.

انرژی بستگی اکسیوتون را به سه روش می‌توان اندازه گرفت.

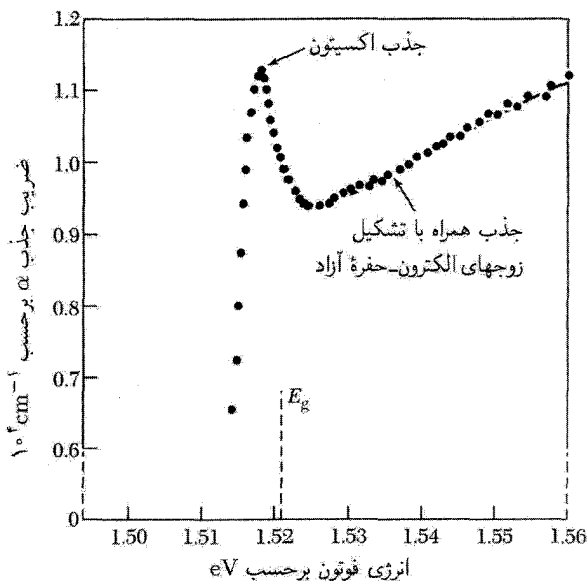


شکل ۵. ترازهای اکسیوتونی نسبت به لبه نوار رسانش، برای یک ساختار نواری ساده که در آن لبه‌های نواری ظرفیت و رسانش هر دو در $k = 0$ قرار دارند. اکسیوتون می‌تواند دارای انرژی جنبشی انتقالی باشد. اکسیوتونها، نسبت به بازترکیب تابشی، که در آن الکترون به درون حفره در نوار ظرفیت می‌افتد و فوتون یا فونونهایی گسیل می‌شوند، ناپایدارند.



شکل ۶. ترازهای انرژی اکسیوتونی که در فرایند مستقیم تولید می‌شوند. بیکانه‌گذارهای اپتیکی از بالای نوار ظرفیت را نشان می‌دهند؛ طولترین بیکان مربوط به گاف انرژی است. انرژی بستگی اکسیوتون نسبت به انرژی یک الکترون و حفره آزاد برابر است با E_{ex} . خط جذب مربوط به پایینترین بسامد در بلور در صفر مطلق با E_{ex} برابر نیست، بلکه برابر است با $E_g - E_{ex}$.

- در گذارهای اپتیکی از نوار ظرفیت، با توجه به اختلاف بین انرژی لازم برای تولید اکسیوتون و انرژی لازم برای تولید الکترون و حفره آزاد (شکل ۷).
- در نورتابی ناشی از بازترکیب، با مقایسه انرژی خط بازترکیب الکترون-حفره آزاد با انرژی خط بازترکیب اکسیوتون.



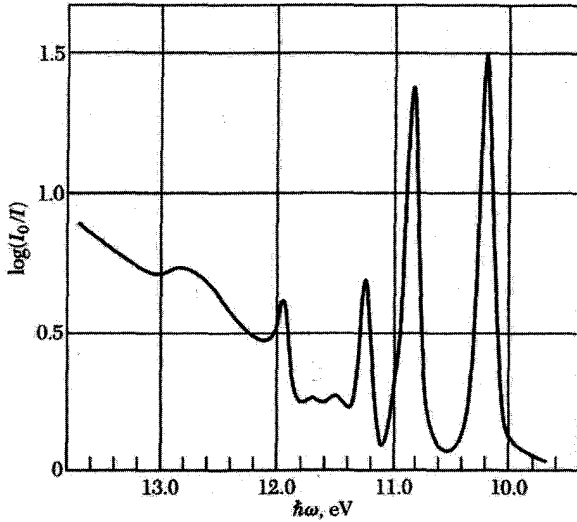
شکل ۷. اثر یک تراز اکسیتونی روی جذب اپتیکی نیمرسانا برای فوتونهایی با انرژی نزدیک به گاف نواری E_g در آرسنید گالیم در ۲۱ K. مقیاس عمودی، ضریب جذب شدت α در رابطه $I(x) = I_0 \exp(-\alpha x)$ است. گاف انرژی و انرژی بستگی اکسیتون از شکل منحنی جذب استنتاج شده‌اند: گاف E_g برابر با ۱۵۲۱ eV و انرژی بستگی اکسیتون برابر با ۰۰۳۴ eV است.

• از طریق فوتو-یونش اکسیتونها، برای تشکیل حاملهای آزاد. این آزمایش به غلظت بالایی از اکسیتونها نیاز دارد.

اکسیتونها را در دو تقریب حدی گوناگون مورد بحث قرار می‌دهیم، یکی تقریب فرنکل که در آن اکسیتون کوچک و قویاً مقید است، و دیگری تقریب مات و وانیه که در آن اکسیتون به طور ضعیف مقید است و فاصله الکترون-حفره در مقایسه با ثابت شبکه بزرگ است. موارد بینابینی نیز مشاهده شده است.

اکسیتونهای فرنکل

در اکسیتون قویاً مقید (شکل ۴ ب)، برانگیختگی روی یک تک‌اتم یا نزدیک به آن جایگزیده است: حفره معمولاً روی همان اتمی است که الکترون قرار دارد، ولی زوج الکترون-حفره می‌تواند در هر جای بلور باشد. اکسیتون فرنکل در اصل یک حالت برانگیخته تک‌اتم است، ولی این برانگیختگی می‌تواند در اثر جفت‌شدگی بین همسایه‌ها از یک اتم به اتم دیگر جهش کند. موج برانگیختگی در بلور حرکت می‌کند، همان‌گونه که اسپین وارون‌شده مگنون در بلور حرکت می‌کند.



شکل ۸. طیف جذب کریبتون جامد در ۲۰K.

گازهای بی‌اثر بلورین دارای اکسیوتونهایی‌اند که در حالت پایه خود تا حدودی با مدل فرنکل مطابقت دارند. پایینترین گذار اتمی قوی در اتم کریبتون در ۹۹۹eV است. گذار متناظر در بلور به این مقدار نزدیک و برابر ۱۰۱۷eV است (شکل ۸). گاف انرژی در این بلور برابر است با ۱۱۷eV، در نتیجه انرژی حالت پایه اکسیوتون نسبت به انرژی یک الکترون و حفره آزاد که جدا از هم و در بلور ساکن باشند برابر است با $۱۱۷ - ۱۰۱۷ = ۱۵eV$.

حالت‌های انتقالی اکسیوتونهای فرنکل همانند همه برانگیختگیهای دیگر در یک ساختار دوره‌ای، به شکل امواج انتشاری‌اند. بلوری را در نظر بگیرید که دارای N اتم روی یک خط یا حلقه است. اگر u_j حالت پایه اتم j باشد، و از برهم‌کنش بین آنها صرف‌نظر کنیم، حالت پایه بلور عبارت است از

$$\psi_g = u_1 u_2 \cdots u_N \quad (23)$$

اگر تک‌اتم j در حالت برانگیخته v_j باشد، دستگاه با رابطه زیر توصیف می‌شود

$$\varphi_j = u_1 u_2 \cdots u_j - v_j u_{j+1} u_N \quad (24)$$

انرژی این تابع تابع φ_l مربوط به برانگیختگی هر اتم دیگری مانند l ، برابر است. ولی تابعهای φ که یک تک‌اتم برانگیخته معین و $1 - N$ اتم در حالت پایه را توصیف می‌کنند، حالت‌های کوانتومی مانای مسئله نیستند. اگر بین اتم برانگیخته و اتم نابرانگیخته مجاور آن برهم‌کنشی موجود باشد، انرژی برانگیختگی

از یک اتم به اتم دیگر منتقل می‌شود. ویژه‌حالتها به گونه‌ای که اکنون نشان خواهیم داد، شکل موج‌گونه خواهند داشت.

وقتی هامیلتونی دستگاه بر تابع φ_j که در آن اتم j ام برانگیخته است، عمل کند، داریم

$$\mathcal{H}\varphi_j = \epsilon\varphi_j + T(\varphi_{j-1} + \varphi_{j+1}) \quad (25)$$

که در آن ϵ انرژی برانگیختگی اتم آزاد است؛ برهم‌کنش T آهنگ انتقال برانگیختگی از j به همسایه‌های اولش، $j-1$ و $j+1$ ، را اندازه می‌گیرد. پاسخهای (۲۵) امواجی به شکل بلوخ‌اند:

$$\psi_k = \sum_j \exp(ijk a)\varphi_j \quad (26)$$

برای اثبات، \mathcal{H} را روی ψ_k اعمال می‌کنیم. با استفاده از رابطه (۲۵) داریم

$$\mathcal{H}\psi_k = \sum_j e^{ijk a} \mathcal{H}\varphi_j = \sum_j e^{ijk a} [\epsilon\varphi_j + T(\varphi_{j-1} + \varphi_{j+1})] \quad (27)$$

با مرتب کردن طرف راست رابطه فوق داریم

$$\mathcal{H}\psi_k = \sum_j e^{ijk a} [\epsilon + T(e^{ika} + e^{-ika})]\varphi_j = (\epsilon + 2T \cos ka)\psi_k \quad (28)$$

در نتیجه ویژه‌مقدارهای انرژی مسئله به گونه‌ی شکل ۹ عبارت‌اند از

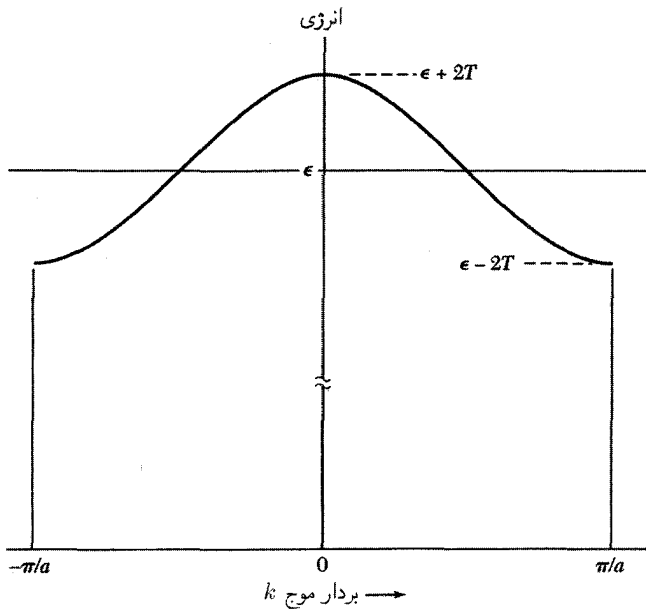
$$E_k = \epsilon + 2T \cos ka \quad (29)$$

با به کار بستن شرایط مرزی دوره‌ای، مقدارهای مجاز بردار موج k تعیین می‌شوند

$$k = 2\pi s/Na; \quad s = -\frac{1}{4}N, -\frac{1}{4}N + 1, \dots, \frac{1}{4}N - 1 \quad (30)$$

هالیدهای قلیایی. در بلورهای هالید قلیایی، اکسیتونهای با کمترین انرژی به گونه‌ای که در شکل ۴ (ب) آمده است، روی یونهای هالوژن منفی جایگزیده می‌شوند. ترازهای برانگیختگی الکترونی برای یونهای منفی پایتتر است تا برای یونهای مثبت. بلورهای هالید قلیایی خالص در ناحیه مرئی طیف شفاف‌اند، این نکته بدان معناست که انرژیهای اکسیتونی در ناحیه مرئی نیستند. ولی این بلورها در ناحیه فرابنفش خلا ساختار جذب اکسیتونی قابل ملاحظه‌ای از خود نشان می‌دهند.

یک ساختار دوتایی در برمید سدیم به طور ویژه پدیدار می‌شود، ساختاری مشابه ساختار پایتتر حالت برانگیخته اتم کریپتون که با یون Br^- در ترکیب NaBr از نظر پیکربندی الکترونی یکسان است. شکافتگی به دلیل برهم‌کنش اسپین-مدار است. این اکسیتونها، اکسیتونهای فرنکل‌اند.



شکل ۹. انرژی برحسب بردار موج برای اکسیتون فرنکل، که با برهم‌کنش انتقال بین همسایه‌های اول، T ، مثبت محاسبه شده است.

بلورهای مولکولی. در بلورهای مولکولی، بستگی کووالانسی درون مولکول در مقایسه با بستگی وان‌دروالس بین مولکولها قوی است، در نتیجه اکسیتونها، اکسیتونهای فرنکل‌اند. خطوط برانگیختگی الکترونی یک مولکول مجزا، در جامد بلوری، اغلب با تغییر کوچکی در بسامد، به صورت یک اکسیتون ظاهر می‌شوند. این خطوط در جامد، در دماهای پایین کاملاً تیزند، هر چند ممکن است به دلیل شکافتگی داویدف، که در مسئله ۷ مورد بررسی قرار می‌گیرد، در خطوط جامد، در مقایسه با خطوط مولکول، ساختار بیشتری وجود داشته باشد.

اکسیتونهای به طور ضعیف مقید (مات-وانیه)

الکترونی در نوار رسانش و حفره‌ای در نوار ظرفیت در نظر بگیرید. این الکترون و حفره یکدیگر را با پتانسیل کولنی زیر جذب می‌کنند

$$(CGS) \quad U(r) = -e^2/er \quad (31)$$

که در آن r فاصله بین ذرات و ϵ ثابت دی‌الکتریک مناسب است. (اگر بسامد حرکت اکسیتون از بسامد فونونهای اپتیکی بیشتر باشد، سهم قطبیدگی شبکه را در ثابت دی‌الکتریک نباید به حساب آورد.) برای دستگاه اکسیطونی حالت‌های مقیدی وجود خواهد داشت که انرژیهای کل شان از انرژی ته‌نوار رسانش پایتتر باشد.

اگر سطوح انرژی برای الکترون و حفره کروی و ناواکن باشند، این مسئله همان مسئله اتم هیدروژن است. ترازهای انرژی نسبت به بالای نوار ظرفیت با معادله اصلاح شده ریدبرگ داده می‌شوند

$$E_n = E_g - \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2 n^2} \quad (32)$$

در اینجا n عدد کوانتومی اصلی و μ جرم کاهشده است:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \quad (33)$$

که از جرمهای مؤثر الکترون و حفره، m_e و m_h ، تشکیل شده است.

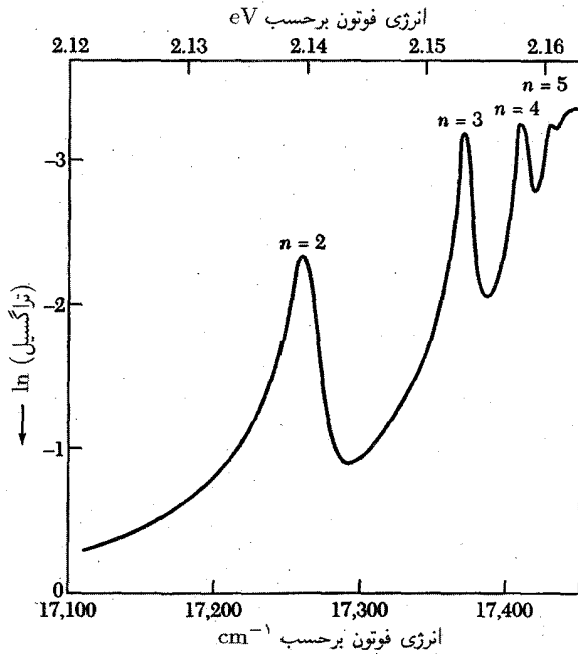
انرژی حالت پایه اکسیتون با نشاندن $n = 1$ در رابطه (۳۲) به دست می‌آید، که انرژی یونش اکسیتون است. بررسیهای خطوط جذب اپتیکی در اکسید مس، Cu_2O ، در دماهای پایین، نتایجی برای فاصله بین ترازهای اکسیتون به دست می‌دهد که به استثنای گذارهای به حالت $n = 1$ ، با معادله ریدبرگ (۳۲) به خوبی سازگار است. برازش تجربی خطوط شکل ۱۰ با رابطه $v(\text{cm}^{-1}) = 17508 - (800/n^2)$ حاصل می‌شود. با در نظر گرفتن $\epsilon = 10$ و با استفاده از ضریب $1/n^2$ داریم $\mu \simeq 0.7m$. جمله ثابت $E_g = 2.17\text{eV}$ متناظر است با گاف انرژی 17508cm^{-1} .

چگالش اکسیتونی به صورت قطره‌های الکترون-حفره (EHD) ۱

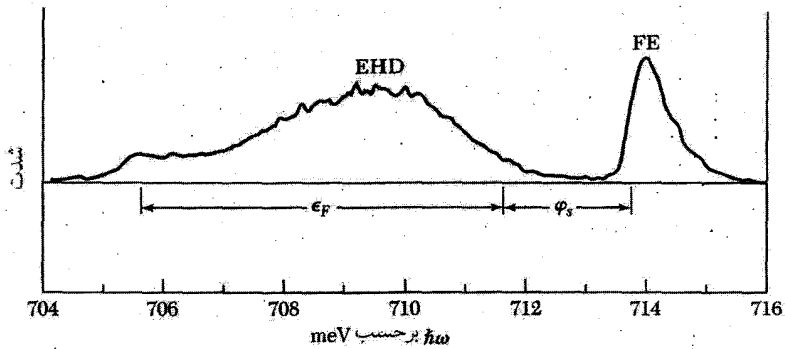
هنگامی که به Ge و Si در دمای پایین نور تابانده شود، یک فاز چگالیده پلاسما الکترون-حفره به وجود می‌آید. به هنگام تشکیل قطره الکترون-حفره (EHD) در Ge این سلسله رویدادها در ادامه رخ می‌دهد: با جذب یک فوتون با انرژی $\hbar\omega > E_g$ یک الکترون آزاد و یک حفره آزاد با بازدهی زیاد تولید می‌شود. این دو به سرعت، شاید در ۱ ns، ترکیب می‌شوند و یک اکسیتون تشکیل می‌دهند. اکسیتون ممکن است با نابودی زوج e-h با طول عمر $8\mu\text{s}$ واپاشیده شود.

اگر غلظت اکسیتونها به اندازه کافی بالا باشد—بالاتر از 10^{13}cm^{-3} در ۲ K—اغلب اکسیتونها به صورت یک قطره چگالیده می‌شوند. طول عمر قطره $40\mu\text{s}$ است، ولی در Ge کرنش یافته ممکن است به $600\mu\text{s}$ برسد. اکسیتونها درون قطره به یک گاز فرمی واکن از الکترونها و حفرهها، با ویژگیهای فلزی تجزیه می‌شوند: این حالت را ل. و. کلدیش^۲ پیش‌بینی کرد.

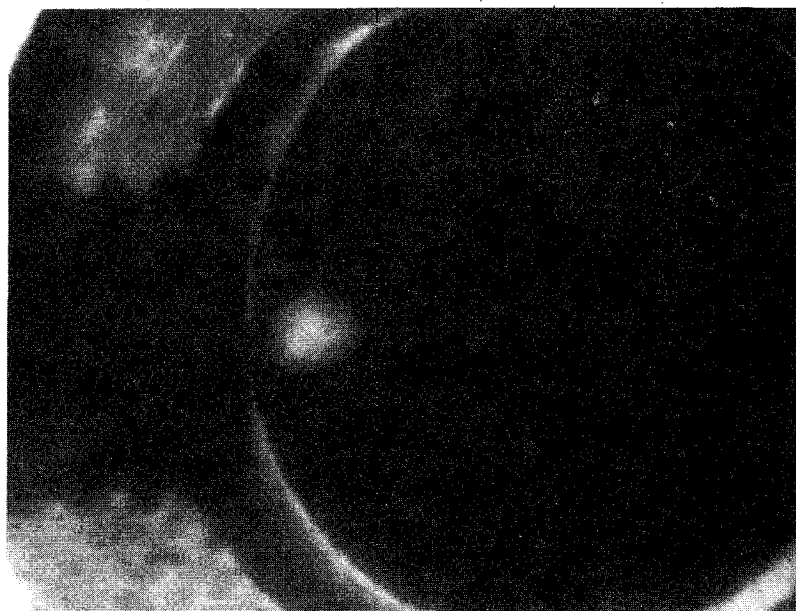
شکل ۱۱ تابش بازترکیب حاصل از اکسیتونهای آزاد (714meV) و حاصل از فاز EHD (709meV) در Ge را نشان می‌دهد. پهنای خط 709meV با توزیع انرژی جنبشی الکترونها و حفرهها در گاز فرمی با غلظت $2 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$ سازگار است. شکل ۱۲ عکسی از یک EHD بزرگ است.



شکل ۱۰. لگاریتم تراکسیل اپتیکی برحسب انرژی فوتون در اکسید مس در ۷۷ K، که رشته‌ای از خطوط اکسیونی را نشان می‌دهد. توجه کنید که لگاریتم روی محور قائم به سمت بالا کاهش می‌یابد، بنابراین هر قله متناظر با یک جذب است. گاف نواری E_g برابر است با ۲.۱۶ eV.



شکل ۱۱. تابش بازترکیب الکترونیهای آزاد با حفره‌ها و تابش حاصل از قطره‌های الکترون-حفره در Ge در ۴K در ۳۰۰. انرژی فرمی در قطره ϵ_F و انرژی چسبندگی قطره نسبت به یک اکسیون آزاد ϕ_s است.

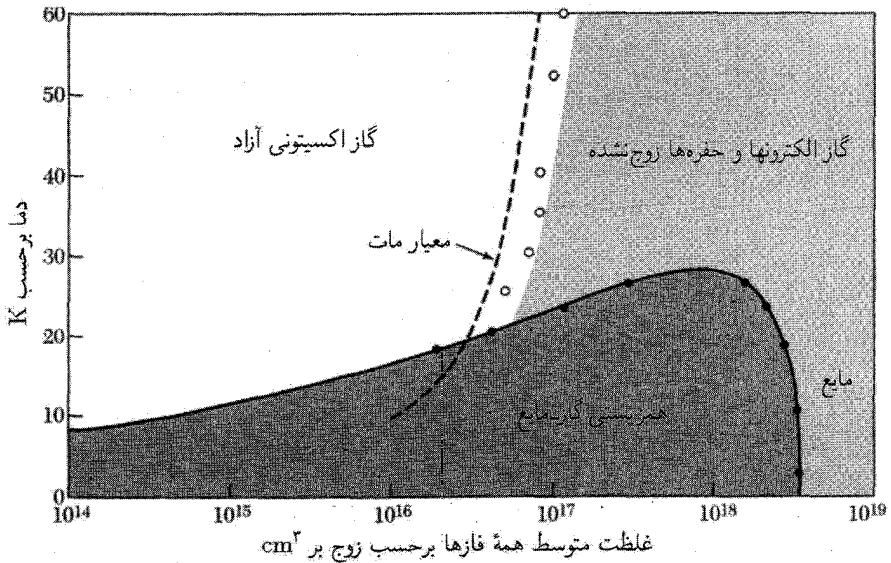


شکل ۱۲. عکس یک قطره الکترون-حفره در قرصی ۴ میلیمتری از ژرمانیم خالص. قطره لکه پرننگ مجاور پیچ دستگاه است که در طرف چپ قرص واقع است. تصویر قطره در این عکس با کانونی کردن نور حاصل از بازترکیب الکترون-حفره در سطح فیلم حساس به نور فرورسوخ به دست آمده است.

جدول ۲. پارامترهای مایع الکترون-حفره

بلور (تنش نیافته)	انرژی بستگی نسبت به اکسیتون آزاد، برحسب meV	غلظت n یا p ، برحسب cm^{-3}	دمای بحرانی برحسب K
Ge	۱٫۸	$۲٫۵۷ \times ۱۰^{۱۷}$	۶٫۷
Si	۹٫۳	$۳٫۵ \times ۱۰^{۱۸}$	۲۳
GaP	۱۷٫۵	$۸٫۶ \times ۱۰^{۱۸}$	۴۵
$^{3}\text{C-SiC}$	۱۷	۱۰×۱۰^{۱۸}	۴۱

نمودار فاز اکسیتونی سیلیسیم در صفحه دم-غلظت در شکل ۱۳ رسم شده است. گاز اکسیتونی در فشارهای کم عایق است. در فشارهای زیاد (در طرف راست نمودار) گاز اکسیتونی متلاشی می شود و پلاسمای رسانایی از الکترونها و حفره های زوج نشده ایجاد می شود. گذار از اکسیتونها به پلازما نمونه ای از گذار مات، در فصل ۱۴، است. داده های فراتر در جدول ۲ داده شده اند.



شکل ۱۳. نمودار فاز الکترونها و حفره‌های فوتو برانگیخته، در سیلیسیم تنش نیافته. نمودار، برای مثال، نشان می‌دهد که در غلظت متوسطی نزدیک به 10^{17} cm^{-3} در 15 K ، یک گاز اکسیتونی آزاد با غلظت گاز اشباع شده 10^{16} cm^{-3} در همزیستی با یک حجم (متغیر) از ریزقطره‌های مایع هر یک با چگالی $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ قرار دارد. دمای بحرانی مایع حدود 23 K است. مقادیر تجربی و نظری برای گذار فلز-عایق برای اکسیتونها نیز نشان داده شده است.

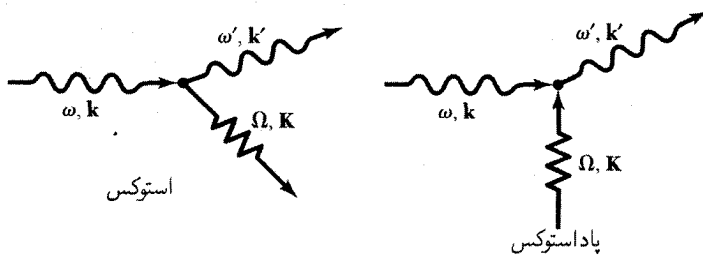
اثر رامان در بلورها

پراکندگی رامان متضمن دو فوتون —یکی ورودی و دیگری خروجی— است و یک مرحله پیچیده‌تر از فرایندهای یک فوتونی است که پیش از این در این فصل بررسی شد. در اثر رامان یک فوتون، با آفرینش یا نابودی یک فوتون یا مگنون، توسط بلور به‌گونه ناکشسان پراکنده می‌شود (شکل ۱۴). این فرایند همانند پراکندگی ناکشسان پرتوهای x ، و شبیه به پراکندگی ناکشسان نوترونها توسط بلور است. قاعده‌های گزینش برای اثر مرتبه اول رامان عبارت‌اند از

$$\omega = \omega' \pm \Omega; \quad k = k' \pm K \quad (34)$$

که در آن ω و k به فوتون فرودی، ω' و k' به فوتون پراکنده شده، و Ω و K به فوتون آفریده یا نابود شده در رویداد پراکندگی مربوط می‌شوند. در اثر مرتبه دوم رامان، دو فوتون در پراکندگی ناکشسان فوتون شرکت دارند.

اثر رامان به دلیل وابستگی قطبش‌پذیری الکترونی به کرنش میسر می‌شود. برای نشان دادن این



شکل ۱۴. پراکندگی رامان یک فوتون همراه با گسیل یا جذب یک فوتون. فرایندهای مشابهی با مگنونها (امواج اسپینی) روی می‌دهند.

موضوع، فرض می‌کنیم که قطبش‌پذیری α وابسته به یک مد فوتونی را بتوان به صورت یک رشته توانی بر حسب دامنه u نوشت

$$\alpha = \alpha_0 + \alpha_1 u + \alpha_2 u^2 + \dots \quad (35)$$

اگر $u(t) = u_0 \cos \Omega t$ و میدان الکتریکی فرودی $E(t) = E_0 \cos \omega t$ باشد، گشتاور دوقطبی الکتریکی القاشده دارای یک مؤلفه به قرار زیر خواهد بود

$$\alpha_1 E_0 u_0 \cos \omega t \cos \Omega t = \frac{1}{2} \alpha_1 E_0 u_0 [\cos(\omega + \Omega)t + \cos(\omega - \Omega)t] \quad (36)$$

بنابراین فوتونهایی با بسامدهای $\omega + \Omega$ و $\omega - \Omega$ می‌توانند همراه با جذب یا گسیل فوتونی به بسامد Ω ، گسیل شوند.

فوتون با بسامد $\omega - \Omega$ خط استوکس و فوتون با بسامد $\omega + \Omega$ خط پادااستوکس نام دارند. شدت خط استوکس متضمن عنصر ماتریسی مربوط به ایجاد فوتون است، که همان عنصر ماتریسی نوسانگر هماهنگ، همانند پیوست ج، است.

$$I(\omega - \Omega) \propto |\langle n_{\mathbf{K}} + 1 | u | n_{\mathbf{K}} \rangle|^2 \propto n_{\mathbf{K}} + 1 \quad (37)$$

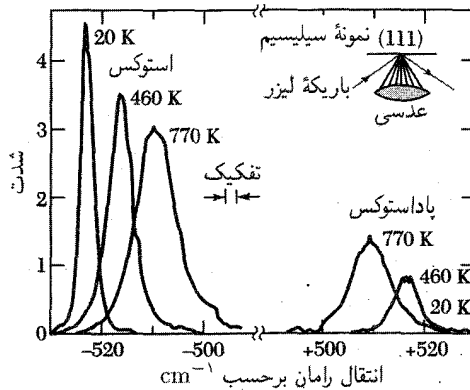
که در آن $n_{\mathbf{K}}$ فراوانی آغازی مد فوتونی \mathbf{K} است.

خط پادااستوکس متضمن نابودی فوتون است، و برای آن شدت فوتونها با

$$I(\omega + \Omega) \propto |\langle n_{\mathbf{K}} - 1 | u | n_{\mathbf{K}} \rangle|^2 \propto n_{\mathbf{K}} \quad (38)$$

متناسب است.

اگر فراوانی فوتونها در آغاز، در دمای T در تعادل گرمایی باشد، نسبت شدت دو خط برابر است با



شکل ۱۵. طیفهای مرتبه اول رامان مربوط به مد اپتیکی $\approx 0^\circ K$ در بلور سیلیسیم که در سه دما مشاهده شده‌اند. طول موج فوتون فرودی 5145\AA است. بسامد فوتون اپتیکی برابر با انتقال بسامد است. این بسامد وابستگی ضعیفی به دما دارد.

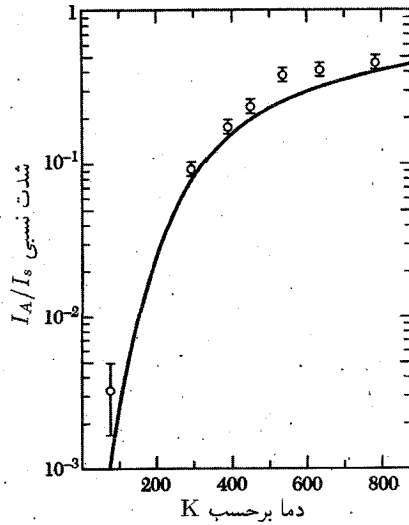
$$\frac{I(\omega + \Omega)}{I(\omega - \Omega)} = \frac{\langle n_K \rangle}{\langle n_K \rangle + 1} = \exp(-\hbar\Omega/k_B T) \quad (39)$$

$\langle n_K \rangle$ با تابع توزیع پلانک $1/[\exp(\hbar\Omega/k_B T) - 1]$ داده می‌شود. می‌بینیم که با $T \rightarrow 0$ شدت نسبی خطوط پاداستوکس صفر می‌شود، زیرا در این دما هیچ فوتون گرمایی موجود نیست تا نابود شود. مشاهدات مربوط به فوتون اپتیکی $K = 0$ در سیلیسیم در شکلهای ۱۵ و ۱۶ نشان داده شده‌اند. سیلیسیم در یاخته بسیط دو اتم یکسان دارد، و در غیاب تغییر شکل حاصل از فوتونها هیچ گشتاور دوقطبی الکتریکی‌ای به یاخته بسیط وابسته نیست. ولی در سیلیسیم $\alpha\text{-Si}$ در $K = 0$ صفر نمی‌شود، در نتیجه این مد را می‌توان با پراکندگی مرتبه اول رامان نور مشاهده کرد.

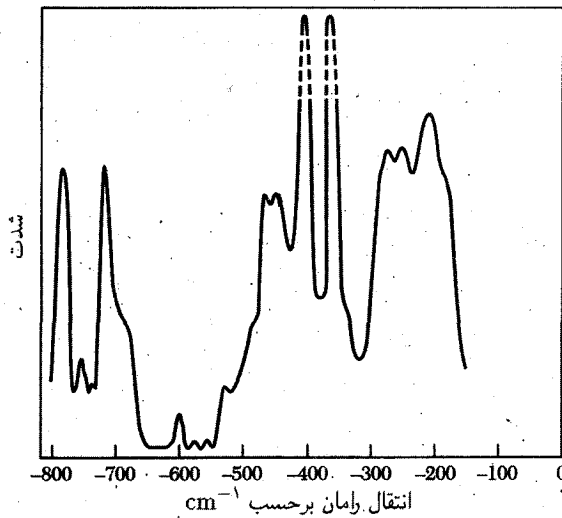
اثر مرتبه دوم رامان از جمله $\alpha\text{-Si}^2$ در قطبش پذیری ناشی می‌شود. در این مرتبه، پراکندگی ناکشسان نور با آفرینش یا جذب دو فوتون، یا جذب یکی و آفرینش دیگری همراه است. این فوتونها می‌توانند دارای بسامدهای مختلف باشند. اگر یاخته بسیط دارای چند اتم باشد، توزیع شدت در طیف فوتونهای پراکنده شده می‌تواند به دلیل تعداد مدهای فوتون اپتیکی متناظر، کاملاً پیچیده باشد. طیفهای مرتبه دوم رامان در بلورهای زیادی مشاهده و تحلیل شده‌اند. اندازه‌گیریهایی مربوط به فسفید گالیم (GaP) در شکل ۱۷ نشان داده شده‌اند.

طیف‌نمایی الکترونی به کمک پرتوهای x

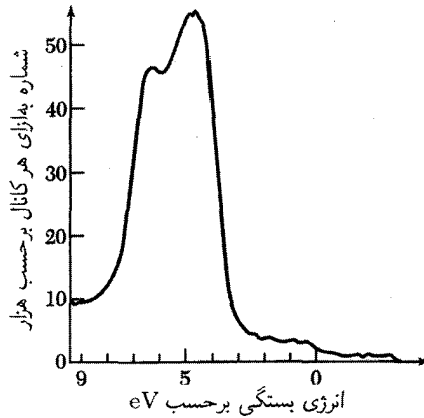
مرحله بعد پیچیدگی در فرایندهای اپتیکی، مانند شکل ۱، متضمن ورود یک فوتون به جامد و خروج یک الکترون از آن است. دو روش مهم عبارت‌اند از فوتوگسیل پرتو x از جامدها (XPS)^۱، و فوتوگسیل



شکل ۱۶. نسبت شدتهای خطوط پاداستوکس به استوکس به صورت تابعی از دما، برای مشاهدات شکل ۱۵ در مورد مد اپتیکی سیلیسیم. وابستگی دمایی مشاهده شده با پیش بینی معادله (۳۹) به خوبی سازگار است: منحنی پر تابع $\exp(-\hbar\Omega/k_B T)$ است.



شکل ۱۷. طیف رامان GaP در ۲۰ K. دو قله بلندتر خطوط مرتبه اول رامان وابسته به برانگیختگی یک فونون LO در 404 cm^{-1} و یک فونون TO در 366 cm^{-1} هستند. قله های دیگر جملگی متضمن دو فونون اند.



شکل ۱۸. گسیل الکترون نوار ظرفیت از نقره.

فرابنفش (UPS)^۱. در فیزیک حالت جامد از این روشها در بررسیهای ساختار نواری و فیزیک سطح، شامل کاتالیز کردن و جذب سطحی استفاده می‌شود.

طیفهای XPS و UPS را می‌توان مستقیماً با چگالیهای حالتی نوار ظرفیت $D(\epsilon)$ مقایسه کرد. فوتونهای بسیار تکفام شده پرتو x یا فرابنفش را به نمونه می‌تابانند. فوتون جذب شده و یک فوتوالکترون گسیل می‌شود که انرژی جنبشی آن با انرژی فوتون فرودی منهای انرژی بستگی الکترون در جامد برابر است. الکترونها از لایه نازکی نزدیک به سطح، نوعاً با عمقی برابر 5 \AA ، می‌آیند. تفکیک بهترین دستگاههای طیف‌سنج XPS کمتر از 10 meV است، که بررسیهای دقیق ساختار نواری را میسر می‌سازد.

ساختار نوار ظرفیت نقره در شکل ۱۸ نشان داده شده است. صفر انرژی در تراز فرمی قرار دارد. الکترونهای واقع در اولین 3 eV زیر تراز فرمی، از نوار رسانش 5 s می‌آیند. قله قوی دارای ساختار زیر 3 eV ، از الکترونهای ظرفیتی $4d$ ناشی می‌شود.

برانگیختگیهایی نیز از ترازهای ژرفتر مشاهده شده‌اند که اغلب با برانگیزش پلاسmonها همراهاند. برای مثال، الکترون $2p$ در سیلیسیم با انرژی بستگی نزدیک به 99.2 eV عیناً در 117 eV با برانگیزش یک پلاسmon و در 134.7 eV با برانگیزش دو پلاسmon دیده می‌شود. انرژی پلاسmon 18 eV است.

اتلاف انرژی ذرات سریع در جامدها

تا اینجا برای بررسی ساختار الکترونی جامدها از فوتونها استفاده کرده‌ایم. از باریکه‌های الکترونی نیز می‌توانیم به همین منظور استفاده کنیم. این نتایج نیز، این بار از طریق بخش موهومی $1/\epsilon(\omega)$ ، متضمن ثابت

دی‌الکتریک‌اند. در اتلاف انرژی موج الکترومغناطیسی در جامد، تابع دی‌الکتریک به صورت $\text{Im}\{\epsilon(\omega)\}$ وارد می‌شود، ولی در اتلاف انرژی ذره باردار که به داخل جامد نفوذ می‌کند، تابع دی‌الکتریک به صورت $-\text{Im}\{1/\epsilon(\omega)\}$ وارد می‌شود.

به این اختلاف توجه کنید. با استفاده از نظریه الکترومغناطیسی نتیجه عمومی برای چگالی اتلاف توان، به ازای واحد حجم، در اثر اتلافهای دی‌الکتریک برابر است با

$$\mathcal{P} = \frac{1}{4\pi} \mathbf{E} \cdot (\partial \mathbf{D} / \partial t) \quad (40)$$

برای موج الکترومغناطیسی عرضی $Ee^{-i\omega t}$ در بلور داریم $dD/dt = -i\omega \epsilon(\omega) Ee^{-i\omega t}$ در نتیجه میانگین زمانی توان برابر است با

$$\begin{aligned} \mathcal{P} &= \frac{1}{4\pi} \langle \text{Re}\{Ee^{-i\omega t}\} \text{Re}\{-i\omega \epsilon(\omega) Ee^{-i\omega t}\} \rangle \\ &= \frac{1}{4\pi} \omega E^2 \langle (\epsilon'' \cos \omega t - \epsilon' \sin \omega t) \cos \omega t \rangle = \frac{1}{8\pi} \omega \epsilon''(\omega) E^2 \end{aligned} \quad (41)$$

که با $\epsilon''(\omega)$ متناسب است. مؤلفه مماسی E در مرز جامد پیوسته است. اگر ذره‌ای با بار e و سرعت v به بلور وارد شود، از کتابهای استاندارد برای جابه‌جایی دی‌الکتریک داریم

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = -\text{grad} \frac{e}{|\mathbf{r} - \mathbf{vt}|} \quad (42)$$

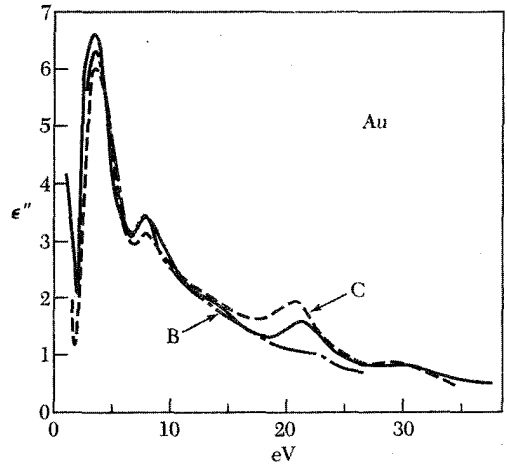
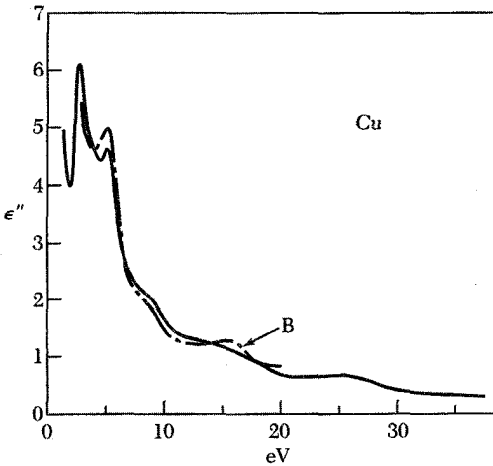
زیرا با استفاده از معادله پواسون، این \mathbf{D} است که به بار آزاد مربوط می‌شود نه \mathbf{E} . در محیط همسانگرد، مؤلفه فوریه $E(\omega, \mathbf{k})$ توسط $E(\omega, \mathbf{k}) = D(\omega, \mathbf{k})/\epsilon(\omega, \mathbf{k})$ به مؤلفه فوریه $D(\mathbf{r}, t)$ ، یعنی $D(\omega, \mathbf{k})$ ، مربوط می‌شود.

میانگین زمانی اتلاف توان وابسته به این مؤلفه فوریه برابر است با

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\omega, \mathbf{k}) &= \frac{1}{4\pi} \langle \text{Re}\{\epsilon^{-1}(\omega, \mathbf{k}) D(\omega, \mathbf{k}) e^{-i\omega t}\} \text{Re}\{-i\omega D(\omega, \mathbf{k}) e^{-i\omega t}\} \rangle \\ &= \frac{1}{4\pi} \omega D^2(\omega, \mathbf{k}) \left\langle \left[\left(\frac{1}{\epsilon}\right)' \cos \omega t + \left(\frac{1}{\epsilon}\right)'' \sin \omega t \right] [-\sin \omega t] \right\rangle \end{aligned}$$

که از آنجا داریم

$$\mathcal{P}(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{1}{8\pi} \omega \left(\frac{1}{\epsilon}\right)'' D^2(\omega, \mathbf{k}) = \frac{1}{8\pi} \omega \frac{\epsilon''(\omega, \mathbf{k})}{|\epsilon|^2} D^2(\omega, \mathbf{k}) \quad (43)$$



شکل ۱۹. $\epsilon''(\omega)$ برای Cu و Au. خطوط پر حاصل اندازه‌گیریهای اتلاف انرژی توسط ج. دنیلز^۱ هستند، و خطوط دیگر از اندازه‌گیریهای اپتیکی د. بیگل هول^۲ و ل. ر. کنفیلد^۳ و همکاران محاسبه شده‌اند.

این نتیجه، انگیزه معرفی تابع اتلاف انرژی $\{-\text{Im}\{1/\epsilon(\omega, k)\}\}$ ، و همچنین انگیزه بسیاری از آزمایشها در مورد اتلاف انرژی الکترونیهای سریع در فیلمهای نازک است. اگر تابع دی‌الکتریک مستقل از k باشد، اتلاف توان برابر است با

$$\mathcal{P}(\omega) = -\frac{2}{\pi} \frac{e^2}{\hbar v} \text{Im}\{1/\epsilon(\omega)\} \ln(k_0 v/\omega) \quad (۲۴)$$

که در آن $\hbar k_0$ بیشینه انتقال تکانه ممکن از ذره اولیه به یک الکترون در بلور است. شکل ۱۹، سازگاری تجربی عالی بین مقادیرهای $\epsilon''(\omega)$ حاصل از اندازه‌گیریهای ضریب بازتاب اپتیکی و مقادیرهای حاصل از اندازه‌گیریهای اتلاف انرژی الکترون را نشان می‌دهد.

چکیده

• رابطه‌های کریمرز-کرونینگ بخشهای حقیقی و موهومی تابع پاسخ را به هم مربوط می‌سازند

$$\alpha'(\omega) = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{s\alpha''(s)}{s^2 - \omega^2} ds; \quad \alpha''(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^\infty \frac{s\alpha'(s)}{s^2 - \omega^2} ds$$

• شاخص مختلط شکست برابر است با $N(\omega) = n(\omega) + iK(\omega)$ ، که در آن n شاخص شکست و K ضریب خاموشی است؛ به علاوه $\epsilon(\omega) = N^2(\omega)$ ، بنابراین $\epsilon'(\omega) = n^2 - K^2$ و $\epsilon''(\omega) = 2nK$

• بازتابندگی در فرود عمودی برابر است با

$$R = \frac{(n-1)^2 + K^2}{(n+1)^2 + K^2}$$

• تابع اتلاف انرژی $-\text{Im}\{1/\epsilon(\omega)\}$ اتلاف انرژی ذره بارداري که در جامد حرکت می‌کند، به دست می‌دهد.

مسائل

۱. علیت و تابع پاسخ. رابطه‌های کریمرزکرونیگ (KK) با این اصل که معلول از علت خود پیشی نمی‌گیرد سازگار است. نیرویی به شکل تابع دلتا در نظر بگیرید که در زمان $t = 0$ اعمال می‌شود:

$$F(t) = \delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} d\omega$$

در نتیجه $F_\omega = 1/2\pi$ (الف) با انتگرال‌گیری مستقیم، یا با استفاده از رابطه‌های KK، نشان دهید که از تابع پاسخ نوسانگر

$$\alpha(\omega) = (\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\rho)^{-1}$$

تحت اثر نیروی فوق و به ازای $t < 0$ ، جابه‌جایی صفر، $x(t) = 0$ را به دست می‌دهد. به ازای $t > 0$ انتگرال پربندی را می‌توان با یک نیم‌دایره در نیم‌صفحه بالایی کامل کرد. (ب) $x(t)$ را به ازای $t > 0$ محاسبه کنید. توجه کنید که $\alpha(\omega)$ دارای قطبهایی در $\frac{1}{2}\rho i$ و $-\frac{1}{2}\rho i$ است که هر دو در نیم‌صفحه پایینی قرار دارند.

*۲. قاعده جمع اتلاف. با مقایسه $\alpha'(\omega)$ از رابطه (۹) و از رابطه (۱۱ الف) در حد $\omega \rightarrow \infty$ ، نشان دهید که این قاعده جمع باید برای قدرتهای نوسانگر برقرار باشد:

$$\sum f_j = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} s\alpha''(s) ds$$

۳. بازتاب در فرود عمودی. یک موج الکترومغناطیسی را در خلأ با مؤلفه‌های میدان به شکل زیر در نظر بگیرید

$$E_y(\text{inc}) = B_z(\text{inc}) = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

فرض کنید این موج بر محیطی، با ثابت دی‌الکتریک ϵ و پذیرفتاری $\mu = 1$ ، فرود آید که نیم‌فضای $x > 0$ را پر می‌کند. نشان دهید که ضریب بازتاب $r(\omega)$ ، که به صورت $E(\text{refl}) = r(\omega)E(\text{inc})$

تعریف می‌شود، از رابطه زیر به دست می‌آید

$$r(\omega) = \frac{n + iK - 1}{n + iK + 1}$$

که در آن $n + iK = \epsilon^{1/2}$ ، n و K حقیقی اند. به علاوه نشان دهید که بازتابندگی برابر است با

$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + K^2}{(n+1)^2 + K^2}$$

۴*. قاعده جمع رسانندگی، و ابررسانایی. رسانندگی الکتریکی را به صورت $\sigma(\omega) = \sigma'(\omega) + i\sigma''(\omega)$ می‌نویسیم. که در آن σ' و σ'' حقیقی اند. (الف) با استفاده از رابطه کریمرز-کرونینگ نشان دهید که

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} \omega \sigma''(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \sigma'(s) ds \quad (45)$$

این نتیجه در نظریه ابررسانایی به کار می‌رود. اگر $\sigma''(\omega)$ در بسامدهای بسیار بالا (مانند بسامد پرتوهای x) برای حالت‌های ابررسانشی و معمولی یکسان باشد، باید داشته باشیم

$$\int_0^{\infty} \sigma'_s(\omega) d\omega = \int_0^{\infty} \sigma'_n(\omega) d\omega$$

ولی در بسامدهای $\omega_g < \omega < \infty$ واقع در گاف انرژی ابررسانا، بخش حقیقی رسانندگی ابررسانا صفر می‌شود، در نتیجه در این ناحیه، انتگرال طرف چپ تقریباً به اندازه $\sigma'_n \omega_g$ پایتتر است. بنابراین باید یک سهم اضافی در σ'_s موجود باشد تا این کاستی را جبران کند. (ب) نشان دهید که اگر همان گونه که تجربه نشان می‌دهد $\sigma'_s(\omega < \omega_g) < \sigma'_n(\omega < \omega_g)$ ، $\sigma'_s(\omega)$ می‌تواند در $\omega = \infty$ دارای سهمی به شکل تابع دلتا باشد، و از این تابع دلتا سهم $\sigma''_s(\omega) \approx \sigma'_n \omega_g / \omega$ حاصل می‌شود. تابع دلتا به رسانندگی نامتناهی در بسامد صفر مربوط می‌شود. (ج) با ملاحظه مقدماتی حرکت کلاسیکی الکترونها رسانش در بسامدهای بسیار بالا نشان دهید که

$$\int_0^{\infty} \sigma'(\omega) d\omega = \pi n e^2 / 2m \quad (\text{CGS})$$

این نتیجه‌ای است که توسط فرل^۱ و گلوور^۲ به دست آمد.

۵. ثابت دی‌الکتریک و گاف انرژی نیمرسانا. اثر گاف انرژی ω_g در نیمرسانا روی $\epsilon''(\omega)$ را می‌توان به گونه بسیار تقریبی با نشاندن $\frac{1}{2} \delta(\omega - \omega_g)$ به جای $\delta(\omega)$ در تابع پاسخ (۱۶) به دست آورد؛ یعنی می‌گیریم $\epsilon''(\omega) = (2\pi n e^2 / m \omega) \pi \delta(\omega - \omega_g)$. این فرض بسیار تقریبی است، زیرا تمام جذب را در بسامد گاف قرار می‌دهد. به محض اینکه تابع دلتا را از مبدأ دور می‌کنیم ضریب $\frac{1}{2}$ وارد می‌شود، زیرا انتگرال مربوط به قاعده جمع مسئله^۲ از مبدأ شروع می‌شود. نشان دهید که بخش حقیقی ثابت دی‌الکتریک در این مدل برابر است با

$$\epsilon'(\omega) = 1 + \omega_p^2 / (\omega_g^2 - \omega^2), \quad \omega_p^2 \equiv 4\pi n e^2 / m$$

* این مسئله تا حدودی مشکل است.

نتیجه می‌شود که ثابت دی‌الکتریک استاتیکی برابر است با $\omega_p^2/\omega_g^2 = 1 + \epsilon'(\omega)$ ، این رابطه به صورت یک قاعده عملی به طور گسترده مورد استفاده قرار می‌گیرد.

۶. رابطه هاگن-روبنز^۱ برای ضریب بازتاب فروسخ فلزات. شاخص مختلط شکست $n + iK$ فلز به ازای $1 \ll \omega\tau$ با رابطه زیر داده می‌شود

$$(CGS) \quad \epsilon(\omega) \equiv (n + iK)^2 = 1 + 4\pi i\sigma_0/\omega$$

که در آن σ_0 رسانندگی برای میدانهای استاتیکی است. در اینجا فرض می‌کنیم که جریانهای درون‌نواری حاکم‌اند؛ از گذارهای بین نواری چشم‌پوشی می‌کنیم. با استفاده از نتیجه مسئله ۳ برای ضریب بازتاب در فرود عمودی، نشان دهید به شرط آنکه $\omega \gg \sigma_0$ ، داریم

$$(CGS) \quad R \simeq 1 - (\omega/\pi\sigma_0)^{1/2}$$

که رابطه هاگن-روبنز است. برای سدیم در دمای اتاق، در (CGS) $10^{17} s^{-1} \times 2.1 \simeq \sigma_0$ و τ و از رابطه $\tau = \sigma_0 m/ne^2$ به دست می‌آید برابر است با $3.1 \times 10^{-14} s = \tau$. تابش $10 \mu m$ دارای $10^{14} s^{-1} = \omega$ است، در نتیجه رابطه هاگن-روبنز باید صادق باشد: $R = 0.976$. مقدار محاسبه‌شده با استفاده از مقادیر تجربی n و K برابر 0.987 است. راهنمایی: اگر $\omega \gg \sigma_0$ ، $n^2 \simeq K^2$ خواهد بود. این نکته عملیات جبری را ساده می‌کند.

*۷. شکافتگی داویدف خطوط اکسیتونی. اگر دو اتم A و B در یاخته بسیط موجود باشند، نوار اکسیتون فرنکل شکل ۹ دو تا می‌شود. نظریه مربوط به معادله‌های (۲۵) تا (۲۹) را در مورد بلور خطی AB.AB.AB.AB با انتگرالهای انتقال T_1 بین AB و T_2 بین BA تعمیم دهید. برای این دو نوار معادله‌ای به صورت تابعی از طول موج پیدا کنید. شکافتگی بین دو نوار در $k = 0$ ، شکافتگی داویدف نامیده می‌شود.

دی الکتریکها و فروالکتریکها^۱

نخست میدان الکتریکی اعمال شده را به میدان الکتریکی داخلی بلور دی الکتریک مربوط می‌کنیم. بررسی میدان الکتریکی در داخل ماده دی الکتریک به هنگام طرح سؤالیهای زیر بروز می‌کند:

- در ماده، رابطه بین قطبیدگی دی الکتریک، \mathbf{P} و میدان الکتریکی ماکروسکوپی \mathbf{E} در معادلات ماکسول چیست؟

۱. نمادگذاری:

$$\epsilon_0 = 10^9 / 4\pi c^2;$$

(CGS)

$$D = E + 4\pi P = \epsilon E = (1 + 4\pi\chi)E; \quad \alpha = p/E_{\text{موضعی}}$$

(SI)

$$D = \epsilon_0 E + P = \epsilon \epsilon_0 E = (1 + \chi)\epsilon_0 E; \quad \alpha = p/E_{\text{موضعی}}$$

$$\epsilon_{\text{CGS}} = \epsilon_{\text{SI}}; \quad 4\pi\chi_{\text{CGS}} = \chi_{\text{SI}}; \quad \alpha_{\text{SI}} = 4\pi\epsilon_0 \alpha_{\text{CGS}}$$

• رابطه بين قطبيدگی دی‌الکتريک و ميدان الکتريکی موضعی که در جایگاه اتم در شبکه عمل می‌کند چیست؟ ميدان موضعی، گشتاور دوقطبی اتم را تعيين می‌کند.

معادلات ماکسول

$$\begin{aligned} & \text{(CGS)} \\ \text{curl } \mathbf{H} &= \frac{\epsilon_0}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{E} + \epsilon_0 \mathbf{P}); \\ \text{curl } \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}; \\ \text{div } \mathbf{E} &= \epsilon_0 \rho; \\ \text{div } \mathbf{B} &= 0; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \text{(SI)} \\ \text{curl } \mathbf{H} &= \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}); \\ \text{curl } \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}; \\ \text{div } \epsilon_0 \mathbf{E} &= \rho; \\ \text{div } \mathbf{B} &= 0; \end{aligned}$$

قطبيدگی

قطبيدگی \mathbf{P} به صورت گشتاور دوقطبی در واحد حجم، که روی حجم یک ياخته میانگين‌گيري شده باشد، تعريف می‌شود. گشتاور دوقطبی کل به اين صورت تعريف می‌شود

$$\mathbf{p} = \sum q_n \mathbf{r}_n \quad (1)$$

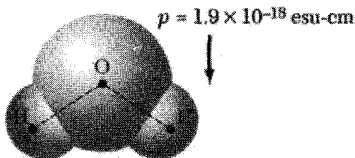
که در آن بردار مکان بار q_n است. در صورتی‌که دستگاه خنثی باشد، مقدار اين مجموع مستقل از مبدأ انتخاب شده برای بردارهای مکان است: فرض می‌کنيم $\mathbf{r}'_n = \mathbf{r}_n + \mathbf{R}$; در نتیجه $\mathbf{p} = \sum q_n \mathbf{r}'_n = \mathbf{R} \sum q_n + \sum q_n \mathbf{r}_n = \sum q_n \mathbf{r}_n$ داده شده است.

ميدان الکتريکی حاصل از نقطه‌ای با گشتاور \mathbf{p} در نقطه \mathbf{r} با نتیجه استاندارد الکتروستاتیک مقدماتی

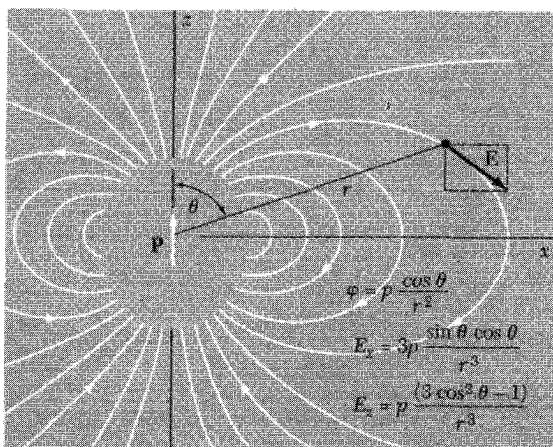
زیر داده می‌شود

$$\begin{aligned} & \text{(CGS)} \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon_0 (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{r} - r^2 \mathbf{p}}{r^5}; \\ & \text{(SI)} \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon_0 (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{r} - r^2 \mathbf{p}}{4\pi \epsilon_0 r^5} \end{aligned} \quad (2)$$

خطوط نیروی یک دوقطبی که در جهت محور z قرار دارد در شکل ۲ نشان داده شده‌اند.



شکل ۱. گشتاور دوقطبی دائمی مولکول آب دارای بزرگی به $1.9 \times 10^{-18} \text{ esu-cm}$ است و جهت آن از یون O^{2-} به سوی نقطه میانی خط واصل یونها H^+ است. (برای تبدیل به واحدهای SI p را در 10^{11} ضرب کنید).



شکل ۲. مؤلفه‌های میدان و پتانسیل الکتروستاتیکی در CGS در مکان r ، θ برای دوقطبی p در جهت محور z قرار دارد. برای $\theta = 0$ ، داریم $E_x = E_y = 0$ و $E_z = 2p/r^3$ ؛ برای $\theta = \pi/4$ داریم $E_x = E_y = 0$ و $E_z = -p/r^3$. برای تبدیل به SI، p را با $p/4\pi\epsilon_0$ تعویض کنید.

میدان الکتریکی ماکروسکوپی

یک سهم در میدان الکتریکی درون جسم سهمی است که ناشی از میدان الکتریکی اعمال شده است و به صورت زیر تعریف می‌شود

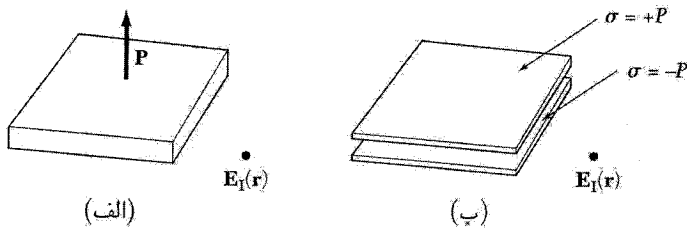
$$\boxed{\mathbf{E}_0 \equiv \text{میدان تولیدشده به وسیله بارهای ثابت خارج از جسم}} \quad (3)$$

سهم دیگر در این میدان الکتریکی عبارت است از مجموع میدانهای مربوط به همه بارهایی که جسم را تشکیل می‌دهند. اگر جسم خنثی باشد، سهم بارهای داخلی در میدان میانگین را می‌توان برحسب مجموع میدانهای ناشی از دوقطبیهای اتمی بیان کرد.

میدان الکتریکی میانگین $\mathbf{E}(\mathbf{r}_0)$ به صورت میدان میانگین روی حجم یاخته بلوری، که شامل نقطه شبکه \mathbf{r}_0 است، تعریف می‌شود:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_0) = \frac{1}{V_c} \int dV \mathbf{e}(\mathbf{r}) \quad (4)$$

که در آن $\mathbf{e}(\mathbf{r})$ میدان الکتریکی میکروسکوپی در نقطه \mathbf{r} است. میدان \mathbf{E} بسیار هموارتر از میدان میکروسکوپی \mathbf{e} است. چون میدان دوقطبی (۲) یک میدان هموارنشده میکروسکوپی است، می‌توانستیم آن را به صورت $\mathbf{e}(\mathbf{r})$ نیز بنویسیم.



شکل ۳. (الف) یک تیغه دی الکتریک که به طور یکنواخت قطبی شده است. بردار قطبیدگی \mathbf{P} عمود بر صفحه تیغه است. (ب) یک زوج ورقه موازی که به طور یکنواخت باردار شده‌اند و میدان \mathbf{E}_I حاصل از آنها با میدان حالت (الف) یکسان است. صفحه بالایی دارای چگالی بار سطحی $\sigma = +P$ و صفحه پایینی دارای چگالی بار سطحی $\sigma = -P$ است.

\mathbf{E} را میدان الکتریکی ماکروسکوپی می‌نامیم. این میدان برای تمامی مسائل الکترواستاتیکی بلورها بسنده است، به شرط آنکه رابطه بین \mathbf{E} ، قطبیدگی \mathbf{P} ، و چگالی جریان \mathbf{j} را بدانیم و نیز به شرط آنکه طول موجهای موردنظر در مقایسه با فاصله شبکه‌ای بلند باشند.^۱

برای یافتن سهم قطبیدگی در میدان ماکروسکوپی، مجموع روی تمامی دو قطبیهای موجود در نمونه را می‌توان ساده کرد. بنابر یک قضیه معروف در الکترواستاتیک^۲، میدان الکتریکی ماکروسکوپی ناشی از قطبیدگی یکنواخت برابر است با میدان الکتریکی در خلأ حاصل از چگالی بار سطحی پنداری $\sigma = \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{P}$ روی سطح جسم. در اینجا $\hat{\mathbf{n}}$ بردار یکه برونسوی عمود بر سطح ماده قطبیده است.

این نتیجه را در مورد تیغه دی الکتریک نازکی (شکل ۳ الف) با قطبیدگی حجمی یکنواخت \mathbf{P} به کار

۱. به دست آوردن معادلات ماکسول برای میدانهای ماکروسکوپی \mathbf{E} و \mathbf{B} ، با شروع از معادلات ماکسول بر حسب میدانهای میکروسکوپی \mathbf{e} و \mathbf{h} ، به تفصیل در کتاب زیر ارائه شده است:

E.M.Purcell, *Electricity and magnetism*, 2nd ed., McGraw-Hill, 1985.

۲. پتانسیل الکترواستاتیکی دو قطبی \mathbf{p} در CGS به صورت $\varphi(\mathbf{r}) = \mathbf{p} \cdot \text{grad}(1/r)$ است. برای یک توزیع حجمی با قطبیدگی \mathbf{P} داریم

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int dV \left(\mathbf{P} \cdot \text{grad} \frac{1}{r} \right)$$

که با استفاده از یک اتحاد برداری به صورت زیر درمی‌آید

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int dV \left(-\frac{1}{r} \text{div} \mathbf{P} + \text{div} \frac{\mathbf{P}}{r} \right)$$

اگر \mathbf{P} ثابت باشد، $\text{div} \mathbf{P} = 0$ و به کمک قضیه گاوس داریم

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int dS \frac{P_n}{r} = \int dS \frac{\sigma}{r}$$

که در آن σdS یک عنصر بار روی سطح جسم است. این قضیه اثبات را تکمیل می‌کند.

می‌بریم. میدان الکتریکی $E_1(\mathbf{r})$ حاصل از قطبیدگی برابر است با میدان حاصل از چگالی بار سطحی پنداری $\sigma = \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{P}$ روی سطح تیغه. جهت بردار یکه $\hat{\mathbf{n}}$ روی مرز بالایی به سوی بالا و روی مرز پایینی به سوی پایین است. مرز بالایی حامل بار پنداری $\sigma = \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{P} = P$ در واحد سطح و مرز پایینی دارای بار پنداری $-P$ در واحد سطح است.

میدان الکتریکی E_1 ناشی از این بارها در هر نقطه واقع در بین ورقه‌ها، ولی دور از لبه آنها، دارای شکلی ساده است. با استفاده از قانون گاوس داریم

$$(SI) \quad E_1 = -\frac{1}{\epsilon_0} \sigma = -\frac{1}{\epsilon_0} P; \quad E_1 = -\frac{|\sigma|}{\epsilon_0} = \frac{P}{\epsilon_0} \quad (4 \text{ الف})$$

E_1 را به میدان اعمال شده E_0 اضافه می‌کنیم تا میدان ماکروسکوپی کل داخل تیغه به دست آید:

$$(CGS) \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_0 - 4\pi P \hat{\mathbf{z}}; \quad (5)$$

$$(SI) \quad \boxed{\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_0 - \frac{P}{\epsilon_0} \hat{\mathbf{z}}}$$

رابطه زیر را تعریف می‌کنیم

$$\boxed{E_1 \equiv \text{میدان حاصل از چگالی بار سطحی } \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{P} \text{ روی مرز}} \quad (6)$$

این میدان در فضای داخل و خارج جسم به آرامی تغییر می‌کند و در معادلات ماکسول، برای میدان ماکروسکوپی \mathbf{E} ، صدق می‌کند. دلیل آنکه E_1 در مقیاس اتمی یک تابع هموار است، این است که شبکه گسسته‌ای از دو قطبیه‌های p را با قطبیدگی هموار شده P جایگزین کرده‌ایم.

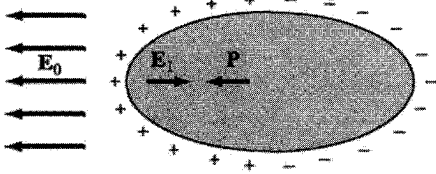
میدان واقطبیدگی، E_1

اگر قطبیدگی درون جسم یکنواخت باشد، تنها سهمهای موجود در میدان ماکروسکوپی از E_0 و E_1 ناشی می‌شوند:

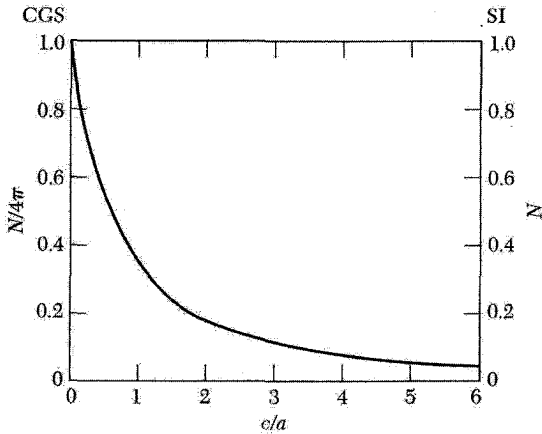
$$\boxed{\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1} \quad (7)$$

در اینجا E_0 میدان اعمال شده و E_1 میدان ناشی از واقطبیدگی یکنواخت است.

میدان E_1 را میدان واقطبیدگی می‌نامند، زیرا، همان‌گونه که در شکل ۴ دیده می‌شود، این میدان در داخل جسم در خلاف جهت میدان اعمال شده E_0 است. نمونه‌های به شکل بیضیوار، شامل کره، استوانه، و قرص در شکل‌های حدی، دارای ویژگی متمایز آنند: قطبیدگی یکنواخت میدان واقطبیدگی یکنواختی



شکل ۴. میدان واقطبیذگی E_1 در جهت مخالف P است. بارهای سطحی پنداری نشان داده شده‌اند: میدان ناشی از این بارها در داخل بیضیوار برابر E_1 است.



شکل ۵. ضریب واقطبیذگی N در امتداد محور شکل بیضیوارهای دوار، به صورت تابعی از نسبت محوری c/a .

در درون جسم تولید می‌کند. این امر نتیجهٔ ریاضی معروفی است که در کتابهای درسی الکتریسیته و مغناطیس نشان داده می‌شود:

اگر P_x, P_y, P_z مؤلفه‌های قطبیذگی P نسبت به محوره‌های اصلی بیضیوار باشند، مؤلفه‌های میدان واقطبیذگی به صورت زیر نوشته می‌شوند

$$(CGS) \quad E_{\setminus x} = -N_x P_x; \quad E_{\setminus y} = -N_y P_y; \quad E_{\setminus z} = -N_z P_z \quad (\Lambda)$$

$$(SI) \quad \boxed{E_{\setminus x} = -\frac{N_x P_x}{\epsilon_0}; \quad E_{\setminus y} = -\frac{N_y P_y}{\epsilon_0}; \quad E_{\setminus z} = -\frac{N_z P_z}{\epsilon_0}}$$

در اینجا N_x, N_y, N_z ضرایب واقطبیذگی‌اند و مقادیرشان به نسبت محوره‌های اصلی بیضیوار بستگی دارند. این N ها مثبت‌اند و از قاعدهٔ جمع $N_x + N_y + N_z = 4\pi$ در CGS و $N_x + N_y + N_z = 1$ در SI پیروی می‌کنند.

مقادیر N ، به موازات محور شکل بیضیوار دوار در شکل ۵ ترسیم شده‌اند؛ موارد دیگر را آزرین و استونر^۲ محاسبه کرده‌اند. در موارد حدی N دارای مقادیر زیر است:

1. R.Becker, *Electromagnetic fields and interactions*, Blaisdell, 1964, pp. 102-107.

2. J. A. Osborn, *Phys. Rev.* **67**,351(1945); E.C.Stoner, *Philosophical Magazine* **36**. 803 (1945).

شکل	محور	N (CGS)	N (SI)
کره	دلخواه	$4\pi/3$	$1/3$
تیغه نازک	عمودی	4π	1
تیغه نازک	در صفحه	0	0
استوانه طویل دایره‌ای	طولی	0	0
استوانه طویل دایره‌ای	عرضی	2π	$1/2$

میدان واقطبییدگی را می‌توان به دو روش به صفر کاهش داد، یکی با کارکردن به موازات محور نمونه نازک و طولی و دیگری با برقراری اتصال الکتریکی بین الکترودهایی که در دو سطح مقابل یک تیغه نازک نشانده شده‌اند. میدان یکنواخت E_0 قطبییدگی یکنواختی در بیضیوار القا می‌کند. پذیرفتاری دی الکتریک χ را به‌گونه‌ای معرفی می‌کنیم که رابطه

$$(CGS) \quad \mathbf{P} = \chi \mathbf{E}; \quad \boxed{(SI) \mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E}} \quad (9)$$

میدان ماکروسکوپی \mathbf{E} در داخل بیضیوار به قطبییدگی \mathbf{P} مربوط کند. در اینجا $\chi_{SI} = 4\pi\chi_{CGS}$. اگر \mathbf{E}_0 یکنواخت و موازی با یک محور اصلی بیضیوار باشد، با استفاده از رابطه (۸) نتیجه می‌شود

$$(SI) \quad E = E_0 + E_{\setminus} = E_0 - NP; \quad \boxed{(SI) E = E_0 - \frac{NP}{\epsilon_0}} \quad (10)$$

که از آنجا

$$(CGS) \quad P = \chi(E_0 - NP); \quad P = \frac{\chi}{1 + N\chi} E_0 \quad (11)$$

$$(SI) \quad \boxed{P = \chi(\epsilon_0 E_0 - NP); \quad P = \frac{\chi \epsilon_0}{1 + N\chi} E_0}$$

مقدار قطبییدگی به ضریب واقطبییدگی N بستگی دارد.

میدان الکتریکی موضعی در محل اتم

مقدار میدان الکتریکی موضعی که در جایگاه اتم عمل می‌کند تفاوت قابل ملاحظه‌ای با مقدار میدان الکتریکی ماکروسکوپی دارد. برای اینکه خود را در این مورد متقاعد کنیم، می‌توانیم در یک بلور کروی شکل

میدان موضعی را در جایگاهی در نظر بگیریم که آرایش همسایه‌ها نسبت به آن مکعبی باشد.^۱ میدان الکتریکی ماکروسکوپی در کره، با استفاده از رابطه (۱۰)، عبارت است از

$$(CGS) \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_0 - \frac{4\pi}{3} \mathbf{E} \quad (12)$$

$$(SI) \quad \boxed{\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_0 - \frac{1}{3\epsilon_0} \mathbf{P}}$$

میدانی در نظر بگیرید که بر اتمی در مرکز کره (که اتم مشخصی است) عمل می‌کند. اگر تمامی دوقطبیها با محور z موازی و دارای بزرگی p باشند، مؤلفه z میدان در مرکز، ناشی از بقیه دوقطبیهای دیگر، از رابطه (۲) چنین به دست می‌آید

$$(CGS) \quad E_{\text{دوقطبی}} = p \sum_i \frac{z_i^2 - r_i^2}{r_i^5} = p \sum_i \frac{z_i^2 - x_i^2 - y_i^2}{r_i^5} \quad (13)$$

در SI، p را با $p/4\pi\epsilon_0$ تعویض می‌کنیم. به دلیل تقارن شبکه و کره جهتهای x ، y ، و z معادلند؛ به این ترتیب

$$\sum_i \frac{z_i^2}{r_i^5} = \sum_i \frac{x_i^2}{r_i^5} = \sum_i \frac{y_i^2}{r_i^5}$$

که در نتیجه $E_{\text{دوقطبی}} = 0$.

در نمونه گروی، میدان موضعی صحیح برای یک جایگاه اتمی با محیط مکعبی درست برابر با میدان اعمال شده است، $\mathbf{E}_{\text{موضعی}} = \mathbf{E}_0$. بنابراین، میدان موضعی با میدان میانگین ماکروسکوپی \mathbf{E} برابر نیست.

اکنون عبارتی برای میدان موضعی جایگاه عمومی شبکه‌ای به دست می‌آوریم، که الزاماً دارای تقارن مکعبی نباشد. میدان موضعی در اتم برابر است با مجموع میدان الکتریکی \mathbf{E}_0 ناشی از چشمه‌های خارجی و میدان ناشی از دوقطبیهای واقع در داخل نمونه مناسب است که میدان ناشی از دوقطبیها را به‌گونه‌ای تجزیه کنیم که بخشی از جمع‌زنی روی دوقطبیها را بتوان با انتگرال‌گیری تعویض کرد.

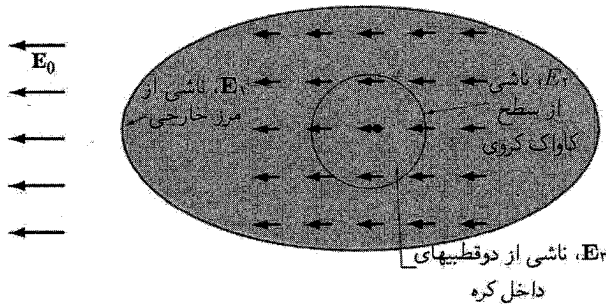
می‌نویسیم

$$\boxed{\mathbf{E}_{\text{موضعی}} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2 + \mathbf{E}_3} \quad (14)$$

در اینجا

$\mathbf{E}_0 =$ میدان تولیدشده توسط بارهای ثابت در خارج جسم؛

۱. جایگاههای اتمی در بلورهای مکعبی الزاماً دارای تقارن مکعبی نیستند؛ بنابراین جایگاههای O^{2-} در ساختار باریتانات شکل ۱۰ دارای محیط مکعبی نیستند. ولی، جایگاههای Na^+ و Cl^- در ساختار $NaCl$ و جایگاههای Cs^+ و Cl^- در ساختار $CsCl$ تقارن مکعبی دارند.



شکل ۶. میدان الکتریکی داخلی در مکان یک اتم در بلور برابر است با مجموع میدان اعمال شده خارجی E_0 و میدان ناشی از اتمهای دیگر در بلور. روش استاندارد برای جمع کردن میدان دوقطیبهای اتمهای دیگر این است که ابتدا مجموع روی تعداد متعادلی از اتمهای همسایه موجود در یک کره خیالی که با اتم مرجع هم مرکز است محاسبه شود: این امر میدان E_3 را، که در یک جایگاه مرجع با تقارن مکعبی صفر می شود، تعریف می کند. اتمهای خارج کره را می توان به صورت دی الکتریکی که به طور یکنواخت قطبی شده در نظر گرفت. سهم آنها در میدان در نقطه مرجع برابر است با $E_1 + E_2$ ، که E_1 میدان واقطیبیدگی مربوط به مرز خارجی و E_2 میدان مربوط به سطح کاواک کروی است.

E_1 = میدان واقطیبیدگی، ناشی از چگالی بار سطحی $\hat{n} \cdot P$ روی سطح خارجی نمونه؛
 E_2 = میدان کاواک لورنتس: میدان ناشی از بارهای قطبشی روی سطح داخلی کاواک کروی ای که (به صورت یک تصور ریاضی)، مانند شکل ۶، در داخل نمونه در نظر گرفته می شود و اتم مرجع در مرکز آن قرار دارد. $E_1 + E_2$ میدان ناشی از قطبیدگی یکنواخت جسمی است که در آن حفره ای ایجاد شده است.

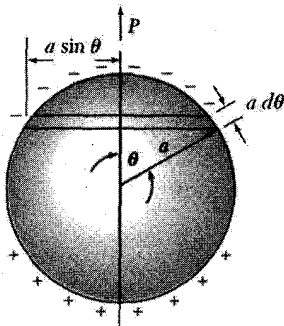
E_3 = میدان ناشی از اتمهای داخل کاواک.

سهم $E_1 + E_2 + E_3$ در میدان موضعی برابر است با میدان کل، ناشی از گشتاورهای دوقطبی تمامی اتمهای دیگر داخل نمونه، در محل یک اتم:

$$(CGS) \quad E_1 + E_2 + E_3 = \sum_i \frac{\mathcal{P}(p_i \cdot r)r_i - r_i^2 p_i}{r_i^3} \quad (15)$$

و در SI، p_i را با $p_i/4\pi\epsilon_0$ تعویض می کنیم.

دوقطیبهایی که فاصله آنها از جایگاه مرجع حدوداً از ده برابر ثابت شبکه بیشتر است، با تغییرات آرام در این مجموع سهم دارند. به جای این سهم می توان دو انتگرال سطح به کار برد. یکی از انتگرالهای سطح روی سطح خارجی نمونه بیضیوار گرفته می شود و E_1 را، مانند معادله (۶)، تعریف می کند. انتگرال سطح دوم E_2 را تعریف می کند و آن را می توان روی هر سطح داخلی، که در فاصله مناسبی (مثلاً 5 \AA) از



= بار روی حلقه
 $2\pi a \sin \theta \cdot a d\theta \cdot P \cos \theta$

شکل ۷. محاسبه میدان در کاواک کروی در ماده‌ای که به‌طور یکنواخت قطبی شده است.

جایگاه مرجع قرار گرفته باشد، محاسبه کرد. در \mathbf{E}_3 دوقطبیهایی را که در حجم محصور بین سطوح داخلی و خارجی قرار ندارند، به حساب می‌آوریم. برای سهولت، سطح داخلی را کروی در نظر می‌گیریم.

میدان لورنتس، \mathbf{E}_2

میدان \mathbf{E}_2 ناشی از بارهای قطبشی روی سطح کاواک خیالی را لورنتس محاسبه کرد. اگر زاویه قطبی نسبت به جهت قطبیدگی باشد (شکل ۷)، چگالی بار سطحی روی سطح کاواک برابر است با $-P \cos \theta$. میدان الکتریکی در مرکز کاواک کروی، به شعاع a ، برابر است با

$$(CGS) \quad \mathbf{E}_2 = \int_0^\pi (a^{-2})(2\pi a \sin \theta)(a d\theta)(P \cos \theta)(\cos \theta) = \frac{4\pi}{3} \mathbf{P}; \quad (14)$$

$$(SI) \quad \boxed{\mathbf{E}_2 = \frac{1}{3\epsilon_0} \mathbf{P}}$$

این معادله برابر منفی میدان واقطبییدگی \mathbf{E}_1 در کره قطبیده است، در نتیجه برای کره $\mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2 = 0$.

میدان ناشی از دوقطبیهای داخل کاواک، \mathbf{E}_3

میدان \mathbf{E}_3 ناشی از دوقطبیهای داخل کاواک کروی تنها جمله‌ای است که به ساختار بلور بستگی دارد. برای یک جایگاه مرجع با محیط مکعبی در کره نشان دادیم که، اگر بتوان به جای تمام آنها دوقطبیهای نقطه‌ای موازی قرار داد، خواهیم داشت $\mathbf{E}_3 = 0$. میدان موضعی کل در یک جایگاه مکعبی با استفاده از روابط (۱۴) و (۱۶) برابر است با

$$(CGS) \quad \mathbf{E}_{\text{موضعی}} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1 + \frac{4\pi}{3} \mathbf{P} = \mathbf{E} + \frac{4\pi}{3} \mathbf{E} \quad (17)$$

$$(SI) \quad \mathbf{E}_{\text{موضعی}} = \mathbf{E} + \frac{1}{3\epsilon_0} \mathbf{P}$$

این معادله رابطه لورنتس است: میدانی که بر اتمی واقع در یک جایگاه مکعبی عمل می کند برابر است با میدان ماکروسکوپی \mathbf{E} از معادله (۷) به اضافه $\frac{1}{3}\pi\mathbf{P}$ یا $\mathbf{P}/3\epsilon_0$ ، که از قطبش اتمهای دیگر در نمونه ناشی می شود. داده های تجربی برای بلورهای مکعبی یونی رابطه لورنتس را تأیید می کنند.

ثابت دی الکتریک و قطبش پذیری

ثابت دی الکتریک ϵ محیط همسانگرد یا مکعبی نسبت خلأ برحسب میدان ماکروسکوپی E تعریف می شود:

$$(CGS) \quad \epsilon = \frac{E + \frac{4}{3}\pi P}{E} = 1 + \frac{4}{3}\pi\chi \quad (18)$$

$$(SI) \quad \epsilon = \frac{\epsilon_0 E + P}{\epsilon_0 E} = 1 + \chi$$

به یاد داشته باشید که بنا به تعریف $\chi_{SI} = \frac{4}{3}\pi\chi_{CGS}$ ، ولی $\epsilon_{SI} = \epsilon_{CGS}$.

پذیرفتاری (۹) با ثابت دی الکتریک چنین مربوط می شود:

$$(CGS) \quad \chi = \frac{P}{E} = \frac{\epsilon - 1}{\frac{4}{3}\pi}; \quad (SI) \quad \chi = \frac{P}{\epsilon_0 E} = \epsilon - 1 \quad (19)$$

در بلورهای غیرمکعبی پاسخ دی الکتریک با مؤلفه های تانسور پذیرفتاری یا تانسور ثابت دی الکتریک توصیف می شود:

$$(CGS) \quad P_\mu \chi_{\mu\nu} E_\nu; \quad \epsilon_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} + \frac{4}{3}\pi\chi_{\mu\nu} \quad (20)$$

$$(SI) \quad P_\mu = \chi_{\mu\nu} \epsilon_0 E_\nu; \quad \epsilon_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} + \chi_{\mu\nu}$$

قطبش پذیری، α ، اتم برحسب میدان الکتریکی موضعی در مکان آن اتم تعریف می شود:

$$p = \alpha E_{\text{موضعی}} \quad (21)$$

که در آن p گشتاور دوقطبی است. این تعریف در CGS و در SI به کار می رود، ولی $\alpha_{SI} = \frac{4}{3}\pi\epsilon_0 \alpha_{CGS}$. قطبش پذیری یک ویژگی اتمی است، ولی ثابت دی الکتریک به چگونگی گردهمایی اتمها برای تشکیل بلور بستگی دارد. در اتم غیرکروی α تانسور خواهد بود.

قطبیدگی بلور را می‌توان به‌طور تقریبی به صورت حاصلضرب قطبش‌پذیری آنها در میدان الکتریکی موضعی بیان کرد:

$$P = \sum_j N_j p_j = \sum_j N_j \alpha_j E_{\text{موضعی}}(j) \quad (22)$$

که در آن N_j غلظت و α_j قطبش‌پذیری اتمهای j و $E_{\text{موضعی}}(j)$ میدان موضعی در جایگاههای اتمی j است.

می‌خواهیم ثابت دی‌الکتریک را به قطبش‌پذیریها مربوط کنیم؛ نتیجه به رابطه‌ای بستگی خواهد داشت، که بین میدان الکتریکی ماکروسکوپی و میدان الکتریکی موضعی برقرار است. این رابطه را در دستگاه CGS به دست می‌آوریم و نتیجه حاصل را در هر دو دستگاه واحدها بیان می‌کنیم.

اگر میدان موضعی با رابطه لورنتس (۱۷) داده شود، در این صورت

$$(CGS) \quad P = (\sum N_j \alpha_j) \left(E + \frac{4\pi}{3} P \right)$$

این معادله را برای P حل می‌کنیم تا پذیرفتاری به دست آید

$$(CGS) \quad \chi = \frac{P}{E} = \frac{\sum N_j \alpha_j}{1 - \frac{4\pi}{3} \sum N_j \alpha_j} \quad (23)$$

با تعریف $\epsilon = 1 + 4\pi\chi$ در CGS و با مرتب کردن معادله (۲۳) می‌توان رابطه زیر را، که رابطه کلاؤسیوس-موسوتی نامیده می‌شود، به دست آورد

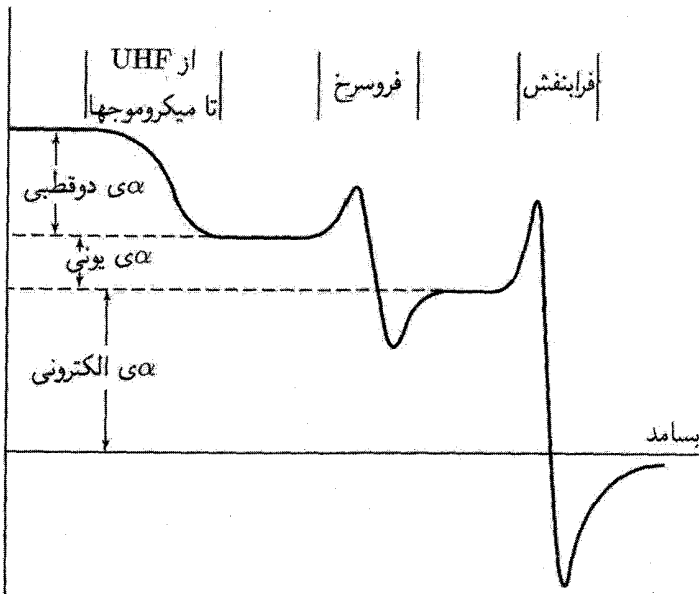
$$(CGS) \quad \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{4\pi}{3} \sum N_j \alpha_j; \quad \boxed{(SI) \quad \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{1}{3\epsilon_0} \sum N_j \alpha_j} \quad (24)$$

این رابطه ثابت دی‌الکتریک را به قطبش‌پذیری الکترونی مربوط می‌کند، ولی تنها در مورد ساختارهای بلوری‌ای صادق است که برای آنها میدان موضعی لورنتس (۱۷) برقرار باشد.

قطبش‌پذیری الکترونی

قطبش‌پذیری کل را معمولاً می‌توان، مانند شکل ۸، به سه بخش تقسیم کرد: الکترونی، یونی، و دوقطبی. سهم الکترونی از جابه‌جایی پوسته الکترونی نسبت به هسته ناشی می‌شود. سهم یونی از جابه‌جایی یک یون باردار نسبت به یونهای دیگر ناشی می‌شود. قطبش‌پذیری دوقطبی از مولکولهایی ناشی می‌شود که دارای گشتاور دوقطبی الکتریکی دائمی باشند و گشتاور بتوانند در میدان الکتریکی اعمال شده تغییر جهت دهند. در مواد ناهمگن معمولاً یک قطبیدگی فصل مشترک نیز وجود دارد که از انباشته شدن بار در فصل

قطبش پذیری کل (بخش حقیقی)



شکل ۸. بستگی بسامدی سهمهای مختلف در قطبش پذیری.

مشترکهای ساختاری ناشی می شود. این امر از نظر بنیادی چندان مورد توجه نیست، ولی به دلیل آنکه مواد عایق تجارتي معمولاً ناهمگن اند^۱، از نظر عملي بسیار مورد توجه است.

ثابت دی الکترونیک در بسامدهای اپتیکی تقریباً به طور کامل از قطبش پذیری الکترونی ناشی می شود، سهمهای یونی و دو قطبی به علت لختی مولکولها و یونها در بسامدهای بالا کوچک اند. در گستره اپتیکی، رابطه (۲۴) به صورت زیر در می آید

$$(CGS) \quad \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{4\pi}{3} \sum N_j \alpha_j \quad (\text{الکترونی}) \quad (25)$$

در اینجا رابطه $\epsilon = n^2$ را به کار برده ایم که در آن n شاخص شکست است.

با به کار بردن معادله (۲۵) در تعداد زیادی از بلورها مقادیر تجربی قطبش پذیری الکترونی را در جدول ۱ تعیین کرده ایم. این مقادیر به طور معقولی با مقادیر مشاهده شده شاخص شکست سازگارند، زیرا قطبش پذیری الکترونی یون تا حدودی به محیطی بستگی دارد که یون در آن قرار دارد. یونهای منفی بسیار قطبش پذیرند، زیرا بزرگ اند.

۱. برای منابع به: D. E. Aspnes. Am. J. Phys. 50, 704 (1982) رجوع کنید.

جدول ۱. قطبش‌پذیری الکترونی اتمها و یونها، برحسب 10^{-24}cm^3

C^{4+}	B^{3+}	Be^{2+}	Li^+	He			
۰.۰۰۱۳	۰.۰۰۰۳	۰.۰۰۰۸	۰.۰۲۹	۰.۲۰۱			پاؤلینگ JS
			۰.۰۲۹				
Si^{4+}	Al^{3+}	Mg^{2+}	Na^+	Ne	F^-	O^{2-}	
۰.۰۱۶۵	۰.۰۰۵۲	۰.۰۰۹۴	۰.۱۷۹	۰.۳۹۰	۱.۰۴	۳.۸۸	پاؤلینگ JS-(TKS)
			۰.۲۹۰		۰.۸۵۸	(۲.۴)	
Ti^{4+}	Se^{2+}	Ca^{2+}	K^+	Ar	Cl^-	S^{2-}	
۰.۱۸۵	۰.۲۸۶	۰.۴۷	۰.۸۳	۱.۶۲	۳.۶۶	۱۰.۲	پاؤلینگ JS-(TKS)
(۰.۱۹)		(۱.۱)	۱.۱۳۳		۲.۹۴۷	(۵.۵)	
Zr^{4+}	Y^{3+}	Sr^{2+}	Rb^+	Kr	Br^-	Se^{2-}	
۰.۳۷	۰.۵۵	۰.۸۶	۱.۴۰	۲.۴۶	۴.۷۷	۱۰.۵	پاؤلینگ JS-(TKS)
		(۱.۶)	۱.۶۷۹		۴.۰۹۱	(۷.۰)	
Ce^{4+}	La^{3+}	Ba^{2+}	Cs^+	Xe	I^-	Te^{2-}	
۰.۷۳	۱.۰۴	۱.۵۵	۲.۴۲	۳.۹۹	۷.۱۰	۱۴.۰	پاؤلینگ JS-(TKS)
		(۲.۵)	۲.۷۴۳		۶.۱۱۶	(۹.۰)	

مقادیر از منابع زیر گرفته شده‌اند:

L. Pauling, Proc. R. Soc. London **A114**, 181(1927); S. S. Jaswal and T. P. Sharma, J. Phys. Chem. Solids **34**, 509 (1973); and J. Tessman, A. Kahn, and W. Shockley Phys. Rev. **92**, 890 (1953).

قطبش‌پذیریهای TKS در بسامد خطوط دی‌سیدیم‌اند. این مقادیر برحسب واحدهای CGS اند؛ برای تبدیل به SI در $10^{-10} \times 9$ ضرب کنید.

نظریه کلاسیکی قطبش‌پذیری الکترونی. الکترونی که به طور هماهنگ به اتم مقید است در بسامد $\omega_0 = (\beta/m)^{1/2}$ که در آن β ثابت نیرو است، جذب تشدید می‌دهد. جابه‌جایی x الکترون که در اثر اعمال میدان موضعی E حاصل می‌شود، با رابطه زیر داده می‌شود

$$-eE_{\text{موضعی}} = \beta x = m\omega_0^2 x \quad (26)$$

در نتیجه، قطبش‌پذیری الکترونی استاتیکی به صورت زیر است

$$\alpha(\text{الکترونی}) = p/E_{\text{موضعی}} = -ex/E_{\text{موضعی}} = e^2/m\omega_0^2 \quad (27)$$

قطبش‌پذیری الکترونی به بسامد بستگی خواهد داشت، و در مثال زیر نشان می‌دهیم که برای بسامد ω داریم

$$\alpha(\text{الکترونی}) = \frac{e^2/m}{\omega_0^2 - \omega^2} \quad (28)$$

ولی در ناحیه مرئی، بستگی بسامدی (پاشیدگی) معمولاً در اغلب مواد شفاف دارای اهمیت زیادی نیست.

مثال: وابستگی بسامدی. بستگی بسامدی قطبش‌پذیری الکترونی یک الکترون را که دارای بسامد تشدیدی ω_0 است به دست آورید. دستگاه را به صورت نوسانگر هماهنگ ساده مورد بررسی قرار دهید.

معادله حرکت در میدان الکتریکی موضعی $\sin \omega t = E$ موضعی چنین است

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + m\omega_0^2 x = -eE \sin \omega t$$

در نتیجه برای $x = x_0 \sin \omega t$ داریم

$$m(-\omega^2 + \omega_0^2)x_0 = -eE$$

گشتاور دوقطبی دارای دامنه زیر است

$$p_0 = -ex_0 = \frac{e^2 E}{m(\omega_0^2 - \omega^2)}$$

که از آن رابطه (۲۸) به دست می‌آید.

در نظریه کوانتومی رابطه متناظر با (۲۸) چنین است

$$\alpha(\text{الکترونی}) = \frac{e^2}{m} = \sum_j \frac{f_{ij}}{\omega_{ij}^2 - \omega^2} \quad (29)$$

که در آن f_{ij} را قدرت نوسانگری گذار دوقطبی الکتریکی بین حالت‌های اتمی i و j می‌نامند. در نزدیکی گذار، علامت قطبش‌پذیری تغییر می‌کند (شکل ۸).

گذارهای فاز ساختاری

با تغییر دما یا فشار غیرمتداول نیست که بلورها از یک ساختار بلوری به ساختار دیگر تبدیل شوند. ساختار پایدار A در صفر مطلق عموماً دارای پایتترین انرژی داخلی دسترس‌پذیر در تمام ساختارهای ممکن است. حتی این گزینش ساختار A را می‌توان با اعمال فشار تغییر داد، زیرا حجم اتمی کمتر به ساختارهای تنگ‌چین یا حتی فلزی منجر می‌شود. برای مثال، هیدروژن و گزنون تحت فشار فرین فلزی می‌شوند.

ساختار ديگر B ممکن است نسبت به ساختار A دارای طيف فونونی نرمتر يا بسامد پايينتر باشد. با افزايش دما فونونها در B به مراتب پيش از A برانگيخته می شوند (برانگيزش بيشتر به معنای اشغال ميانگين گرمایی بالاتر است). چون آنتروبي همراه با افزايش اشغال افزايش می يابد، وقتی دما افزايش پيدا می کند آنتروبي B بالاتر از آنتروبي A می شود.

بدین طريق با افزايش دما اين امکان وجود دارد که ساختار پايدار از A به B تبديل شود. ساختار پايدار در دمای T توسط کميته انرژی آزاد $F = U - TS$ تعيين می شود. اگر دمای T_c (زيرنقطه ذوب) وجود داشته باشد به طوری که $F_A(T_c) = F_B(T_c)$ ، گذار از A به B خواهد بود.

در صفر مطلق اغلب چند ساختار تقريباً دارای انرژی داخلی یکسان اند. ولی روابط پاشيدگی فونونی برای اين ساختارها می توانند نسبتاً متفاوت باشند. انرژیهای فونون نسبت به تعداد و ترتيب اتمهای نزديک حساس اند. اين انرژیها کميتهایی اند که با تغيير ساختار تغيير می کنند.

برخی گذارهای فاز ساختاری فقط آثار کوچکی روی ویژگیهای فیزیکی ماکروسکوپی ماده دارند. ولی، اگر گذار تحت تاثیر تنش اعمال شده صورت گیرد، بلور ممکن است در نزديکی دمای گذار به آسانی از نظر مکانیکی تسليم شود، زیرا بخشهای نسبی دو فاز تحت اثر تنش تغيير خواهند کرد. برخی گذارهای فاز ساختاری ديگر ممکن است آثار چشمگیری بر ویژگیهای الکتریکی ماکروسکوپی داشته باشند.

گذارهای فروالکتريک زيرگروهی از گذارهای فاز ساختاری اند، زيرگروهی که با ظهور قطبیدگی دی الکتریک خود به خودی در بلور مشخص می شود. فروالکتريکها از لحاظ نظری و فنی مورد توجه اند، زیرا ثابت دی الکتریک اغلب آنها به طور غير متداول بالا و به طور غيرعادی وابسته به دماست، و دارای اثر پیزوالکتريک، اثر پيروالکتريک، و آثار الکتروپتیکی، شامل مضاعف شدن بسامد اپتیکی است.

بلورهای فروالکتريک

بلور فروالکتريک، حتی در غياب میدان الکتریکی خارجی از خود گشتاور دوقطبی الکتریکی نشان می دهد. در حالت فروالکتريک مرکز بار مثبت بلور بر مرکز بار منفی منطبق نمی شود.

نمودار قطبیدگی بر حسب میدان الکتریکی برای حالت فروالکتريک حلقه پسماند را نشان می دهد. بلور در حالت دی الکتریک عادی، با افزايش آهسته میدان الکتریکی و سپس کاستن آهسته میدان الکتریکی، معمولاً پسماند محسوسی از خود نشان نمی دهد.

فروالکتريسيته معمولاً در بالای دمای معینی موسوم به دمای گذار از بين می رود. در بالای اين گذار گفته می شود که بلور در حالت پارالکتريک است. واژه پارالکتريک حاکی از تشابهی با پارامغناطيس است: معمولاً با افزايش دما یک کاهش سریع ثابت دی الکتریک وجود دارد.

در برخی بلورها گشتاور دوقطبی فروالکتريک توسط میدان الکتریکی با شدت بيشينه تغيير نمی کند.

منظور از شدت بیشینه شدتی است که می‌توان آن را قبل از فروریزش الکتریکی بر بلور اعمال کرد. در چنین بلورهایی، وقتی دما تغییر کند، اغلب می‌توان تغییری در گشتاور خودبه‌خودی مشاهده کرد (شکل ۹). چنین بلورهایی را پیروالکتریک گویند. لیتیم نیوبات، LiNbO_3 ، در دمای اتاق پیروالکتریک است و دمای گذار بالا ($T_c = 1480^\circ\text{K}$) و قطبیدگی اشباع زیاد ($50 \mu\text{C}/\text{cm}^2$) دارد. این ماده را می‌توان «قطب‌دار» کرد، بدین معنی که با اعمال میدان الکتریکی در دمای بالاتر از 1400°K می‌توان در آن قطبیدگی پسمانده ایجاد کرد.

رده‌بندی بلورهای فروالکتریک

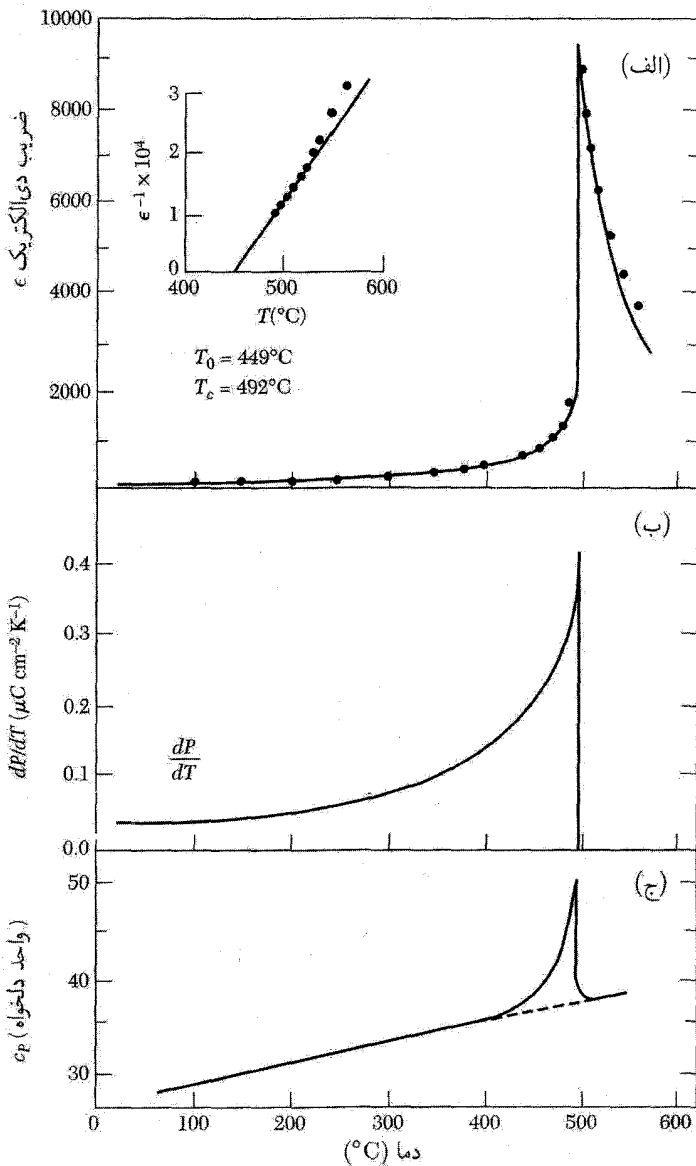
در جدول ۲ بعضی از بلورها را که معمولاً فروالکتریک محسوب می‌شوند، فهرست‌بندی می‌کنیم. در این جدول دمای گذار یا نقطه کوری T_c را، که در آن بلور از حالت قطبیده در دمای پایین به حالت ناقطبیده در دمای بالا تغییر می‌کند، نیز آورده‌ایم. حرکت گرمایی در جهت از بین بردن نظم فروالکتریک عمل می‌کند. بعضی بلورهای فروالکتریک دارای نقطه کوری نیستند، زیرا قبل از گذشتن از فاز فروالکتریک ذوب می‌شوند. در این جدول مقادیر قطبیدگی خودبه‌خودی P_s نیز ذکر شده است. بلورهای فروالکتریک را می‌توان به دو گروه بانظم-بی‌نظم یا جابه‌جاشونده رده‌بندی کرد.

چگونگی گذار را می‌توان به زبان دینامیکی فونون اپتیکی با پایبندترین بسامد ("نرم") تعریف کرد. در صورتی که مد نرم بتواند در لحظه گذار در بلور منتشر شود، گذار جابه‌جاشونده است. اگر مد نرم فقط پخشی (غیرانتشاری) باشد، در واقع اصلاً فونونی وجود ندارد، بلکه فقط یک حرکت جهشی با دامنه بزرگ بین دیوارهای دستگاه بانظم-بی‌نظم وجود دارد. تعداد زیادی از فروالکتریکها دارای مدهای نرم‌اند که بین این دو حد فرین قرار می‌گیرند.

رده بانظم-بی‌نظم فروالکتریکها شامل پیوندهای هیدروژنی و شامل بلورهایی مانند پتانسیم دی‌هیدروژن فسفات (KH_2PO_4) و نمکهای هم‌ریخت است و در آنها حرکت پروتونها به ویژگیهای فروالکتریکی مربوط می‌شود. تعویض دوترونها با پروتونها، T_c را تقریباً دوبرابر می‌کند، هر چند که تغییر نسبی در وزن مولکولی ترکیب کمتر از ۲ درصد است:

KD_2AsO_4	KH_2AsO_4	KD_2PO_4	KH_2PO_4	
۱۶۲K	۹۷K	۲۱۳K	۱۲۳K	دمای کوری

اعتقاد بر آن است که این انتقال ایزوتوپی فوق‌العاده بزرگ یک اثر کوانتومی است، که متضمن بستگی طول موج دوبروی به جرم است. داده‌های پراش نوترون نشان می‌دهد که در بالای دمای کوری توزیع پروتونها در امتداد پیوند هیدروژنی به‌طور متقارن دراز می‌شود. در زیر دمای کوری این توزیع نسبت به یونهای همسایه



شکل ۹. تغییر دمایی (الف) ضرب دی الکتریک ϵ ، (ب) ضرب پیروالکتریک dP/dT و (ج) گرمای ویژه c_p مربوط به PbTiO_3 .

جدول ۲. بلورهای فروالکتريک

برای یافتن قطبیدگی خودبه خودی P_s برحسب واحدهای CGS، یعنی esu cm^{-2} ، مقدار داده شده برحسب $\mu\text{C cm}^{-2}$ را در $10^3 \times 3$ ضرب کنید.

T برحسب K	P_s برحسب $\mu\text{C cm}^{-2}$	$(K)T_c$		نوع
[۹۶]	۴٫۷۵	۱۲۳	KH_2PO_4	KDP
[۱۸۰]	۴٫۸۳	۲۱۳	KD_2PO_4	
[۹۰]	۵٫۶	۱۴۷	RbH_2PO_4	
[۷۸]	۵٫۰	۹۷	KH_2AsO_4	
—	—	۶۷۰	GeTe	
[۲۹]	۲٫۸	۳۲۲	تری‌گلیسین سولفات	نوع TGS
[۲۸۳]	۳٫۲	۲۹۵	تری‌گلیسین سیلنات	
[۲۹۶]	۲۶٫۰	۴۰۸	BaTiO_3	پرووسکیتها
[۵۲۳]	۳۰٫۰	۷۰۸	KNbO_3	
[۲۹۶]	> ۵۰	۷۶۵	PbTiO_3	
	۵۰	۹۳۸	LiTaO_3	
[۲۹۶]	۷۱	۱۴۸۰	LiNbO_3	

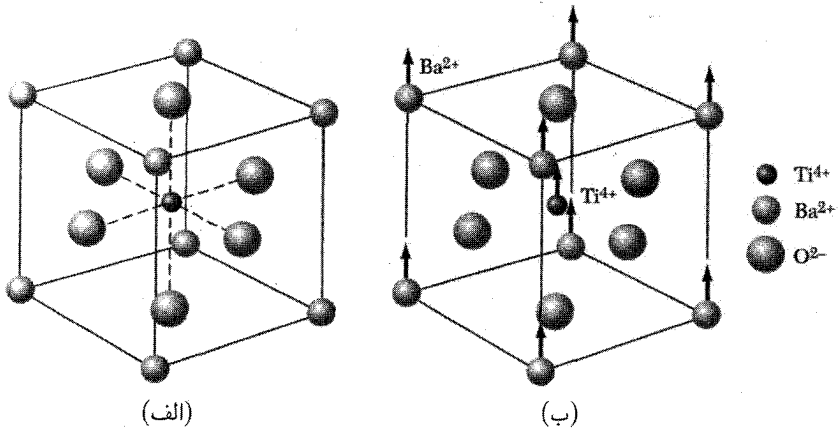
متمركزتر و نامتقارن است، به طوری که برای پروتون یک سر پیوند هیدروژنی به سر دیگرش ترجیح دارد و این امر منجر به قطبیدگی می‌شود.

رده جابه‌جا شونده فروالکتريکها شامل ساختارهای بلوری یونی‌ای است که با ساختارهای پرووسکیت و ایلمنیت ارتباط نزدیکی دارند. ساده‌ترین بلور فروالکتريک GeTe با ساختار سدیم کلرید است. عمدتاً به بلورهایی که دارای ساختار پرووسکیت‌اند می‌پردازیم، شکل ۱۰.

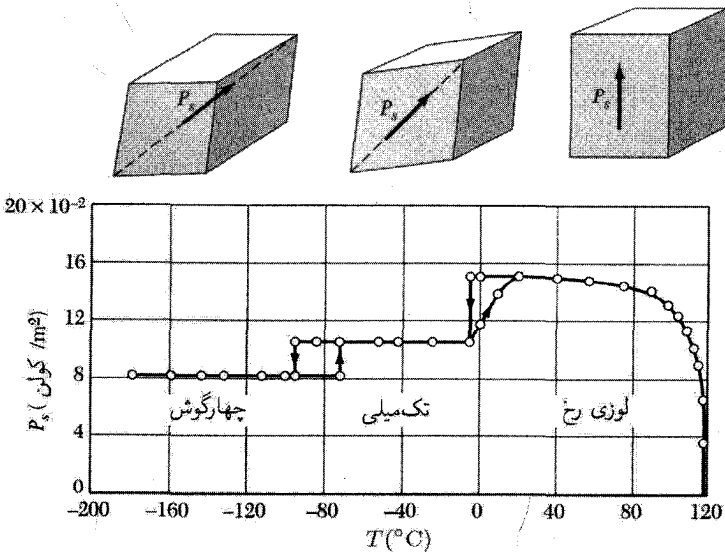
مرتبه بزرگی آثار فروالکتريکی را در باریم تیتانات در نظر می‌گیریم: قطبیدگی اشباعی مشاهده شده P_s در دمای اتاق برابر است با $8 \times 10^4 \text{esu cm}^{-2}$ (شکل ۱۱). حجم یاخته برابر با $64 \times 10^{-24} \text{cm}^3 = (4 \times 10^{-8})^3$ است. بنابراین گشتاور دوقطبی یاخته برابر است با:

$$(CGS) \quad p \cong (8 \times 10^4 \text{esu cm}^{-2})(64 \times 10^{-24} \text{cm}^3) \cong 5 \times 10^{-15} \text{esu cm}$$

$$(SI) \quad p \cong (3 \times 10^{-1} \text{C m}^{-2})(64 \times 10^{-30} \text{m}^3) \cong 2 \times 10^{-29} \text{C m}$$



شکل ۱۰. (الف) ساختار بلوری باریم تیتانات. بلور نوعی این ساختار بلوری کلسیم تیتانات (پرووسکیت) است. این ساختار مکعبی است و در آن یونهای Ba^{2+} در گوشه‌های مکعب، یونهای O^{2-} در مراکز وجوه و یک یون Ti^{4+} در مرکز حجم مکعب قرار دارد. (ب) در پایین دمای کوری این ساختار اندکی تغییر شکل می‌دهد و یونهای Ba^{2+} و Ti^{4+} نسبت به یونهای O^{2-} جابه‌جا می‌شوند. در نتیجه گشتاور دوقطبی ایجاد می‌کند. یونهای اکسیژن بالایی و پایینی ممکن است اندکی به سمت پایین حرکت کنند.



شکل ۱۱. تصویر قطبیدگی خودبه‌خودی روی ضلع یاخته مکعبی باریم تیتانات به صورت تابعی از دما.

اگر یونهای مثبت Ba^{2+} و Ti^{4+} به اندازه 0.1 \AA $\delta =$ نسبت به یونهای منفی O^{2-} حرکت داده می‌شدند، گشتاور دوقطبی یاخته برابر $3 \times 10^{-18} \text{ esu cm}$ می‌شد. در $LiNbO_3$ جابه‌جاییها به طور قابل ملاحظه‌ای بزرگ‌اند، و، به ترتیب، برای یونهای لیتیم و نیوبیم برابرند با 0.9 \AA و 0.5 \AA ، که P_s بزرگتر را به بار می‌آورند.

گذارهای جابه‌جاشونده

دو دیدگاه در فهم گذار جابه‌جاشونده فروالکتریک و به طور کلی با گسترش گذارهای جابه‌جاشونده سهیم‌اند. می‌توان از یک فاجعه قطبش سخن راند که در آن قطبیدگی یا یک مؤلفه فوریه قطبیدگی در یک وضع بحرانی بسیار بزرگ می‌شود. به طور معادل می‌توان از چگالیدگی فوتون اپتیکی عرضی سخن گفت. در اینجا واژه چگالش را در مفهوم بوز-اینشتین (TP ، صفحه ۱۹۹) مربوط به جابه‌جایی مستقل از زمان با دامنه متناهی متوجه می‌شویم. این امر وقتی رخ می‌دهد که بسامد فوتون TO متناظر در نقطه‌ای واقع در منطقه بریلوئن صفر شود. فونونهای LO همواره دارای بسامدهای بالاتر از فونونهای TO با بردار موج یکسان‌اند، در نتیجه با چگالش فوتون LO روبه‌رو نمی‌شویم.

در فاجعه قطبش، میدان الکتریکی موضعی ناشی از جابه‌جایی یونی از نیروی بازگردان کشسان بزرگتر است، در نتیجه این امر به تغییر مکان نامتقارنی در مکان یونها منجر می‌شود. نیروهای بازگرداننده از مرتبه بالاتر جابه‌جایی را به تغییر مکان متناهی محدود می‌سازند.

از وقوع فروالکتریسیت (و پادفروالکتریسیت) در تعداد زیادی از بلورها که ساختار پرووسکیت دارند متوجه می‌شویم که این ساختار به طور مطلوب پذیرای گذار جابه‌جاشونده است. محاسبات میدان موضعی، دلیل وضعیت مساعد این ساختار را روشن می‌سازد: یونهای O^{2-} دارای محیطهای مکعبی نیستند، و فاکتورهای میدان موضعی به صورتی غیرعادی بزرگ می‌شوند.

نخست با فرض اینکه میدان موضعی در تمام آنها برابر با $\mathbf{E} + \frac{4}{3}\pi\mathbf{P}$ در CGS یا $\mathbf{E} + \mathbf{P}/3\epsilon_0$ در SI است، شکل ساده‌ای از نظریه فاجعه را ارائه می‌دهیم. این نظریه به گذار مرتبه دوم منجر می‌شود؛ ایده‌های فیزیکی را می‌توان در مورد گذار مرتبه اول به کار برد. در گذار مرتبه دوم گرمای نهان وجود ندارد؛ پارامتر نظم (در این مثال، قطبیدگی) در دمای گذار پیوسته است. در گذار مرتبه اول گرمای نهان وجود دارد و پارامتر نظم در دمای گذار به طور ناپیوسته تغییر می‌کند.

رابطه (۲۴) را برای ثابت دی الکتریک به صورت زیر بازنویسی می‌کنیم

$$(CGS) \quad \epsilon = \frac{1 + \frac{4\pi}{3} \sum N_i \alpha_i}{1 - \frac{4\pi}{3} \sum N_i \alpha_i} \quad (30)$$

که در آن α_i مجموع قطبش‌پذیریهای یونی و الکترونی یک یون از نوع i و N_i تعداد یونهای i در واحد حجم است. ثابت دی‌الکتریک هنگامی بینهایت می‌شود و قطبیدگی متناهی در میدان اعمال‌شده صفر به‌دست می‌دهد که

$$(CGS) \quad \sum N_i \alpha_i = 3/4\pi \quad (31)$$

این شرط وقوع فاجعه قطبش است. مقدار ϵ در رابطه (۳۰) نسبت به انحرافهای کوچک $\sum N_i \alpha_i$ از مقدار بحرانی $3/4\pi$ حساسیت زیادی دارد. اگر بنویسیم

$$(CGS) \quad (4\pi/3) \sum N_i \alpha_i = 1 - 3s \quad (32)$$

که در آن $s \ll 1$ ، ثابت دی‌الکتریک در رابطه (۳۰) به صورت زیر در می‌آید

$$\epsilon \simeq 1/s \quad (33)$$

فرض کنید در نزدیکی دمای بحرانی، s به طور خطی با دما تغییر کند:

$$s \simeq (T - T_c)/\xi \quad (34)$$

که در آن ξ ثابت است. چنین تغییری در s یا $\sum N_i \alpha_i$ ممکن است از انبساط گرمایی عادی شبکه حاصل شود. ثابت دی‌الکتریک دارای شکل زیر است

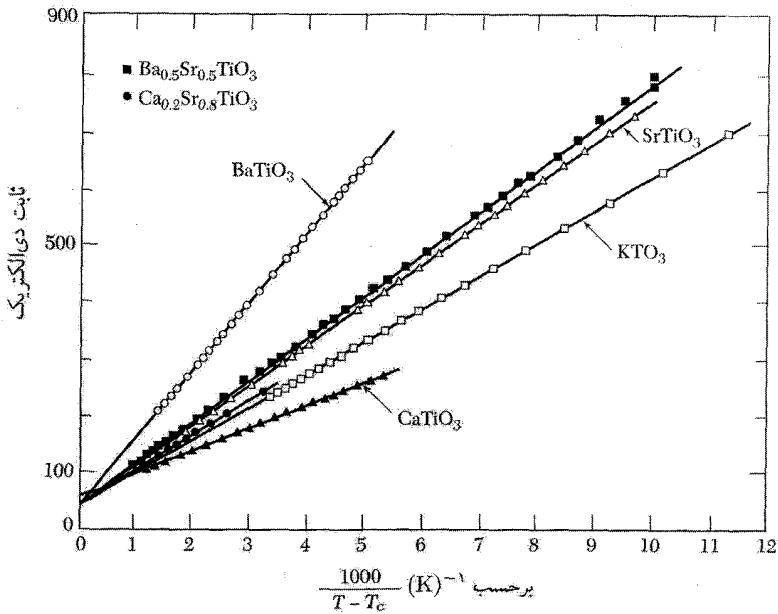
$$\epsilon \simeq \frac{\xi}{T - T_c} \quad (35)$$

که به تغییر دمایی مشاهده‌شده در حالت پارالکتریک، شکل ۱۲، نزدیک است.

فونونهای اپتیکی نرم

رابطه لیدن-زاکس-تالر (فصل ۱۴) به صورت زیر است

$$\omega_T^2 / \omega_L^2 = \epsilon(\infty) / \epsilon(0) \quad (36)$$

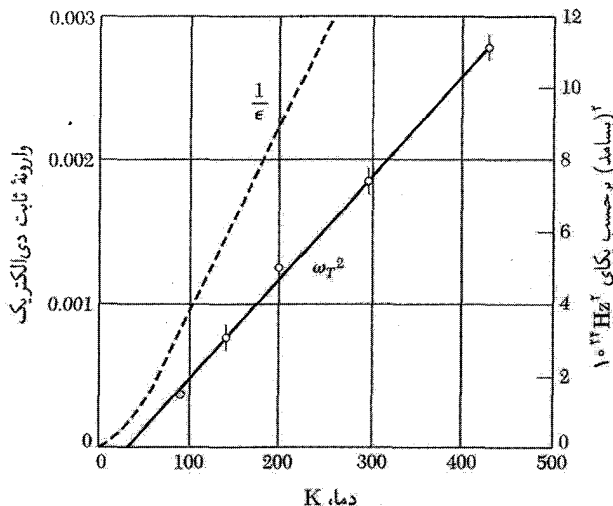


شکل ۱۲. ثابت دی الکتریک پرووسکیتها برحسب $1/(T - T_c)$ در حالت پارالکتریک ($T > T_c$).

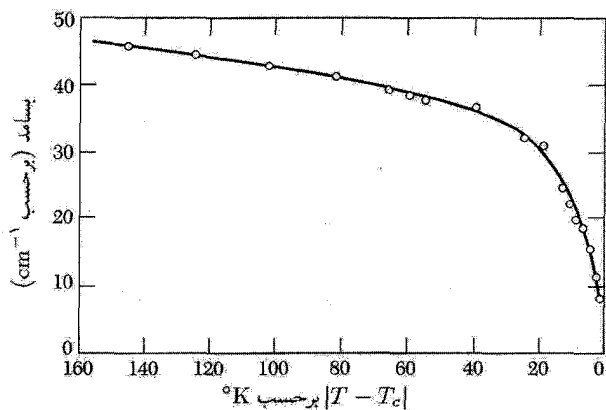
وقتی بسامد فونون اپتیکی عرضی کاهش می یابد، ثابت دی الکتریک استاتیکی افزایش می یابد. اگر ثابت دی الکتریک استاتیکی $\epsilon(\omega)$ دارای مقدار بالایی مانند ۱۰۰ تا ۱۰۰۰۰ باشد، درمی یابیم که ω_T دارای مقدار پایینی است.

وقتی $\omega_T = 0$ بلور ناپایدار و $\epsilon(\omega)$ نامتناهی می شود، زیرا نیروی بازگرداننده مؤثر وجود ندارد. BaTiO_3 فروالکتریکی است که در 24°C یک مد TO در 12cm^{-1} دارد که برای مدهای اپتیکی بسامد پایینی است.

اگر گذار به حالت فروالکتریک از مرتبه اول باشد، در لحظه گذار $\omega_T = 0$ یا $\epsilon(\omega) = \infty$ را نمی یابیم. رابطه LST فقط حاکی از آن است که در دمای T_0 پایینتر از T_c ، $\epsilon(\omega)$ به یک نقطه تکین برونیایی می شود. آزمایشهایی که روی استرانسیم تیتانات، SrTiO_3 ، انجام شده اند وابستگی ثابت دی الکتریک استاتیکی بزرگ را به یک مد اپتیکی با بسامد پایین تأیید می کنند. بنابر رابطه LST ، اگر وارونه ثابت دی الکتریک استاتیکی دارای بستگی دمایی $1/\epsilon(\omega) \propto (T - T_0)$ باشد، در صورتی که ω_L مستقل از دما باشد، مربع بسامد مد اپتیکی دارای بستگی دمایی مشابهی خواهد بود: $\omega_T^2 \propto (T - T_0)$. شکل ۱۳ این نتیجه را برای ω_T^2 بسیار خوب تأیید می کند. اندازه گیریهای ω_T برحسب T برای بلور فروالکتریک دیگری، SbSI ، در شکل ۱۴ نشان داده شده اند.



شکل ۱۳. نمودار مربع بسامد مُد اپتیکی عرضی با بردار موج صفر برحسب دما. برای SrTiO_3 که کاؤلی^۴ در آزمایشهای پراش نوترون مشاهده کرده است. خط چین نمایشگر وارونه ثابت دی‌الکتریک است که از آزمایشهای میتسویی^۵ و وستفال^۶ به‌دست آمده است.



شکل ۱۴. کاهش بسامد فونونی عرضی در بلور فروالکتریک آنتیموان سولفیدید، SbSI، هنگامی که از پایین به دمای کوری نزدیک شویم.

نظریهٔ لاندائو در بارهٔ گذار فاز

فروالکتریکی که دارای گذار فاز مرتبهٔ اول بین حالت‌های فروالکتریک و پارالکتریک است، می‌توان با تغییر ناپیوستهٔ قطبیدگی اشباعی در دمای گذار تشخیص داد. گذار بین حالت‌های عادی و ابررسانش، گذار مرتبهٔ

دوم است، گذار بین حالت‌های فرومغناطیس و پارامغناطیس نیز چنین است. در این گونه گذارها درجهٔ نظم با افزایش دما بدون تغییر ناپیوسته به صفر می‌گراید.

با در نظر گرفتن شکل بسط انرژی به صورت تابعی از قطبیدگی P ، می‌توان یک نظریهٔ صوری و سازگار ترمودینامیکی در مورد بلورهای فروالکتریک به دست آورد. فرض می‌کنیم چگالی انرژی آزاد لاندائو^۱، F ، را در یک بعد بتوان به صورت صوری زیر بسط داد:

$$\hat{F}(P; T, E) = -EP + g_0 + \frac{1}{2}g_2P^2 + \frac{1}{4}g_4P^4 + \frac{1}{6}g_6P^6 + \dots \quad (37)$$

که در آن ضرایب g_n به دما بستگی دارند.

این رشته در صورتی که بلور قطبی نشده دارای مرکز تقارن وارون‌سازی باشد، شامل جمله‌هایی با توانهای فرد P نیست، ولی بلورهایی شناخته شده‌اند که در آنها توانهای فرد دارای اهمیت‌اند. بسط انرژی آزاد به صورت رشتهٔ توانی همیشه وجود ندارد، زیرا معلوم شده است که به خصوص در نزدیکی گذار، جمله‌های غیرتحلیلی پدیدار می‌شوند. برای مثال، در گذار KH_2PO_4 به نظر می‌رسد که ظرفیت گرمایی گذار دارای یک نقطهٔ تکین لگاریتمی در نقطهٔ گذار است، که نه به صورت مرتبهٔ اول و نه مرتبهٔ دوم می‌توان رده‌بندی کرد. مقدار P در تعادل گرمایی از محاسبهٔ کمینهٔ \hat{F} به صورت تابعی از P به دست می‌آید؛ مقدار \hat{F} در این کمینه انرژی آزاد هلمهولتز، $F(T, E)$ ، را تعریف می‌کند. قطبیدگی تعادل در میدان الکتریکی اعمالی E شرط فرین زیر را برآورده می‌کند

$$\frac{\partial \hat{F}}{\partial P} = 0 = -E + g_2P + g_4P^3 + g_6P^5 + \dots \quad (38)$$

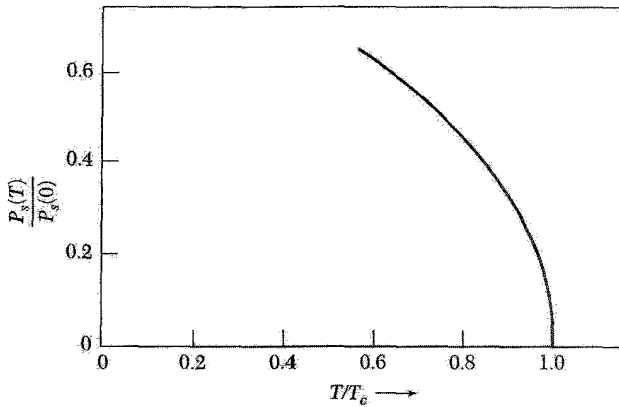
در این بخش فرض می‌کنیم نمونه یک میلهٔ دراز با میدان خارجی اعمالی E موازی با محور طولی آن باشد.

برای به دست آوردن حالت فروالکتریک باید فرض کنیم که ضریب جملهٔ P^2 در (۳۷) در یک دمای T از صفر می‌گذرد:

$$g_2 = \gamma(T - T_0) \quad (39)$$

که در آن γ به صورت ثابتی مثبت در نظر گرفته می‌شود و T_0 ممکن است مساوی یا پایینتر از دمای گذار باشد. مقدار مثبت و کوچک g_2 بدین معنی است که شبکه «نرم» و به ناپایداری نزدیک است. مقدار منفی g_2 بدین معنی است که شبکهٔ قطبی نشده ناپایدار است. تغییر g_2 با دما را می‌توان با انبساط گرمایی و دیگر آثار ناشی از برهم‌کنشهای ناهماهنگ شبکه توجیه کرد.

۱. برای بحث در مورد تابع لاندائو صفحات ۶۹ و ۲۹۸ کتاب TP را ببینید.



شکل ۱۵. قطبیدگی خودبه‌خودی برحسب دما، در گذار فاز مرتبه دوم.

گذار مرتبه دوم

اگر g_4 در رابطه (۳۷) مثبت باشد، جمله g_6 چیز جدیدی اضافه نمی‌کند و در این صورت می‌توان از آن چشم‌پوشی کرد. قطبیدگی برای میدان الکتریکی اعمال‌شده صفر از رابطه (۳۸) به دست می‌آید:

$$\gamma(T - T_0)P_s + g_4 P_s^3 = 0 \quad (40)$$

در نتیجه $P_s = 0$ یا $P_s^2 = (\gamma/g_4)(T_0 - T)$ برای $T \geq T_0$. تنها ریشه حقیقی (۴۰) در $P_s = 0$ است، زیرا γ و g_4 مثبت‌اند. بنابراین T_0 دمای کوری است. برای $T < T_0$ کمینه انرژی آزاد لاندائو در میدان اعمال‌شده صفر، همان‌گونه که در شکل ۱۵ ترسیم شده، در

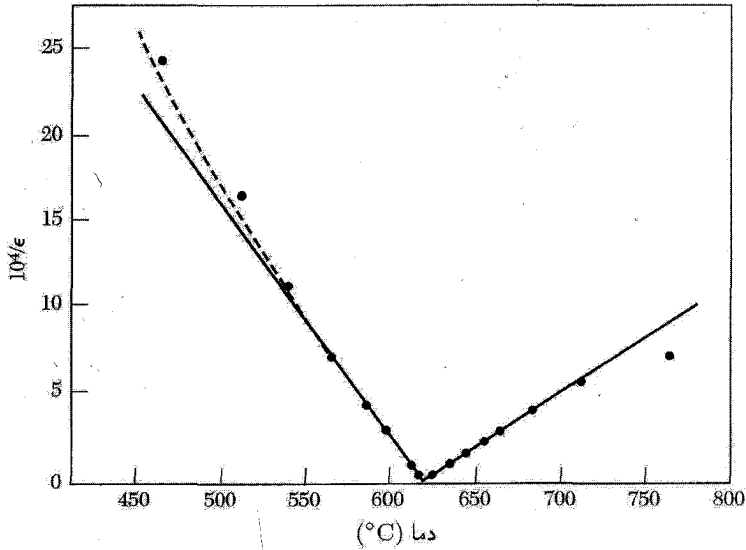
$$|P_s| = (\gamma/g_4)^{1/2} (T_0 - T)^{1/2} \quad (41)$$

است. این گذار فاز گذار مرتبه دوم است، زیرا در دمای گذار قطبیدگی به طور پیوسته به صفر می‌گراید. گذار در LiTaO_3 مثالی از گذار مرتبه دوم است (شکل ۱۶).

گذار مرتبه اول

گذار فاز در صورتی مرتبه اول است که g_4 در رابطه (۳۷) منفی باشد. اکنون باید g_6 را نگه داریم و آن را به منظور جلوگیری از منهای بینهایت شدن \hat{F} مثبت بگیریم (شکل ۱۷). شرط تعادل برای $E = 0$ با رابطه (۳۸) داده می‌شود:

$$\gamma(T - T_0)P_s - |g_4|P_s^3 + g_6 P_s^5 = 0 \quad (42)$$



شکل ۱۶. تغییر دمایی ثابت دی‌الکتریک قطبی-محور LiTaO₃.

در نتیجه یا $P_s = 0$

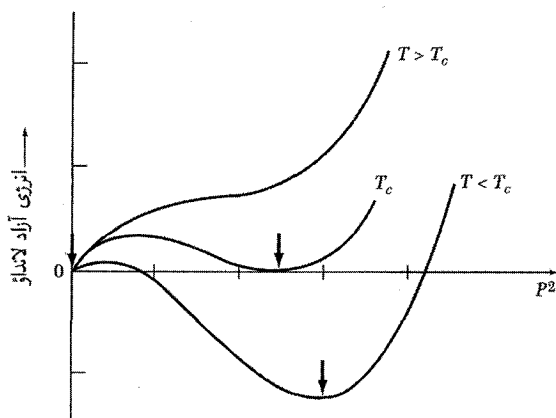
$$\gamma(T - T_0) - |g_4|P_s^2 + g_6P_s^4 = 0 \quad (43)$$

در دمای گذار T_c انرژی آزاد فازهای پارالکتریک و فروالکتریک برابر خواهند بود. یعنی مقدار \hat{F} در $P_s = 0$ برابر با مقدار \hat{F} در کمینه داده شده در معادله (۴۳) است. در شکل ۱۸، وردش مشخصه P_s بر حسب دما را در گذار فاز مرتبه اول نشان داده‌ایم؛ آن را با وردش نشان داده شده در شکل ۱۵ برای گذار فاز مرتبه دوم مقایسه کنید. گذار در BaTiO₃ گذار مرتبه اول است.

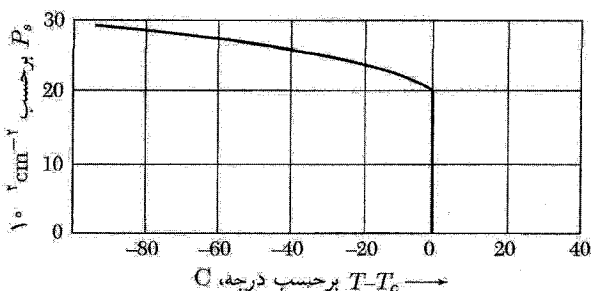
ثابت دی‌الکتریک با استفاده از قطبیدگی تعادلی در میدان الکتریکی اعمال شده E محاسبه می‌شود و از معادله (۳۸) به دست می‌آید. در تعادل، در دماهای بالاتر از دمای گذار از جمله‌های P^4 و P^6 می‌توان چشم‌پوشی کرد؛ در نتیجه $E = \gamma(T - T_0)P$ یا

$$\epsilon(T > T_c) = 1 + 4\pi P/E = 1 + 4\pi/\gamma(T - T_0) \quad (44)$$

که به شکل رابطه (۳۶) است. این نتیجه هم برای گذار مرتبه اول و هم برای گذار مرتبه دوم صادق است، ولی اگر گذار مرتبه دوم باشد داریم $T_0 = T_c$ ؛ و اگر مرتبه اول، داریم $T_0 < T_c$. معادله (۳۹) را T_c تعریف می‌کند، ولی T_c دمای گذار است.



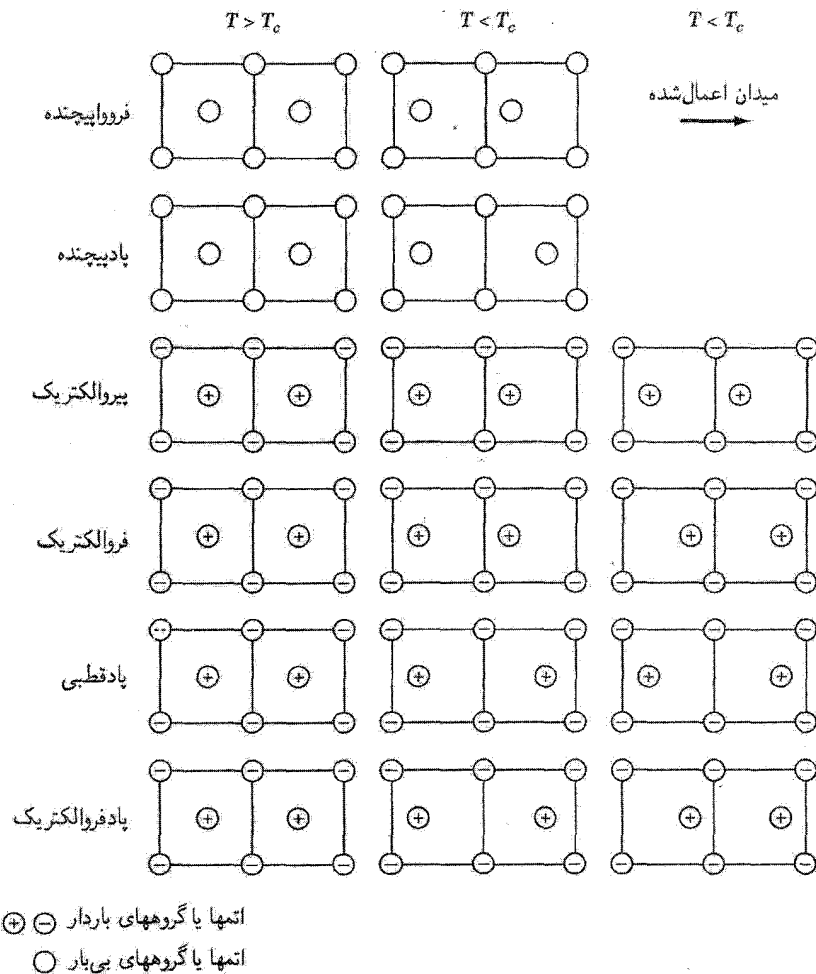
شکل ۱۷. تابع انرژی آزاد لاندائو برحسب T^2 (قطبیدگی) در گذار مرتبه اول، در دماهای مشخص. در T_c تابع لاندائو همان‌گونه که نشان داده شده است، در $P = 0$ و در P ی متناهی کمینه‌هایی برابر دارد. برای T کمتر از T_c کمینه مطلق در مقادیر بزرگتر P است؛ هنگامی که T از T_c می‌گذرد، یک تغییر ناپیوسته در مکان کمینه مطلق وجود دارد. پیکانها نشانگر کمینه‌ها هستند.



شکل ۱۸. مقادیر محاسبه‌شده قطبیدگی خودبه‌خودی به صورت تابعی از دما، با پارامترهایی مانند پارامترهای باریم تیتانات.

پادفروالکتریسیته

جابه‌جایی فروالکتریکی تنها نوع ناپایداری نیست که ممکن است در بلورهای دی‌الکتریک به وجود آید. تغییر شکلهای دیگری نیز، مانند شکل ۱۹ رخ می‌دهند. این تغییر شکلهای، حتی اگر منجر به قطبیدگی خودبه‌خودی نشود، ممکن است با تغییراتی در ثابت دی‌الکتریک همراه باشد. یک نوع تغییر شکل پادفروالکتریک نامیده می‌شود و دارای خطوط مجاور متشکل از یونهایست، که در جهت‌های مخالف جابه‌جا شده‌اند. معلوم شده است که ساختار پرووسکیت مستعد پذیرش بسیاری از انواع تغییر شکلهایست، که غالباً اختلاف انرژی آنها کوچک است. نمودارهای فاز دستگانه‌های مختلف پرووسکیت، مانند

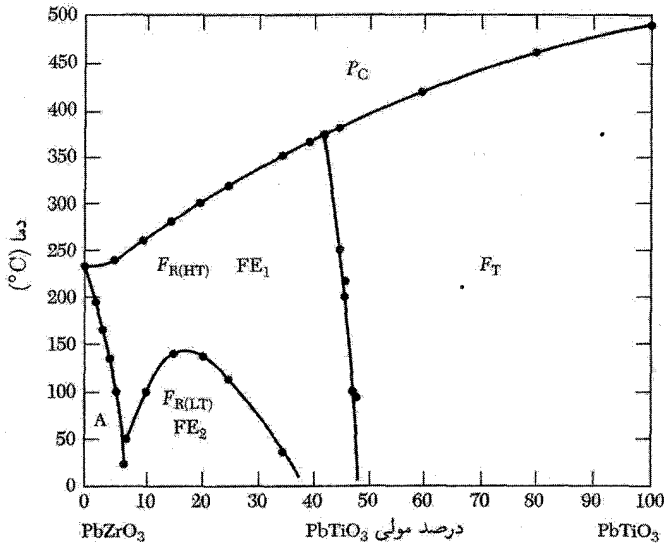


شکل ۱۹. نمایش طرحواری انواع بنيادی گذارهای فاز ساختاری از نمونه نوعی با تقارن مرکزی.

دستگاه $PbZrO_3 - PbTiO_3$ ، گذارهای بين حالتهاي پارا، فرو، و پادفروالکتریک را نشان می دهند (شکل ۲۰). چندین بلور که تصور می رود حالت غيرقطبی منظم دارند در جدول ۳ آورده شده اند.

حوزه های فروالکتریک

یک بلور فروالکتریک (مانند باریم تیتانات در فاز چهارگوشی) در نظر بگیريد که در آن قطبیدگی خودبه خودی ممکن است به سمت بالا یا پایین محور c بلور باشد. بلور فروالکتریک عموماً شامل ناحیه هایی به نام حوزه است



شکل ۲۰. فازهای فروالکتریک F ، پادفروالکتریک A ، و پارالکتریک P ی دستگاه محلول جامد زیرکونات سرب-تیتانات سرب. زیر شاخص T نشانگر فاز چهارگوش؛ C فاز مکعبی؛ R فاز لوزی وجه که از این فازها شکلهای دمای بالا (HT) و دمای پایین (LT) وجود دارند. در نزدیکی مرزهای فاز لوزی وجه-چهارگوش ضرایب جفت‌شدگی پیزوالکتریک بسیار بزرگ را می‌توان یافت.

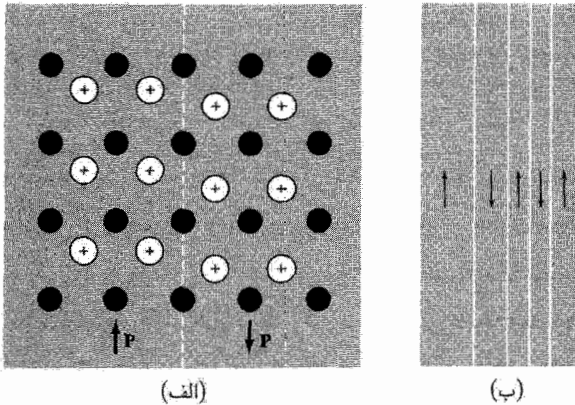
که درون هریک از آنها قطبیدگی در یک جهت است، ولی قطبیدگی در حوزه‌های مجاور در جهتهای متفاوت است. در شکل ۲۱ قطبیدگی در جهتهای مخالف است. قطبیدگی کل به اختلاف حجم حوزه‌های جهت‌یافته به سوی بالا و پایین بستگی دارد. هنگامی که حجم حوزه‌های در جهت مخالف برابر باشند، با اندازه‌گیری بار روی الکترودهایی که دو انتهای بلور را می‌پوشانند، کل بلور به صورت غیرقطبیده ظاهر می‌شود. گشتاور دو قطبی کل بلور می‌تواند در اثر حرکت دیوارهای بین حوزه‌ها یا در اثر هسته‌بندی حوزه‌های جدید تغییر کند. شکل ۲۲ رشته‌ای از فوتومیکرون‌گاشت تک‌بلور تیتانات باریم در میدان الکتریکی عمود بر صفحه عکسها و موازی با محور چهارگوشی را نشان می‌دهد. منحنیهای بسته مرزهای بین حوزه‌هایی‌اند که به سوی داخل و خارج صفحه عکسها قطبی شده‌اند. هنگامی که شدت میدان الکتریکی تغییر می‌کند، اندازه و شکل مرز حوزه‌ها تغییر می‌کند.

پیزوالکترسیسته

همه بلورهایی که در حالت فروالکتریک‌اند پیزوالکتریک نیز هستند: تنش Z که بر بلور اعمال می‌شود قطبیدگی الکتریکی را تغییر می‌دهد (شکل ۲۳). به همین ترتیب، اعمال میدان الکتریکی E بر بلور باعث کرنش بلور می‌شود. در نمادگذاری یک‌بعدی طرحوار، معادلات پیزوالکتریک به صورت زیرند

جدول ۳. بلورهای یادفروالکتریک

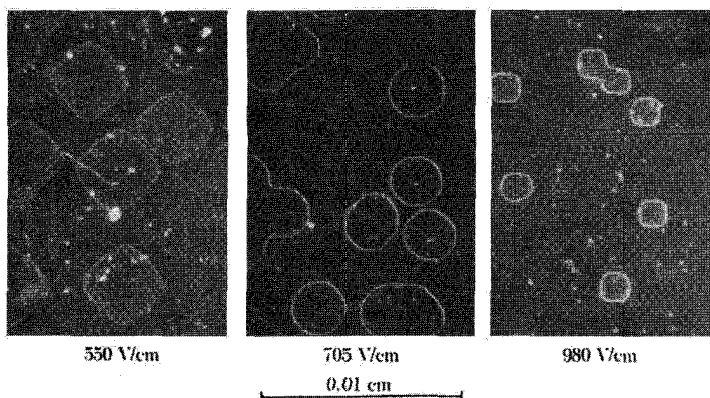
بلور	پادفروالکتریک برحسب K	دمای گذار به حالت
WO_2		۱۰۱۰
$NaNbO_3$		۷۹۳, ۹۱۱
$PbZrO_3$		۵۰۶
$PbHfO_3$		۴۸۸
$NH_4H_2PO_4$		۱۴۸
$ND_4D_2PO_4$		۲۴۲
$NH_4H_2AsO_4$		۲۱۶
$ND_4D_2AsO_4$		۳۰۴
$(NH_4)_2H_3IO_6$		۲۵۴



شکل ۲۱. (الف) ترسیم طرحوار جابه‌جاییهای اتمی در هر طرف مرز بین حوزه‌هایی که در بلور فروالکتریک در جهت‌های مخالف قطبی شده‌اند؛ (ب) نمای یک ساختار حوزه‌ای که نشانگر مرزهای 180° بین حوزه‌های قطبی شده در جهت‌های مخالف است.

$$(CGS) \quad P = Zd + E\chi; \quad e = Zs + Ed \quad (۴۵)$$

که در آن P قطبیدگی، Z تنش، d ثابت کرنش پیزوالکتریک، E میدان الکتریکی، χ پذیرفتاری دی‌الکتریک، کرنش کشسان، و s ثابت تن‌دهی کشسانی است. برای به‌دست آوردن (۴۵) در SI، χ را با $\epsilon_0 \chi$ تعویض



شکل ۲۲. حوزه‌های فروالکتريک روی وجه تک‌بلوری از یاریم تیتانات. این وجه عمود بر محور چهارگوشی یا C است. با افزایش شدت میدان الکتریکی موازی با این محور از ۵۵۰ V/cm به ۹۸۰ V/cm، قطبیدگی کل بلور، که با حجم حوزه‌ها برآورد می‌شود، به‌طور قابل ملاحظه‌ای زیاد می‌شود. مرزهای حوزه‌ها را می‌توان با حکاکی روی سطح بلور در یک محلول اسیدی ضعیف مرئی کرد.

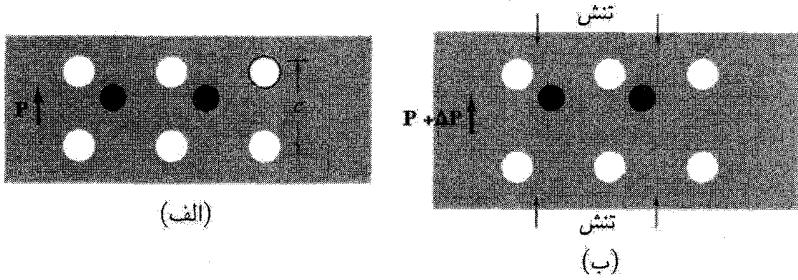
کنید. این روابط پیدایش قطبیدگی را در اثر تنش اعمال‌شده و پیدایش کرنش کشسان را در اثر میدان الکتریکی اعمال‌شده نشان می‌دهند.

بلور می‌تواند بدون فروالکتريک بودن پیزوالکتريک باشد؛ یک مثال طرحوار از چنین ساختاری در شکل ۲۴ ارائه شده است. کوارتز پیزوالکتريک است، ولی فروالکتريک نیست؛ یاریم تیتانات هر دو ویژگی را داراست. مرتبه بزرگی، در کوارتز 10^{-7} cm/stV و در یاریم تیتانات 10^{-5} cm/stV است. تعریف عمومی ثابت‌های کرنش پیزوالکتريک به صورت زیر است

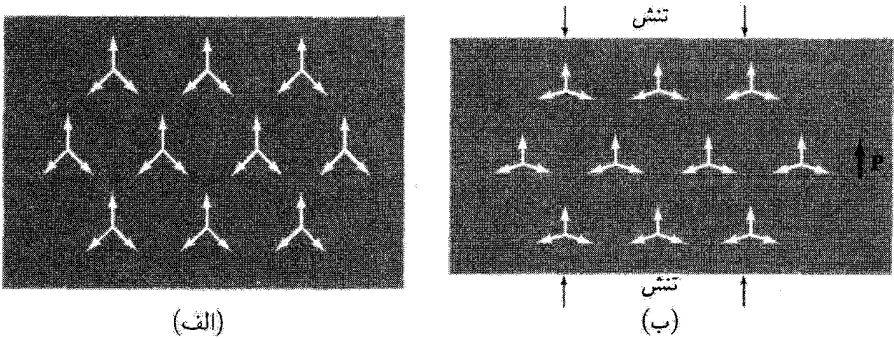
$$d_{ik} = (\partial e_k / \partial E_i)_Z \quad (46)$$

که در آن $i \equiv x, y, z$ و $k \equiv xx, yy, zz, yz, zx, xy$. برای تبدیل مقادیر d_{ik} از m/V به cm/stV آنها را در $10^4 \times 3$ ضرب کنید.

دستگاه سرب زیرکونات-سرب تیتانات (موسوم به دستگاه PZT)، شکل ۲۰، به‌طور گسترده‌ای به شکل چندبلوری (سرامیکی) با ترکیبات دارای جفت‌شدگی پیزوالکتريکی بسیار بالا به کار می‌روند. پلیمر مصنوعی پلی‌وینیلیدن‌فلورید (PVF₂) پیزوالکتريکی است که پنج برابر قویتر از کوارتز بلورین است. لایه‌های کشیده‌شده PVF₂ انعطاف‌پذیرند و در پزشکی به صورت تراگسیلنده‌های فراصوتی برای کنترل فشار خون و تنفس به کار می‌روند.



شکل ۲۳. (الف) بلور فروالکتریک تنش نیافته و (ب) بلور فروالکتریک تنش یافته. تنش قطبیدگی را به اندازه ΔP تغییر می دهد، که همان قطبیدگی پیزوالکتریکی القا شده است.



شکل ۲۴. (الف) بلور تنش نیافته دارای محور تقارن سه تابه است. پیکانها گشتاورهای دوقطبی را نشان می دهند؛ هر مجموعه سه تایی از پیکانها نشانگر یک گروه صفحه ای از یونهاست که با $A_1^+ B_2^-$ ، به همراه یون B_3^- در هر رأس، نشان داده می شود. مجموع سه گشتاور دوقطبی در هر رأس صفر است. (ب) هنگامی که بر بلور تنش اعمال شود، در جهت مشخص شده قطبیدگی ایجاد می شود. مجموع گشتاورهای دوقطبی حول هر رأس، دیگر صفر نیست.

چکیده

(برحسب واحدهای CGS)

- میدان الکتریکی که روی حجم نمونه میانگین گرفته می شود، میدان الکتریکی ماکروسکوپی \mathbf{E} معادلات ماکسول را تعریف می کند.
- میدان الکتریکی که در جایگاه \mathbf{r}_j اتم Z عمل می کند، میدان الکتریکی موضعی، موضعی \mathbf{E}_j است. این میدان برابر با مجموع میدانهای حاصل از تمام بارهاست و به صورت $\mathbf{E}_j(\mathbf{r}_j) = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2 + \mathbf{E}_3$ موضعی \mathbf{E} گروه بندی می شود. در این رابطه فقط \mathbf{E}_3 درون هر ریخته به سرعت تغییر می کند. در اینجا:

$$\mathbf{E}_0 = \text{میدان الکتریکی خارجی؛}$$

$\mathbf{E}_1 =$ میدان واقطبیذگی وابسته به مرز نمونه؛

$\mathbf{E}_2 =$ میدان ناشی از قطبیذگی در خارج کره‌ای به مرکز \mathbf{r}_j ؛

$\mathbf{E}_3(\mathbf{r}_j) =$ میدان ناشی از همه اتمهای داخل کره در نقطه \mathbf{r}_j .

• میدان ماکروسکوپی \mathbf{E} در معادلات ماکسول برابر با $\mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_0$ است که، در حالت کلی، با $\mathbf{E}(\mathbf{r}_j)$ موضعی \mathbf{E} برابر نیست.

• میدان واقطبیذگی در بیضیوار برابر است با $E_{\lambda\mu} = -N_{\mu\nu}P_\nu$ که در آن $N_{\mu\nu}$ تانسور واقطبیذگی است؛ واقطبیذگی P گشتاور دوقطبی در واحد حجم است. در کره $N = 4\pi/3$ است.

• میدان لورنتس برابر است با $\mathbf{E}_2 = 4\pi\mathbf{P}/3$.

• قطبش‌پذیری، α ، اتم برحسب میدان الکتریکی موضعی به صورت موضعی $\mathbf{p} = \alpha\mathbf{E}$ تعریف می‌شود.

• پذیرفتاری دی‌الکتریک χ و ثابت دی‌الکتریک ϵ برحسب میدان الکتریکی ماکروسکوپی \mathbf{E} به صورت

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = \epsilon\mathbf{E} = (1 + 4\pi\chi)\mathbf{E}$$

• یک اتم در جایگاه با تقارن مکعبی دارای $\mathbf{E} + (4\pi/3)\mathbf{P}$ موضعی \mathbf{E} است و در رابطه کلاؤسیوس-موسوتی رابطه (۲۴) صدق می‌کند.

مسائل

۱. قطبش‌پذیری هیدروژن اتمی. مدل نیمه کلاسیکی از حالت پایه اتم هیدروژن در میدان الکتریکی

عمود بر صفحه مدار (شکل ۲۵) را در نظر بگیرید و نشان دهید که برای این مدل، $\alpha = a_H^3$ که در

آن شعاع مدار مختل نشده است. گوشزد: اگر میدان اعمال شده در جهت x باشد، در این صورت

مؤلفه x میدان هسته در موقعیت جابه‌جاشده مدار الکترون باید برابر با میدان اعمال شده باشد. نتیجه

صحیح مکانیک کوانتومی به نسبت $\frac{1}{3}$ از این مقدار بزرگتر است. (در اینجا صحبت از α در بسط

$\alpha = \alpha_0 + \alpha_1 E + \dots$ است.) فرض می‌کنیم $x \ll a_H$. در این مدل می‌توان α را نیز محاسبه کرد.

۲. قطبش‌پذیری کره رسانا. نشان دهید که قطبش‌پذیری یک کره فلزی رسانا به شعاع a برابر است با

$\alpha = a^3$. با توجه به اینکه در داخل کره $E = 0$ و با استفاده از ضریب واقطبیذگی $4\pi/3$ برای کره

(شکل ۲۶) این نتیجه به آسانی به دست می‌آید. مرتبه بزرگی مقادیر α حاصل از این نتیجه در حدود

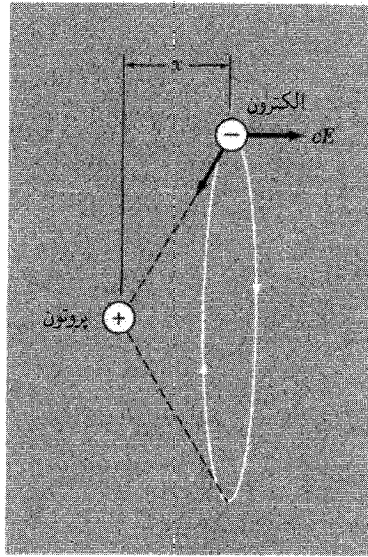
قطبش‌پذیری مشاهده شده اتمهاست. ثابت دی‌الکتریک شبکه‌ای با N کره رسانا در واحد حجم، برای

$Na^3 \ll 1$ ، برابر است با $\epsilon = 1 + 4\pi N a^3$. متناسب بودن α با توان سوم شعاع یونی پیشنهاد شده در

مورد یونهای هالوزن و قلیایی کاملاً صادق است. برای حل مسئله در SI، برای ضریب واقطبیذگی عدد

$\frac{1}{3}$ را به‌کار برید.

۳. اثر گاف هوا. اثر گاف هوا (شکل ۲۷) را، که بین صفحات خازن و دی‌الکتریک قرار دارد، روی



شکل ۲۵. الکترون در مداری دایره‌ای به شعاع a_H با اعمال میدان الکتریکی E در جهت $-x$ به اندازه مسافت x جابه‌جا می‌شود. نیروی ناشی از هسته روی الکترون در CGS برابر e^2/a_H^2 و در SI برابر با $e^2/4\pi\epsilon_0 a_H^2$ است. در این مسئله فرض می‌شود $x \ll a_H$.

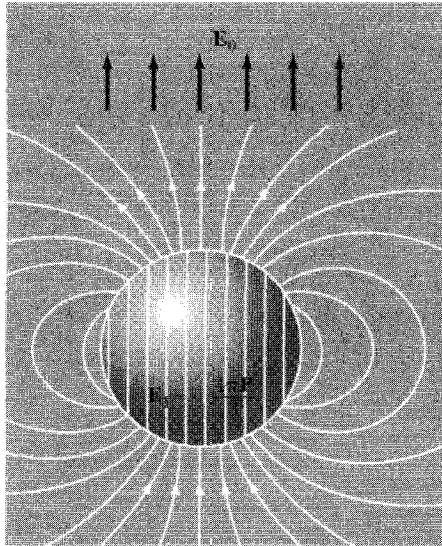
اندازه‌گیریهای ثابتهای دی‌الکتریک بزرگ مورد بحث قرار دهید. اگر ضخامت این گاف هوا 10^{-3} برابر ضخامت کل باشد، بزرگترین ثابت دی‌الکتریک ظاهری ممکن چقدر است؟ وجود گافهای هوا می‌تواند به‌طور جدی اندازه‌گیری ثابتهای دی‌الکتریک بزرگ را مختل سازد.

۴. **قطبیدگی فصل مشترک.** نشان دهید که خازنی با صفحات موازی که از دو لایه موازی تشکیل شده است و از این لایه‌ها یکی با ثابت دی‌الکتریک ϵ ، رسانندگی صفر، و ضخامت d و دیگری با $\epsilon = \infty$ برای راحتی، رسانندگی متناهی σ ، و ضخامت qd است، چنان رفتار می‌کند که گویی فضای بین صفحات خازن با دی‌الکتریک همگنی با ثابت دی‌الکتریک زیر پر شده باشد:

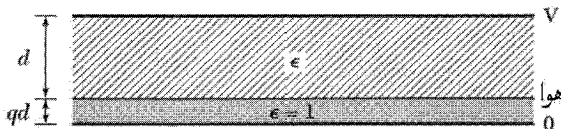
$$\epsilon_{\text{eff}} = \frac{\epsilon(1+q)}{1 - (i\omega q/4\pi\sigma)}$$

که در آن ω بسامد زاویه‌ای است. گاهی مقادیر ϵ_{eff} به بزرگی 10^4 یا 10^5 یافت می‌شوند که عمدتاً از این سازوکار ماکسول-واگنر ناشی می‌شوند، ولی این مقادیر بزرگ همواره با اتلافهای ac زیادی همراه‌اند.

۵. **قطبیدگی کره.** کره‌ای با ثابت دی‌الکتریک ϵ در میدان الکتریکی خارجی یکنواخت E قرار گرفته است. (الف) میانگین حجمی میدان الکتریکی E در این کره چیست؟ (ب) نشان دهید که قطبیدگی در



شکل ۲۶. میدان کل در داخل کره رسانا صفر است. اگر میدان خارجی E_0 اعمال شود، میدان ناشی از بارهای سطحی روی کره باید درست E_0 را حذف کند. بنابراین، باید در داخل کره داشته باشیم $E_0 + E_1 = 0$ ولی E_1 را می‌توان با میدان واقطبی‌دگی $-4\pi P/3$ کره‌ای که به‌طور یکنواخت با قطبی‌دگی P قطبی شده است شبیه‌سازی کرد. P را به E_0 مربوط کنید و گشتاور دوقطبی P ی کره را حساب کنید. در SI میدان واقطبی‌دگی به صورت $-P/3\epsilon_0$ است.



شکل ۲۷. یک گاف هوا به ضخامت qd به‌طور سری در خازنی با تیغه‌ی الکتریک به ضخامت d قرار دارد.

این کره برابر است با $P = \chi E_0 / [1 + (4\pi\chi/3)]$ ، که در آن $\chi = (\epsilon - 1)/4\pi$. راهنمایی: در این مسئله نیازی به محاسبه‌ی موضعی E نیست؛ در واقع انجام‌دادنش ممکن است باعث اشتباه شود. زیرا ϵ و χ به گونه‌ای تعریف می‌شوند که $P = \chi E$ شرط می‌کنیم که E_0 با وارد کردن کره نباید تغییر کند. با قرار دادن بارهای مثبت روی صفحه‌ی نازکی از عایق و بارهای منفی روی صفحه‌ای در مقابل آن می‌توان E_0 ثابتی ایجاد کرد. اگر این صفحات همیشه دور از کره باشند، میدان ناشی از صفحات هنگامی که کره بین آنها قرار می‌گیرد بدون تغییر باقی می‌ماند. نتایج بالا در CGS است.

۶. معیار فروالکتریک برای آنها. دستگاهی از دو اتم خنثی را در نظر بگیرید، که در فاصله‌ی ثابت a از هم

قرار دارند و هر اتم دارای قطبش‌پذیری α است. رابطه بین a و α را برای اینکه چنین دستگاهی فروالکتریک باشد پیدا کنید. راهنمایی: میدان دوقطبی در طول محور دوقطبی بزرگترین مقدار خود را داراست.

۷. قطبیدگی اشباعی در نقطه کوری. در گذار مرتبه اول، شرط تعادل (۴۳) با مساوی قرار دادن T با T_c معادله‌ای برای قطبیدگی $P_s(T_c)$ ارائه می‌دهد. شرط دیگر در نقطه کوری آن است که $\hat{F}(P_s, T_c) = \hat{F}(\circ, T_c)$. (الف) با ترکیب این دو شرط نشان دهید که $P_s(T_c) = 3|g_4|/4g_6$. (ب) با استفاده از این نتیجه نشان دهید که $T_c = T_0 + 3g_4^2/16g_6$.

۸. ثابت دی‌الکتریک در زیر دمای گذار. برحسب پارامترهای موجود در بسط انرژی آزاد لانداؤ، نشان دهید که برای گذار فاز مرتبه دوم، ثابت دی‌الکتریک در زیر دمای گذار برابر است با:

$$\epsilon = 1 + \frac{4\pi\Delta P}{E} = 1 + \frac{2\pi}{\gamma(T_c - T)}$$

این نتیجه را می‌توان با رابطه (۴۴) در بالای دمای گذار مقایسه کرد.

۹. مدهای نرم و تبدیلیهای شبکه. یک شبکه خطی تک‌اتمی با ثابت شبکه a رسم کنید. (الف) برای نشان دادن جهت جابه‌جایی آنها در زمان معین، که از یک فونون طولی با بردار موج واقع در مرز منطقه ناشی می‌شود، به هر یک از شش اتم برداری بیفزایید. (ب) اگر این فوتون مرز منطقه‌ای به هنگام سرد شدن بلور و گذار از T_c ناپایدار ($\omega \rightarrow 0$) شود، ساختار بلوری حاصل را رسم کنید. (ج) جنبه‌های اساسی رابطه پاشیدگی فونونهای طولی را برای شبکه تک‌اتمی در T خیلی بالاتر از T_c و در $T = T_c$ در یک نمودار رسم کنید. به این نمودار همین اطلاعات را بر فونونهای موجود در ساختار جدید در T خیلی پایینتر از T_c اضافه کنید.

۱۰. آرایه خطی فروالکتریک. خطی از اتمهای با قطبش‌پذیری α و فاصله a در نظر بگیرید. نشان دهید که اگر $\alpha \geq a^3/4 \sum n^{-3}$ ، این آرایه می‌تواند به طور خودبه‌خودی قطبی شود. در این رابطه جمع‌زنی روی تمامی اعداد درست مثبت است و در جدولها به صورت $1, 2, 3, \dots$ داده می‌شود.

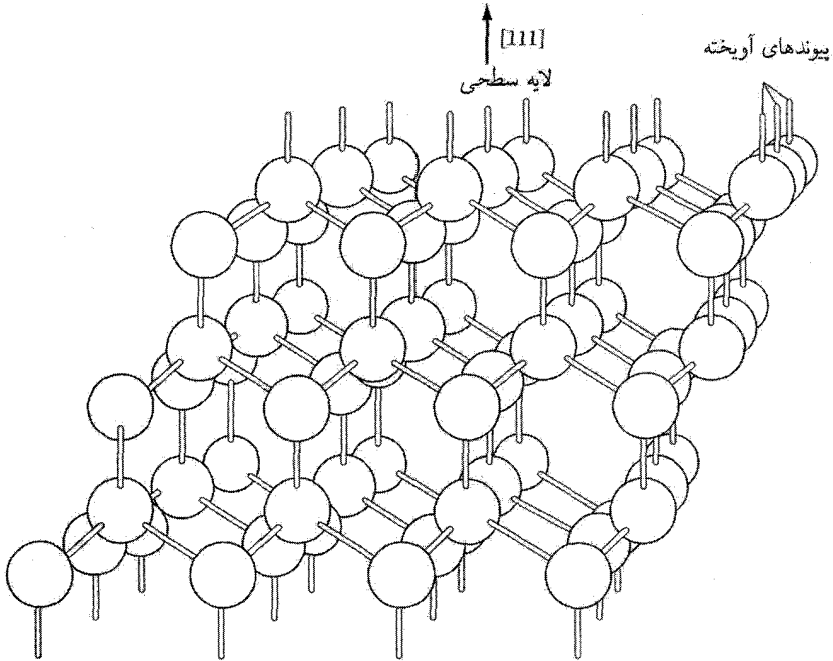
فیزیک سطح و فصل مشترک

بازسازی و واهلش

سطح جامد بلورین در خلأ معمولاً به صورت چند (تقریباً سه) لایه اتمی بیرونی جامد تعریف می‌شود، که با لایه‌های درونی ماده تفاوت عمده دارند. سطح ممکن است کاملاً تمیز باشد یا اتمهای خارجی بر آن رسوب کرده یا در آن وارد شده باشند. توده بلور را بستر می‌گویند.

اگر سطح تمیز باشد، بالاترین لایه ممکن است بازسازی شده یا گاهی بازسازی نشده باشد. ترتیب اتمی سطوح بازسازی نشده با ترتیب اتمی ماده حجیم یکسان است با این تفاوت که در بالاترین لایه، تغییر فاصله درون لایه‌ای (موسوم به واهلش چند لایه‌ای) رخ می‌دهد.

کوتاه شدن فاصله درون لایه‌ای بین لایه اول و دوم اتمها نسبت به لایه‌های بعدی در ماده حجیم معمولاً پدیده غالب است. سطح را می‌توان حد واسط بین مولکول دو اتمی و ساختار ماده حجیم تصور کرد. از آنجا که فواصل بین اتمی در مولکولهای دو اتمی بسیار کوتاهتر از فاصله‌های متناظر در ماده حجیم



شکل ۱. پیوندهای آویخته از صفحه (۱۱۱) در ساختار مکعبی الماسی با پیوند کووالانسی

است، واهلش سطح منطقی است. این موضوع را می‌توان در تقابل با بازسازی، که در آن واهلش آنها یاخته‌های بسیط سطحی جدیدی به وجود می‌آورند، دانست. در واهلش، آنها ساختار بلوری خود را در صفحه سطح به گونه‌ای که در حجم داشته‌اند (به صورت تصویر سطحی یاخته سه بعدی) حفظ می‌کنند؛ با این تفاوت که تنها فاصله‌ها تغییر می‌کنند.

گاهی در فلزات، ولی اغلب در غیرفلزات، اتمهای لایه سطحی آبرساختارهایی را تشکیل می‌دهند که در آنها اتمهای موجود در لایه با اتمهای موجود در لایه‌های متناظر در بستر در تناظر نیستند. این وضعیت بازسازی سطح است، که می‌تواند پیامدی از بازترتیب پیوندهای شکسته شده کووالانسی یا یونی در سطح باشد. اتمهای سطح در این شرایط به صورت ردیفهایی تجمع می‌کنند که فواصل آنها متناوباً بزرگتر و کوچکتر از فاصله‌ها در ماده حجیم است. یعنی برای برخی از بلورهایی که توسط پیوندهای ظرفیتی ساخته می‌شوند، ایجاد یک سطح، پیوندهای اشباع نشده آویخته در فضا را برجای می‌گذارند (شکل ۱). اگر اتمهای همسایه به یکدیگر نزدیک شده با الکترونهاي ظرفیتی استفاده نشده خود تشکیل پیوند دهند، ممکن است انرژی پایین بیاید. جابه‌جاییهای اتمی می‌توانند به بزرگی 5\AA باشند.

بازسازی الزاماً نیازی به تشکیل آترساختار ندارد. برای مثال، روی سطحهای (۱۱۰) GaAs چرخش پیوند Ga-As گروه نقطه‌ای را به هم نمی‌زند. عامل محرک، انتقال الکترون از Ga به As است، که پیوندهای آویخته As را برمی‌کند پیوندهای آویخته Ga را تهی می‌سازد.

سطوح صفحات نامگذاری شده با شاخصهای بالا را می‌توان از صفحات با شاخصهای پایین که از نظر ارتفاع با پله‌های یک (یا دو) اتمی از هم جدا هستند، بنا کرد. چنین ترتیبهای پله‌پله‌ای در تبخیر و واجذبی مهم‌اند، زیرا انرژی وابسته به اتمها در پله‌ها و پیچ پله‌ها غالباً پایین است. فعالیت شیمیایی چنین جایگاههایی ممکن است زیاد باشد. وجود آرایه‌های دوره‌ای در پله‌ها را می‌توان توسط باریکه‌های دوتایی و سه‌تایی پراش در آزمایشهای LEED، که در ادامه خواهد آمد، مشاهده کرد.

بلورنگاری سطح

ساختار سطح عموماً تنها در دو بعد، دوره‌ای است. ساختار سطح ممکن است ساختار ماده خارجی رسوب کرده بر بستر یا رویه خارجی خود بستر باشد. در فصل ۱ واژه شبکه براوه را برای آرایه‌ای از نقاط معادل در دو یا سه بعد، یعنی، برای ساختارهای دو دوره‌ای یا سه دوره‌ای، به کار بردیم. در فیزیک سطوح، معمول است که از شبکه دوبعدی صحبت کنیم. علاوه بر این، واحد سطح را می‌توان شبکه (mesh) نامید.^۱

در شکل ۷ از فصل ۱ چهار تور از ۵ تور ممکن را برای ساختار دو دوره‌ای نشان دادیم، تور پنجم تور مایل عام است، که بین بردارهای پایه شبکه، a_1 و a_2 ، رابطه تقارنی خاصی وجود ندارد. بنابراین، پنج تور متمایز عبارت‌اند از مایل، مربعی، شش‌گوش مستطیلی، و مستطیلی مرکزدار.

تور بستر موازی با سطح را به عنوان تور مرجع برای توصیف سطح به کار می‌برند. برای مثال، اگر سطح بلور بستر مکعبی، سطح (۱۱۱) باشد، تور بستر شش‌گوش است (شکل ۷ (ب) از فصل ۱ و تور سطح به این محورها مربوط می‌شود.

بردارهای c_1 و c_2 که شبکه ساختار سطح را تعریف می‌کنند، می‌توان برحسب بردارهای تور مرجع a_1 و a_2 با عمل ماتریسی P نشان داد:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad (1)$$

اگر زاویه بین بردارها در دو شبکه با هم برابر باشند، از نماد کوتاه‌نوشت منسوب به وود^۲ می‌توان استفاده

۱. در زبان انگلیسی برای شبکه دوبعدی معمولاً از واژه mesh، به جای lattice استفاده می‌شود. م.

کرد. در این نمادگذاری، که بطور گسترده‌ای به کار می‌رود، رابطه شبکه c_1 و c_2 با شبکه مرجع a_1 و a_2 به صورت زیر برحسب طول بردارهای پایه شبکه و زاویه α چرخشی نسبی دو شبکه بیان می‌شود:

$$\left(\frac{c_1}{a_1} \times \frac{c_2}{a_2} \right) R\alpha \quad (2)$$

اگر $\alpha = 0^\circ$ ، زاویه حذف می‌شود. مثالهایی از نمادگذاری وود در شکل ۲ آمده است. بردارهای تور وارون شبکه سطح را می‌توان به صورت c_1^* و c_2^* نوشت، که به صورت زیر تعریف می‌شوند

$$c_1 \cdot c_1^* = c_2 \cdot c_2^* = 1; \quad c_1 \cdot c_2^* = c_2 \cdot c_1^* = 0 \quad (3)$$

در اینجا 2π (یا ۱) نشان می‌دهد که دو قرارداد وجود دارد. تعریف (۳) را که در شکل ۳ به کار رفته است می‌توان با تعریف بردارهای شبکه وارون شبکه سه دوره‌ای در فصل ۲ مقایسه کرد.

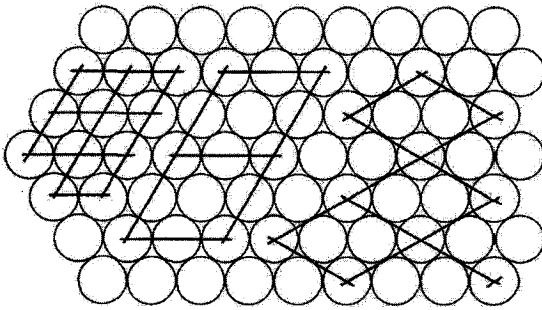
از دیدگاه سه بعدی، نقاط تور وارون یک تور دو دوره‌ای را می‌توان به صورت میله‌هایی تصور کرد. این میله‌ها گستره نامتناهی دارند، بر صفحه سطح عمودند، و از نقاط تور وارون عبور می‌کنند. برای درک بهتر می‌توان تصور کرد که میله‌ها توسط یک شبکه سه دوره‌ای تولید شده‌اند، که در امتداد یکی از محورهایش به طور نامحدود گسترش یافته است. در نتیجه نقاط شبکه وارون در راستای این محور به یکدیگر نزدیکتر می‌شوند و در حد، تشکیل میله می‌دهند.

سودمندی مفهوم میله‌ای از مبنای کره اولد، که در شکل ۸ از فصل ۲ توضیح داده شد، برمی‌آید. هر جا که کره اولد یک میله تور وارون را قطع کند، پراش رخ می‌دهد (شکل ۴). هر باریکه پراش یافته با شاخصهای hkl مربوط به بردار تور وارونی که باریکه را می‌سازد نامگذاری می‌شود:

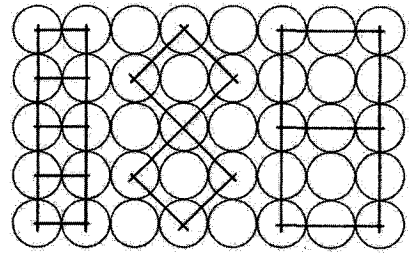
$$g = hc_1^* + kc_2^* \quad (4)$$

پراش الکترون کم انرژی^۱ (LEED) در شکل ۵ نشان داده شده است. انرژی الکترون نوعاً در گستره $10^1 - 10^2$ eV است. با چنین ترتیبی، دایسون و گرمر در سال ۱۹۲۷ طبیعت موجی الکترون را کشف کردند. یک نقش تجربی در شکل ۵ نشان داده شده است.

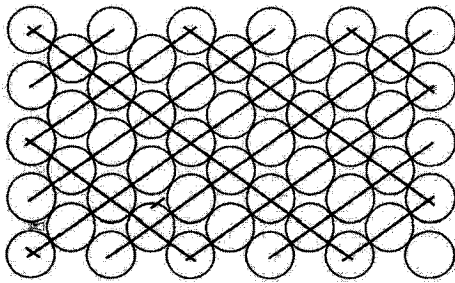
پراش بازتابی الکترون پراثری^۲ در روش RHEED باریکه‌ای از الکترونها پراثری روی سطحی از بلور به طور خراشان فرود می‌آید. با تنظیم زاویه فرود می‌توان ترتیبی داد که مؤلفه عمودی بردار موج فرودی بسیار کوچک باشد، این کار نفوذ باریکه الکترونی را کمینه و تأثیر سطح بلور را تقویت می‌کند.



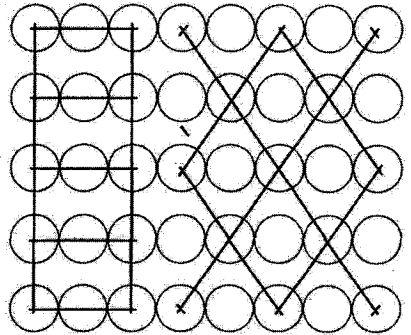
$p(1 \times 1)$ $p(2 \times 2)$ $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$
 fcc(111), hcp(0001)
 (الف)



$p(1 \times 1)$ $c(2 \times 2)$ $p(2 \times 2)$
 fcc(100), bcc(100)
 (ب)



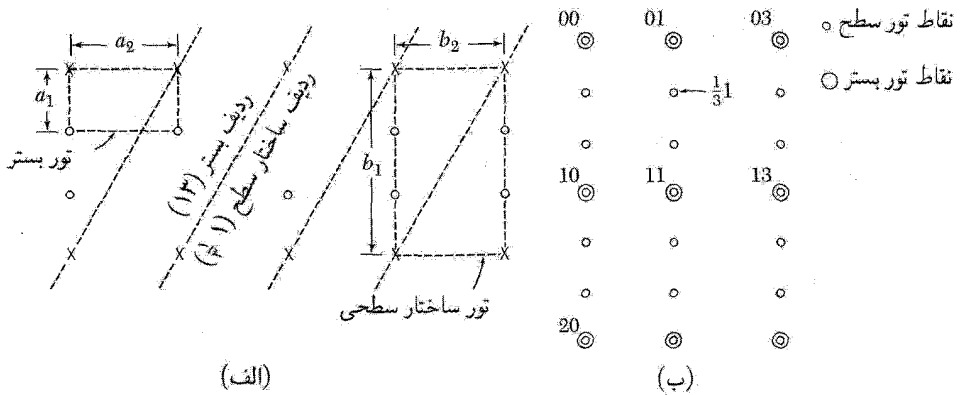
$p(2 \times 1)$
 bcc(110)
 (ج)



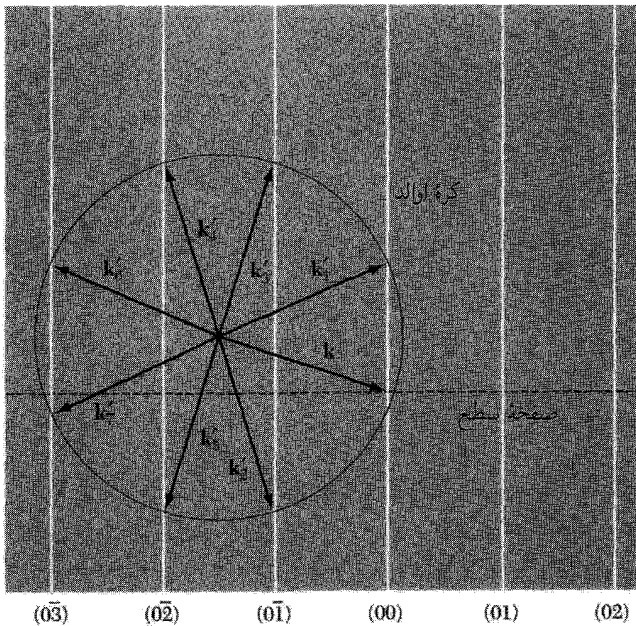
$p(2 \times 1)$ $c(2 \times 2)$
 fcc(110)
 (د)

شکل ۲. تورهای سطحی اتمهای جذب شده. دایره‌ها اتمهای موجود در لایه بالایی بستر را نشان می‌دهند. در (الف) نماد fcc(۱۱۱)، به معنای رخ (۱۱۱) در ساختار fcc است. این رخ تعیین کننده تور مرجع است. خطوط لایه‌های رویی منظم را با اتمهای اضافی در تقاطع دو خط نشان می‌دهند. نقاط تقاطع نشانگر تورهای دو دوره‌ای (شبکه‌های دوبعدی) اند. نماد $p(1 \times 1)$ در (الف) یک واحد شبکه بسیط است که پایه‌هایش مشابه با پایه‌های تور مرجع است. در (ب) واحد شبکه $c(2 \times 2)$ یک شبکه مرکزدار با بردارهای پایه‌ای به طول دو برابر بردارهای تور مرجع است. جذب سطحی اتمی روی فلزات اغلب درون آن جایگاههای سطحی (جایگاههای توخالی) رخ می‌دهد که تعداد اتمهای همسایه‌های اولشان روی بستر بیشینه باشد.

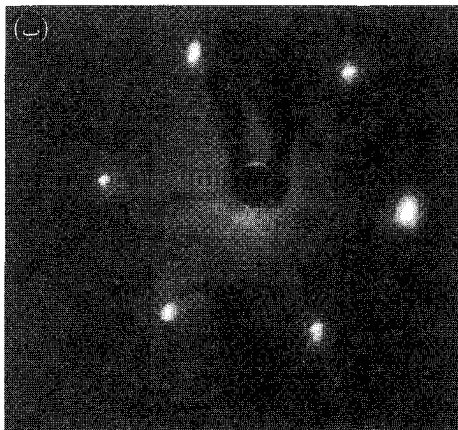
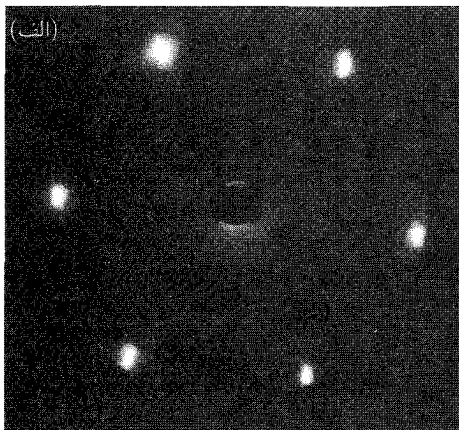
شعاع k ی کره اوالد برای الکترونهاي 10^0 keV در حدود 10^3 \AA^{-1} است، که از کوتاهاين بردار شبکه وارون $1 \text{ \AA}^{-1} \approx 2\pi/a$ بسیار بلندتر است. در نتیجه کره اوالد در ناحیه مرکزی پراکندگی تقریباً سطح تخت است. برای فرود خراشان محل تلاقی میله‌های تور وارون با این کره تقریباً تخت، تقریباً یک خط است. ترتیب آزمایش در شکل ۶ نشان داده شده است.



شکل ۳. نمودارهای ساختار سطحی (۱ × ۳)، (الف) فضای واقعی و (ب) فضای وارون.

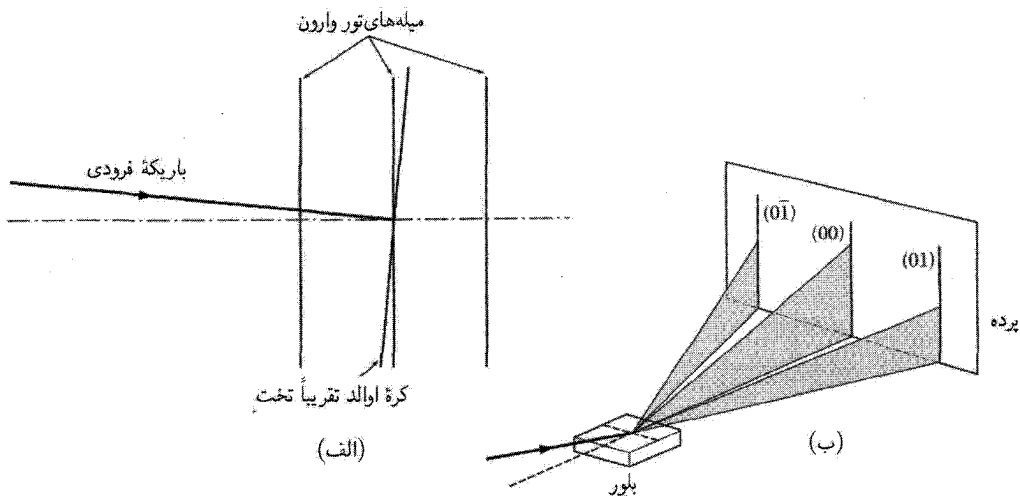


شکل ۴. مبنای کره اولاد برای پراش موج فرودی k توسط یک تور مربعی، که در آن k با یکی از محورهای تور موازی است. باریکه‌های پراکنده‌شده برگشتی در صفحه کاغذ k_x, k_y, k_z و k_x, k_y اند. باریکه‌های پراش یافته خارج از صفحه کاغذ نیز رخ می‌دهند. خطوط عمودی میله‌های تور وارون‌اند.



شکل ۵. نقشه‌های LEED از سطح بلورین Pt(۱۱۱) برای انرژیهای الکترون فرودی ۵۱ و ۶۳٫۵ الکترون ولت. زاویه پراش برای انرژی پایینتر بزرگتر است. (برگرفته از:

(G.A. Somorjai, *Chemistry in two dimensions: surfaces*, Cornell, 1981.



شکل ۶. روش RHEED. در (الف) باریکه الکترون پراثری تحت زاویه خراشان فرود بر سطح بلور به یک کره اولد با شعاع بزرگ مربوط می‌شود. این شعاع آنقدر بزرگ است که سطح کره بین میله‌های مجاور تور وارون تقریباً تخت است. تشکیل خطوط پراش روی پرده تخت در شکل (ب) نشان داده شده است.

ساختار الکترونی سطح تابع کار

تابع کار W ی سطح یکنواخت فلز به عنوان اختلاف انرژی پتانسیل الکترون بین تراز خلأ و تراز فرمی تعریف می‌شود. تراز خلأ برابر است با انرژی الکترون ساکن در نقطه‌ای بیرون از سطح و به اندازه کافی دور از آن (بیش از 10°Å از سطح) به گونه‌ای که نیروی تصویری الکتروستاتیکی بر الکترون چشم‌پوشیدنی باشد. تراز فرمی، پتانسیل الکتروشیمیایی الکترونها در فلز است.

مقادیر نوعی تابعهای کار الکترون در جدول ۱ ارائه شده است. مقدار تابع کار به سمتگیری برخی از

جدول ۱. تابعهای کار الکترون

عنصر	صفحه سطح	تابع کار، بر حسب eV
Ag	(۱۰۰)	۴٫۶۴
	(۱۱۰)	۴٫۵۲
	(۱۱۱)	۴٫۷۴
Cs	بسیلور	۲٫۱۴
Cu	(۱۰۰)	۴٫۵۹
	(۱۱۰)	۴٫۴۸
	(۱۱۱)	۴٫۹۸
Ge	(۱۱۱)	۴٫۸۰
Ni	(۱۰۰)	۵٫۲۲
	(۱۱۰)	۵٫۰۴
	(۱۱۱)	۵٫۳۵
W	(۱۰۰)	۴٫۶۳
	(۱۱۰)	۵٫۲۵
	(۱۱۱)	۴٫۴۷

بلور که تحت تابش قرار گرفته است، بستگی دارد، زیرا استحکام لایه دوگانه الکتریکی در سطح به غلظت مغزهای یونی مثبت سطح وابسته است. لایه دوگانه به این دلیل به وجود می‌آید که یونهای سطحی در محیط نامتقارنی قرار دارند، از یک سو با خلأ (یا لایه اتمی جذب‌شده خارجی) و از سوی دیگر با بستر در تماس‌اند.

تابع کار برابر با انرژی آستانه برای گسیل فوتوالکتریک در صفر مطلق است. اگر $\hbar\omega$ انرژی فوتون فرودی باشد، معادله اینشتین $\hbar\omega = W + T$ است، که در آن T انرژی جنبشی الکترون گسیل‌یافته و W تابع کار است.

گسیل گرمایونی

آهنگ گسیل الکترونها گرمایونی به‌طور نمایی به تابع کار بستگی دارد که به صورت زیر استخراج می‌شود. ابتدا غلظت الکترونی را در خلأ در تعادل با الکترونها داخل فلز در دمای $\tau (= k_B T)$ و پتانسیل شیمیایی μ به دست می‌آوریم. الکترونها موجود در خلأ را گاز ایده‌آل در نظر می‌گیریم، در نتیجه پتانسیل شیمیایی آنها (TP ، فصل ۵) برابر است با:

$$\mu = \mu_{\text{ext}} + \tau \log(n/n_Q) \quad (5)$$

در اینجا برای ذرات با اسپین $1/2$ داریم:

$$n_Q = \frac{2}{\pi^2} (m\tau / \hbar^2)^{3/2} \quad (6)$$

اکنون از تعریف تابع کار W داریم، $\mu_{\text{ext}} - \mu = W$. بدین ترتیب از (۵) داریم

$$n = n_Q \exp(-W/\tau) \quad (7)$$

وقتی همه الکترونها بیرون کشیده شوند، شار الکترونهايي که سطح فلز را ترک می‌کنند (TP)، فرمولهای ۹۵ و ۱۲۱ از فصل ۱۴ برابر است با شاری که از خارج بر سطح فرود می‌آید:

$$J_n = \frac{1}{4} n \bar{c} = n (\tau / 2\pi m)^{1/2} \quad (8)$$

در اینجا \bar{c} سرعت میانگین الکترونها در خلأ است. شار بار الکتریکی برابر است با eJ_n یا:

$$J_e = (\tau^2 m e / 2\pi^2 \hbar^3) \exp(-W/\tau) \quad (9)$$

که آن را معادله ریچاردسون-داشن برای گسیل گرمایونی می‌نامند.

حالت‌های سطح

در سطح آزاد نیم‌رسانا غالباً حالت‌های الکترونی مقید به سطح با انرژی‌هایی در گاف ممنوعه بین نوارهای ظرفیتی و رسانش نیم‌رسانای حجیم وجود دارند. می‌توان با در نظر گرفتن توابع موج در پیوند ضعیف یا تقریب دو مؤلفه‌ای فصل ۷، در یک بعد، برداشت خوبی از ماهیت حالت‌های سطحی به دست آورد. (توابع موج سه‌بعدی در صفحه y و z دارای ضرایب اضافی $\exp[i(k_y y + k_z z)]$ مربوط به سطح‌اند.) اگر خلا در ناحیه $x > 0$ باشد، انرژی پتانسیل الکترون را در این ناحیه می‌توان برابر با صفر گرفت:

$$U(x) = 0 \quad x > 0 \quad (10)$$

در بلور انرژی پتانسیل دارای این شکل دوره‌ای متداول است:

$$U(x) = \sum_G U_G \exp(iGx) \quad x < 0 \quad (11)$$

در یک بعد $G = n\pi/a$ که در آن n هر عدد صحیحی، از جمله صفر، است. در خلا تابع موج یک حالت سطحی مقید باید به صورت نمایی افت کند:

$$\psi_{\text{out}} = \exp(-sx) \quad x > 0 \quad (12)$$

به کمک معادله موج انرژی حالت مربوط به تراز خلا برابر است با

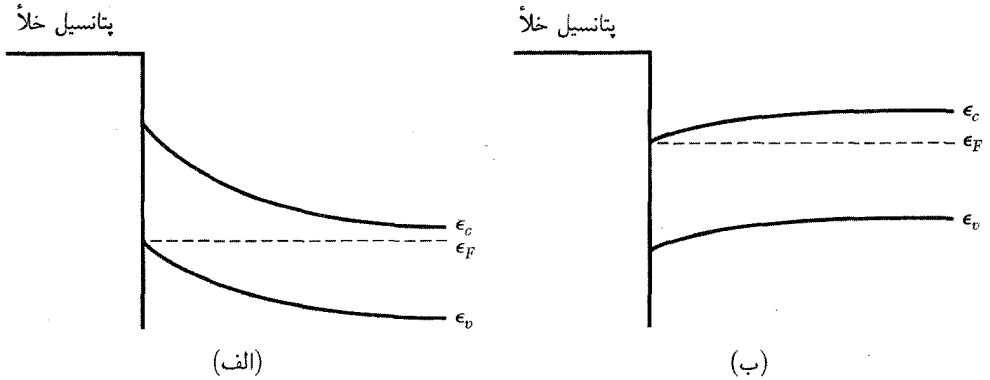
$$\epsilon = -\hbar^2 s^2 / 2m \quad (13)$$

در بلور تابع موج دو مؤلفه‌ای یک حالت مقید در مانستگی با رابطه ۴۹ از فصل ۷ برای $x < 0$ دارای شکل زیر است،

$$\psi_{\text{in}} = \exp(qx + ikx) [C(k) + C(k - G) \exp(-iGx)] \quad (14)$$

با این تفاوت که در آن ضریب اضافی $\exp(qx)$ وظیفه پیوند زدن الکترون به سطح را انجام می‌دهد. اکنون به موضوع مهمی می‌رسیم که مقادیر مجاز بردار موج k را محدود می‌سازد. اگر حالت مقید باشد، هیچ جریانی در جهت x عمود بر سطح نمی‌تواند شارش کند. این شرط در مکانیک کوانتومی در صورتی برقرار است که تابع موج را بتوان به صورت یک تابع حقیقی از x نوشت. این شرط را قبلاً تابع موج بیرونی (۱۲) برآورده کرده بود. ولی رابطه (۱۴) تنها وقتی می‌تواند یک تابع حقیقی باشد که $k = \frac{1}{2}G$ ، در نتیجه:

$$\psi_{\text{in}} = \exp(qx) \left[C \left(\frac{1}{2}G \right) \exp(-iGx/2) + C \left(-\frac{1}{2}G \right) \exp(-iGx/2) \right] \quad (15)$$



شکل ۷. خمش نواری در نزدیکی سطح نیم‌رسانا که می‌تواند یک ناحیه سطحی با رسانش بالا ارائه دهد. (الف) لایه واژگون روی نیم‌رسانای نوع n . برای خمش نشان‌داده‌شده، غلظت حفره در سطح از غلظت الکترونها داخلی بسیار بیشتر است. (ب) لایه انباشته روی نیم‌رسانای نوع n که در آن غلظت الکترونی در سطح بسیار بالاتر از غلظت الکترونی داخل است.

این تابع به شرطی حقیقی است که $C \left(-\frac{1}{\psi} G \right) = C^* \left(\frac{1}{\psi} G \right)$. بدین ترتیب k_x برای یک حالت سطح دارای مقادیر پیوسته نیست، ولی به حالت‌های مجزای وابسته به مرزهای منطقه بریلوئن محدود است. در بلور حالت رابطه (۱۵) به صورت نمایی میرا می‌شود. ثابتهای s و q با این شرط به یکدیگر مربوط می‌شوند، که ψ و $d\psi/dx$ در $x = 0$ پیوسته باشند. انرژی بستگی ϵ با حل معادله دو مؤلفه‌ای شبیه به رابطه ۴۶ از فصل ۷ تعیین می‌شود. در این ارتباط ترسیم شکل ۱۲ از فصل ۷ مفید است.

ترابرد مماسی سطح

دیدیم که ممکن است حالت‌های الکترونی مقید به سطحی با انرژیهای واقع در گاف ممنوعه بین نوارهای ظرفیتی و رسانش بلور بستر وجود داشته باشد. این حالتها ممکن است پر یا خالی باشند؛ وجودشان بر مکانیک آماری مسئله تأثیری می‌گذارد. این بدان معنی است که این حالتها باعث انتقال پتانسیل شیمیایی نسبت به لبه‌های نوار می‌شوند و در نتیجه غلظت تعادلی موضعی الکترونها و حفره‌ها را تغییر می‌دهند. از آنجا که در دستگاه در حال تعادل پتانسیل شیمیایی مستقل از مکان است، نوارهای انرژی باید جابه‌جا یا خم شوند (مطابق شکل ۷).

ضخامت و غلظت حاملها در لایه سطح را می‌توان با اعمال میدان الکتریکی عمود بر سطح تغییر داد. از اثر میدان خارجی در ترانزیستور اثر میدان نیم‌رسانای فلز-اکسید (MOSFET)^۱ استفاده می‌شود.

1. metal-oxide semiconductor field effect transistor

این ترانزیستور دارای یک الکتروود فلزی درست خارج از سطح نیمرساناست که توسط یک لایه اکسیدی عایق‌بندی شده است. ولتاژی به نام ولتاژ درجه V_g ، بین فلز و نیمرسانا اعمال می‌شود که چگالی بار سطحی در واحد مساحت n_s را مدوله می‌کند:

$$\Delta n_s = C_g \Delta V_g$$

که در آن C_g ظرفیت به ازای واحد سطح بین درجه فلزی و نیمرساناست. این لایه بار سطحی مسیر رسانشی MOSFET را تشکیل می‌دهد. رسانندگی یک لایه سطحی به طول L و پهنای W بین دو تماس الکتریکی برابر است با:

$$G = (W/L)n_s e \mu$$

که در آن μ تحرک‌پذیری حامل است. چگالی حامل n_s ، و در نتیجه رسانایی، با ولتاژ درجه کنترل می‌شود. این شیر الکترونی سه پایانه‌ای قطعه اصلی دستگاه‌های میکروالکترونیکی است. حالت‌های الکترونی که حاملها در سطح اشغال می‌کنند، در راستای عمود بر وجه مشترک، همان‌گونه که در مسئله ۲ بررسی شد، کوانتیده‌اند.

مغناطومقاومت در کانال دوبعدی

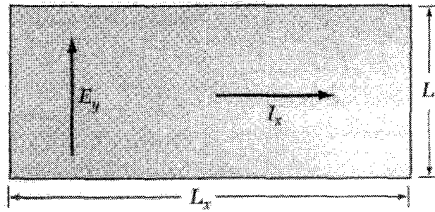
تانسور مغناطورسانندگی استاتیکی سه‌بعدی در مسئله ۹ از فصل ۶ به دست آمد. در اینجا آن نتیجه را به مورد کانال رسانشی سطحی دوبعدی در صفحه xy و میدان مغناطیسی ایستا در جهت z عمود بر لایه MOS برمی‌گردانیم. فرض می‌کنیم چگالی سطحی الکترونها $n_s = N/L^2$ باشد. رسانش سطحی به صورت حاصلضرب رسانندگی حجمی در ضخامت لایه تعریف می‌شود. چگالی جریان سطحی به صورت جریانی تعریف می‌شود، که از خطی به طول واحد در سطح می‌گذرد. بدین ترتیب، با استفاده از رابطه‌های (۶-۴۳) و (۶-۴۵)، مؤلفه‌های تانسور رسانندگی سطح برابرند با:

$$\sigma_{xx} = \frac{\sigma_0}{1 + (\omega_c \tau)^2}; \quad \sigma_{xy} = \frac{\sigma_0 \omega_c \tau}{1 + (\omega_c \tau)^2} \quad (16)$$

که در آن $\sigma_0 = n_s e^2 \tau / m$ و $\omega_c = eB/mc$ در CGS و eB/m در SI است. ادامه مطلب تنها در CGS بیان می‌شود، بجز در جایی که از واحد اهم استفاده شود.

این نتایج به‌ویژه در تقریب زمان واهلش، که در فصل ۶ استفاده شد، به کار می‌رود. اگر $\omega_c \tau \gg 1$ ، که در میدان مغناطیسی قوی و دماهای پایین برقرار است، آنگاه مؤلفه‌های رسانندگی سطحی به حدهای زیر می‌رسند

$$\sigma_{xx} = 0; \quad \sigma_{xy} = N n_{\text{rec}} |B| \quad (17)$$



شکل ۸. میدان خارجی E_y و جریان رانشی I_x در آزمایش اثر کوانتومی هال (IQHE).

حد σ_{xy} ویژگی عمومی الکترونهاى آزاد در میدانهای عمود برهم الکتریکی E_y و مغناطیسی B_z است. با این نتیجه که الکترونها در جهت x با سرعت $v_D = cE_y/B_z$ رانش می‌یابند، آغاز می‌کنیم. الکترونهاى را در نظر می‌گیریم که در چارچوب نیروی لورنتس با این سرعت در جهت x حرکت می‌کنند. بنابر نظریهٔ الکترومغناطیس در این چارچوب برای v_D فوق میدان الکتریکی $E' = -v_D B_z/c$ وجود دارد که میدان الکتریکی خارجی E_y را حذف می‌کند. از دیدگاه ناظر واقع در آزمایشگاه، هر الکترون علاوه بر مؤلفهٔ سرعتی که قبل از اعمال E_y داشته است، با سرعت v_D در جهت محور x رانش می‌کند. بدین ترتیب $j_x = \sigma_{xy} E_y = n_s e v_D = (n_s e c/B) E_y$ در نتیجه مانند رابطهٔ (۱۷) داریم

$$\sigma_{xy} = n_s e c/B \quad (18)$$

آزمایشها ولتاژ V را در جهت y و جریان I را در جهت x اندازه می‌گیرند (شکل ۸). در اینجا $I_x = j_x L_y = (n_s e c/B) (E_y L_y) = (n_s e c/B) V_y$ مقاومت هال برابر است با

$$\rho_H = V_y/I_x = B/n_s e c \quad (18 \text{ الف})$$

می‌بینیم که j_x در $E_x = 0$ می‌تواند شارش یابد، در نتیجه رسانش مؤثر j_x/E_x می‌تواند نامتناهی باشد. شگفت اینکه این حد فقط وقتی رخ می‌دهد که σ_{xx} و σ_{yy} صفرند. روابط تانسوری زیر را در نظر بگیرید

$$j_{xx} = \sigma_{xx} E_x + \sigma_{xy} E_y; \quad j_y = \sigma_{yx} E_x + \sigma_{yy} E_y \quad (19)$$

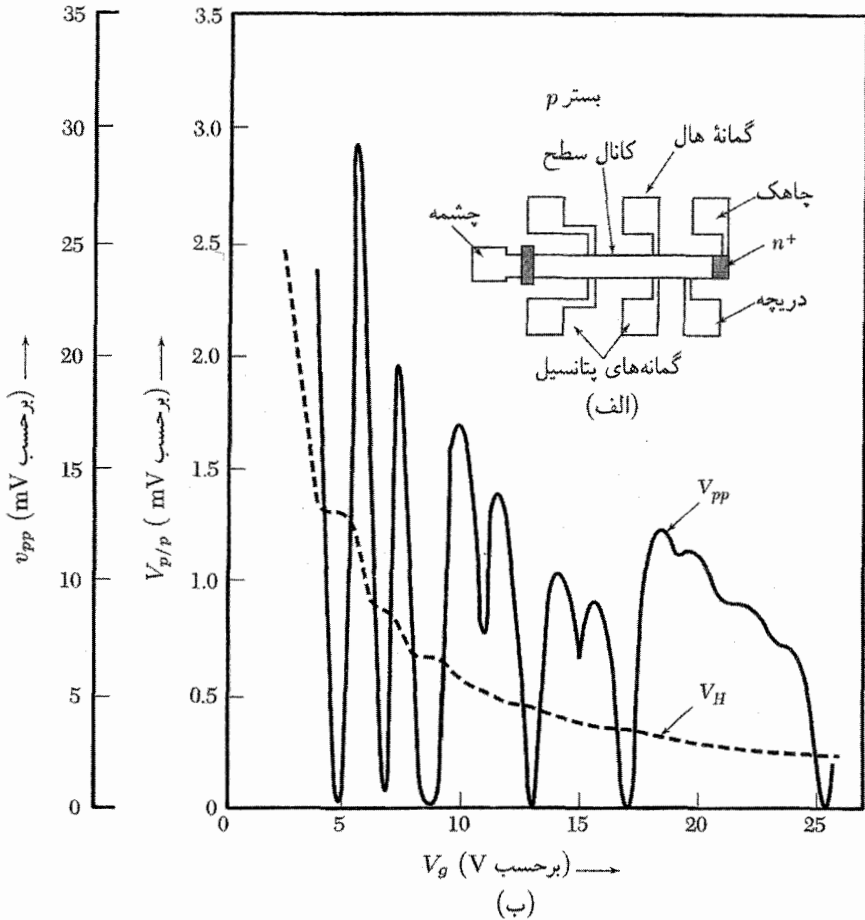
در هندسهٔ اثر هال $j_y = 0$ ، در نتیجه $E_y = (\sigma_{xy}/\sigma_{yy}) E_x$ و $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$. بنابراین

$$j_x = (\sigma_{xx} + \sigma_{xy}^2/\sigma_{yy}) E_x = \sigma(\text{eff}) E_x \quad (20)$$

و در حد $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = 0$ و رسانش مؤثر نامتناهی است.

اثر کوانتیدهٔ هال با عدد درست (IQHE)^۱

نتایج حاصل از اندازه‌گیریهای اولیه در شرایط کوانتومی دما و میدان مغناطیسی در شکل ۹ نشان داده شده است.^۲ این نتایج شایان توجه‌اند: به ازای مقادیر معینی از ولتاژ دریاچه، ولتاژ در جهت شارش جریان



شکل ۹. در اندازه‌گیریهای IQHEی اولیه، یک میدان مغناطیسی 180 kG (18 T) برونسو وجود دارد. دما 15 K است. جریان ثابت $1 \mu\text{A}$ بین چشمه و چاهک برقرار می‌شود. ولتاژهای V_H و V_{pp} برحسب ولتاژ دریاچه V_g ، که متناسب با تراز فرمی است، ترسیم شده‌اند.

1. Integral Quantized Hall Effect (IQHE)

2. K. Von Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. Phys. Rev. Lett **45**,494 (1980).

اساساً به صفر می‌گراید، گویی رسانش مؤثر نامتناهی است. علاوه بر این در ولتاژ هال در نزدیکی همین مقادیر ولتاژ درجه پلاتوهایی وجود دارند و مقادیر مقاومت ویژه هال، V_H/I_x ، در این پلاتوها دقیقاً برابر عدد درست/۲۵۸۱۳) اهم است که در آن مقدار h/e^2 برحسب اهم است.

کمینه‌های ولتاژ (IQHE)، V_{pp} ، را می‌توان بر مبنای مدلی بیان کرد، که به‌طور مبالغه‌آمیزی ساده شده است. نظریهٔ عام را بعداً ارائه خواهیم کرد. یک میدان مغناطیسی قوی اعمال می‌کنیم به گونه‌ای که $\hbar\omega_c \gg k_B T$. در این شرایط صحبت از ترازهای لاندائو که کاملاً پر یا کاملاً خالی‌اند بامعنی است. غلظت سطحی الکترونی را (که متناسب با ولتاژ درجه است) به‌گونه‌ای برمی‌گزینیم که با مجموعه مقادیری که باعث می‌شوند تراز فرمی در تراز لاندائو قرار گیرد، تنظیم شود: از رابطه‌های ۳۳ و ۳۴ از فصل ۹ داریم

$$seB_s/hc = n_s \quad (21)$$

که در آن s هر عدد درست و n_s غلظت سطحی الکترون است.

اگر شرایط بالا برآورده شود، زمان برخورد الکترون به‌طور چشمگیری زیاد می‌شود. برخوردهای کشسان از یک حالت به حالت دیگر واقع در همان تراز لاندائو امکان‌پذیر نیست، زیرا همهٔ حالت‌های نهایی ممکن با همان انرژی اشغال شده‌اند. اصل پاولی برخوردهای کشسان را ممنوع می‌سازد. برخوردهای ناکشسان به یک تراز تهی لاندائو با جذب انرژی لازم از یک فونون امکان‌پذیر است، ولی با توجه به فرض $\hbar\omega_c \gg k_B T$ تعداد بسیار اندکی از فونونهای گرمایی با انرژی بزرگتر از فاصلهٔ بین ترازهای وجود دارند.

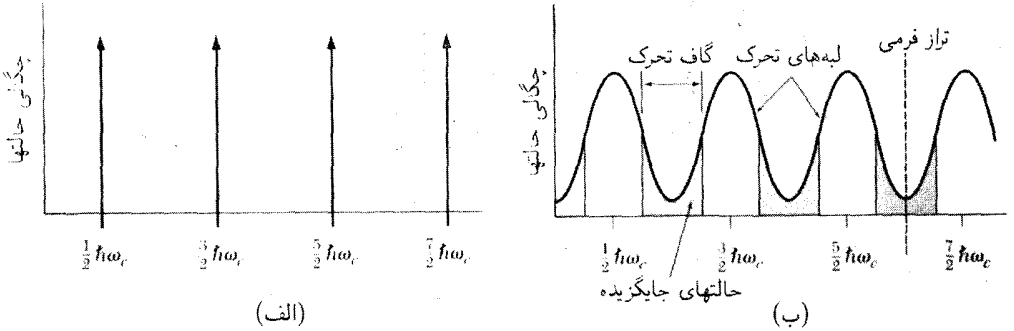
کوانتس مقاومت هال از ترکیب (۱۸ الف) و (۲۱) به‌دست می‌آید:

$$\rho_H = h/s e^2 = 2\pi/s c \alpha \quad (22)$$

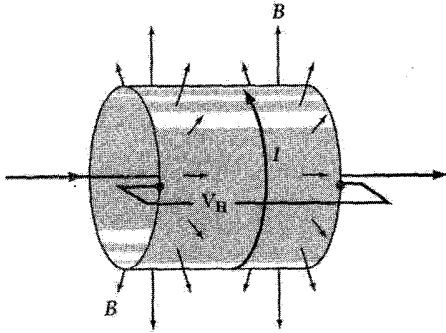
که در آن α ثابت ساختار ریز، $e^2/hc \cong 1/137$ و s عدد درست است.

IQHE در دستگاه‌های واقعی

اندازه‌گیریها (شکل ۹) حاکی از آن است که نظریهٔ بالا در مورد IQHE نظریهٔ بسیار خوبی است. خواه نیم‌رسانا دارای خلوص و تکامل بسیار بالا باشد یا نباشد، مقاومت ویژه هال دقیقاً در مقادیر $25813/s$ اهم کوانتیده است. ترازهای تیز لاندائو (شکل ۱۰ الف) در بلورهای واقعی پهن می‌شوند (شکل ۱۰ ب)، ولی این موضوع بر مقاومت ویژه هال اثر ندارد. وقوع پلاتوها در مقاومت هال که در منحنی U_H شکل ۹ پدیدار شده است، در دستگاه‌های ایده‌آل مورد انتظار نیست، زیرا ترازهای بخش پر لاندائو برای تمامی ولتاژهای درجه وجود دارند بجز ولتاژهایی که برای آنها تراز فرمی دقیقاً بر یک تراز لاندائو



شکل ۱۰. چگالی حالتها در گاز الکترونی دوبعدی در میدان مغناطیسی قوی. (الف) بلور ایده‌آل دوبعدی. (ب) بلور واقعی دوبعدی، شامل ناخالصیها و ناکامیهای دیگر.



شکل ۱۱. هندسهٔ مربوط به آزمایش تصویری لافلین. دستگاه الکترون دوبعدی به گونه‌ای خم شده که تشکیل استوانه داده است. میدان مغناطیسی قوی B عمود بر سطح استوانه بیرون زده است. جریان I ، حلقه استوانه‌ای را دور می‌زند و منجر به ولتاژ هال V_H و شار مغناطیسی کم φ می‌شود که از حلقه می‌گذرد.

منطبق است. با وجود این آزمایشها نشان می‌دهند که گستره‌ای از مقادیر V_g مقاومت دقیق هال را ارائه می‌دهند.

لافلین^۱ برای دستگاههای واقعی نتایج را به صورت گزاره‌ای از اصل عام ناوردایی پیمانه‌ای تعبیر کرد. این استدلال زیرکانه و تا حدودی یادآور کوانتاش شار در ابررسانا (فصل ۱) است.

در آزمایش تصویری لافلین، دستگاه الکترون دوبعدی به گونه‌ای خم می‌شود که استوانه‌ای تشکیل دهد (شکل ۱۱). میدان مغناطیسی قوی B از همهٔ نقاط سطح جانبی استوانه به‌طور عمودی بیرون زده است.

1. R.B. Laughlin. Phys. Rev. B **23** 5632 (1981);

همچنین مقاله‌اش را در این منبع ببینید:

McGraw-Hill year-book of science and technology, 1984, pp. 209-214

بازنگری آن را این افراد انجام داده‌اند:

H.L. Stormer and D.C. Tsui, Science **220**, 1241 (1983).

جریان I (I_x ی قبلی) دور حلقه می چرخد. میدان مغناطیسی B روی حاملهای بار اثر می کند تا ولتاژ هال V_H (V_y قبلی) عمود بر جریان و بر B ایجاد شود؛ یعنی V_H بین یک لبه از استوانه و لبه دیگر به وجود می آید. جریان چرخشی I با شار مغناطیسی کم φ همراه است که از حلقه جریان می گذرد. هدف این آزمایش تصویری یافتن رابطه ای بین I و V_H است. از رابطه الکترومغناطیسی، که I را به انرژی کل U دستگاه بدون مقاومت مربوط می سازد، شروع می کنیم:

$$\frac{\delta U}{\delta t} = -V_x I_x = \frac{I}{c} \frac{\delta \varphi}{\delta t}; \quad I = c \frac{\delta U}{\delta \varphi} \quad (23)$$

اکنون می توان مقدار I را از ورودش انرژی الکترونی δU متناظر با تغییر کم $\delta \varphi$ ی شار به دست آورد. حالت های حامل به دو رده دسته بندی می شوند:

- حالت های جایگزیده، که حول حلقه پیوسته نیستند.
- حالت های گسترده، که حول حلقه پیوسته اند.

بر اساس درک موجود از جایگزیدگی، حالت های جایگزیده گسترده نمی توانند در یک انرژی با هم وجود داشته باشند.

این دو رده حالت ها در برابر اعمال شار φ به گونه ای متفاوت پاسخ می دهند. حالت های جایگزیده در تقریب اول بی تأثیر می مانند، زیرا بخش قابل توجهی از φ را در بر نمی گیرند. در حالت جایگزیده هر تغییر در φ شبیه تبدیل پیمانه ای است، که نمی تواند بر انرژی حالت اثر بگذارد.

حالت های گسترده، φ را احاطه می کنند، و انرژی آنها ممکن است تغییر کند. در هر حال، اگر شار مغناطیسی به اندازه یک کوانتوم شار، $\delta \varphi = hc/e$ ، تغییر کند تمامی مدارهای گسترده با مدارهای قبل از افزایش کوانتوم شار مشابه خواهند بود. این استدلال شبیه استدلال مربوط به کوانتس شار در حلقه ابررساناست که در فصل ۱۰ بررسی شد، با این تفاوت که زوج کوپر $2e$ ، با e تعویض می شود.

اگر تراز فرمی درون حالت های جایگزیده شکل 10° ب قرار گیرد، همه حالت های گسترده (ترازهای لاندائو) در زیر تراز فرمی چه قبل و چه بعد از تغییر شار $\delta \varphi$ ، از الکترون پر خواهند بود. ولی در خلال این تغییر تعداد درستی از حالت ها، عموماً یکی به ازای هر تراز لاندائو، به یک لبه از استوانه وارد و از لبه مقابل خارج می شوند. این تعداد باید عدد درست باشد چرا که دستگاه قبل و بعد از تغییر شار از نظر فیزیکی یکسان است. حالت انتقال یافته ای که با یک الکترون اشغال شده باشد به هنگام انتقال، سهمی برابر با NeV_H در تغییر انرژی خواهد داشت؛ اگر N حالت اشغال شده انتقال یابند، تغییر انرژی برابر با NeV_H است.

این انتقال الکترونی تنها راهی است که دستگاه الکترونی دویعدی واکن می تواند انرژی خود را تغییر دهد. این اثر را می توان با بررسی دستگاه نمونه ای بدون بی نظمی در پیمانه لاندائو برای پتانسیل برداری زیر درک کرد:

$$\mathbf{A} = -By\hat{x} \quad (24)$$

افزایش δA متناظر با افزایش شار $\delta\varphi$ ، معادل است با جابه‌جایی یک حالت گسترده به اندازه $\delta A/B$ در جهت y . به کمک قضیه استوکس و تعریف پتانسیل برداری داریم $\delta\varphi = L_x \delta A$. به این ترتیب $\delta\varphi$ باعث حرکت تمامی گاز الکترون در جهت y می‌شود.

با استفاده از $\delta U = NeV_H$ و $\delta\varphi = hc/e$ ، داریم

$$I = c(\Delta U/\Delta\varphi) = cNe^2 V_H/hc = (Ne^2/h)V_H \quad (25)$$

در نتیجه مقاومت هال مانند رابطه (۲۲) برابر است با:

$$\rho_H = V_H/I = h/Ne^2 \quad (26)$$

اثر کوانتیده کسری هال^۱ (FQHE). در دماهای پایتتر و میدانهای مغناطیسی بالاتر اثر کوانتیده هال برای دستگاههای مشابه به ازای مقادیر کسری شاخص s گزارش شده است. در حد کوانتومی فرین، تنها بخشی از پایتترین تراز لاتداؤ اشغال می‌شود، و اثر کوانتومی هال عدد درست که در بالا بررسی شد، نباید رخ دهد. ولی مشاهده شده است که وقتی اشغال پایتترین تراز لاتداؤ برابر $1/3$ و $2/3$ است، مقاومت هال، ρ_H ، برحسب $3h/e^2$ کوانتیده می‌شود و برای چنین اشغالی صفر می‌شود.^۲ شکستگیهای مشابهی به ازای اشغالیهای $2/5$ ، $3/5$ ، $4/5$ ، و $2/7$ گزارش شده است.

پیوندگاههای $p-n$

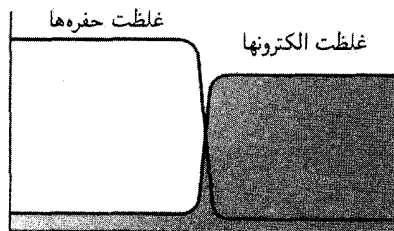
پیوندگاه $p-n$ از تک بلوری ساخته می‌شود که به دو ناحیه مجزا تغییر یافته است. اتمهای ناخالصی پذیرنده در یک بخش شرکت داده شده‌اند. ناحیه p را، که در آن حفره‌ها حاملهای اکثریت‌اند، ایجاد کنند. اتمهای ناخالصی دهنده در بخش دیگر ناحیه n را، که در آن الکترونها حاملهای اکثریت‌اند، ایجاد می‌کنند. ضخامت ناحیه سطح مشترک ممکن است کمتر از 10^{-4} cm باشد. دور از ناحیه پیوندگاه در طرف p ، اتمهای ناخالصی پذیرنده یونیده (-) و همراه با غلظت برابری از حفره‌ها آزاد وجود دارند. در طرف n ، اتمهای دهنده یونیده (+) و همراه با غلظت برابری از الکترونها آزاد وجود دارند. بنابراین حاملهای اکثریت در طرف p حفره‌ها و در طرف n الکترونها هستند (شکل ۱۲).

1. Fractional Quantized Hall Effect.

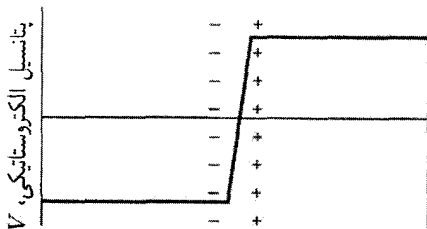
2. D.C. Tsui, H.L. Stormer and A.C. Gossard Phys. Rev. Lett. **48**, 1562 (1982); A.M. Chang et al.,

برای بحث درباره این نظریه به مراجع زیر مراجعه کنید:

Phys. Rev. Lett. **53**, 997 (1984). R. Laughlin in G. Bauer et al., eds., *Two-dimensional systems, Heterostructures, and superlattices*, Springer, 1984.



(الف)



(ب)

شکل ۱۲. (الف) تغییرات غلظت حفره‌ها و الکترونها در طول پیوندگاه بدون پیش‌ولت (ولتاژ اعمال شده صفر است). حاملها با اتمهای ناخالصی پذیرنده و دهنده در تعادل گرمایی‌اند، در نتیجه با پیروی از اثر جرم حاصلضرب pn غلظت حفره‌ها و الکترونها در سرتاسر بلور ثابت است. (ب) پتانسیل الکترواستاتیکی حاصل از یونهای پذیرنده (-) و دهنده (+) در نزدیکی پیوندگاه شیب پتانسیل مانع از پخش شدن حفره‌ها از طرف p به طرف n ، و پخش شدن الکترونها از طرف n به طرف p می‌شود. میدان الکتریکی را در ناحیه پیوندگاه میدان الکتریکی درونی می‌نامند.

بخش حفره‌های متمرکز شده در طرف p در جهتی است که بلور را به‌طور یکنواخت اشغال کنند. الکترونها نیز به همین دلیل از طرف n پخش می‌شوند ولی عمل پخش خنثی بودن موضعی الکتریکی دستگاه را به هم می‌زند.

انتقال اندک بار ناشی از پخش، در طرف p فزونی پذیرنده‌های یونیده (-) و در طرف n فزونی دهنده‌های یونیده (+) را به جای می‌گذارد. این لایه دوگانه بار یک میدان الکتریکی در جهت n به p ایجاد می‌کند که مانع از پخش می‌شود و در نتیجه فاصله بین دو نوع حامل را القا می‌کند. این لایه دوگانه باعث می‌شود که پتانسیل الکترواستاتیکی بلور در عبور از ناحیه پیوندگاه، جهش داشته باشد.

در تعادل گرمایی پتانسیل شیمیایی هر نوع حامل در همه جای بلور، حتی در ناحیه پیوندگاه، ثابت است. برای حفره‌ها در طول بلور داریم

$$k_B T \ln p(\mathbf{r}) + e\varphi(\mathbf{r}) = \text{ثابت} \quad (۲۷ \text{ الف})$$

که در آن p غلظت حفره و φ پتانسیل الکترواستاتیکی است. به این ترتیب وقتی φ زیاد است p کم است.

برای الکترونها داریم

$$k_B T \ln n(\mathbf{r}) - e\varphi(\mathbf{r}) = \text{ثابت} \quad (27\text{ب})$$

و وقتی φ کم باشد، n کم خواهد بود.

پتانسیل شیمیایی کل در طول بلور ثابت است. اثر شیب غلظت دقیقاً پتانسیل الکتروستاتیکی را حذف می‌کند، و شارش ذرهٔ خالص هر نوع حامل صفر می‌شود. ولی، حتی در تعادل گرمایی شارش اندکی از الکترونها از n به p وجود دارد که در آنجا الکترونها پس از ترکیب با حفره‌ها دیگر آزاد نخواهند بود. جریان بازترکیب، J_{nr} ، با جریان الکترونها، J_{ng} ، موازنه می‌شوند. J_{ng} مربوط به الکترونهاست که به طور گرمایی در ناحیهٔ p تولید و توسط میدان الکتریکی درونی به داخل ناحیهٔ n رانده می‌شوند. بنابراین در میدان الکتریکی اعمال شدهٔ خارجی صفر داریم:

$$J_{nr}(\circ) + J_{ng}(\circ) = 0 \quad (28)$$

زیرا در غیر این صورت الکترونها در یک طرف سد به طور نامحدود انباشته می‌شوند.

یکسوسازی

پیوندگاه $p-n$ می‌تواند به منزلهٔ یکسوسازی عمل کند. اگر به دوسر پیوندگاه ولتاژی اعمال کنیم، جریان زیادی در یک جهت شارش می‌کند، ولی اگر ولتاژ در جهت مخالف باشد فقط جریان کوچکی جاری خواهد شد. اگر ولتاژ متناوبی به دوسر پیوندگاه اعمال شود جریان عمدتاً در یک جهت شارش خواهد کرد، یعنی پیوندگاه جریان را یکسو کرده است (شکل ۱۳).

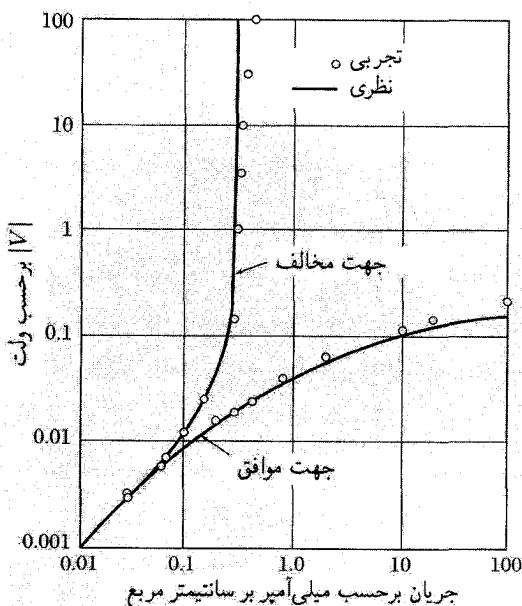
در بایاس ولتاژ مخالف، ولتاژ منفی به ناحیهٔ p و ولتاژ مثبت به ناحیهٔ n اعمال می‌شود و بدین ترتیب اختلاف پتانسیل بین این دو ناحیه افزایش می‌یابد. در این مورد عملاً هیچ الکترونی نمی‌تواند از تپهٔ انرژی پتانسیل، از طرف پایین به طرف سد، صعود کند. جریان بازترکیب با ضریب بولتزمن کاهش می‌یابد:

$$J_{nr}(V \text{ مخالف}) = J_{nr}(\circ) \exp(-e|V|/k_B T) \quad (29)$$

ضریب بولتزمن تعداد الکترونها را که با انرژی کافی از این سد می‌گذرند، کنترل می‌کند. ولتاژ مخالف اثر خاصی بر جریان گرمایی الکترونها تولیدشده ندارد، زیرا به هر حال این الکترونها تولیدشده به سوی پایین (از p به n) جاری می‌شوند:

$$J_{ng}(V \text{ مخالف}) = J_{ng}(\circ) \quad (30)$$

در رابطهٔ (۲۸) مشاهده کردیم که $J_{nr}(\circ) = -J_{ng}(\circ)$ ، بنابراین در بایاس مخالف جریان تولید بر جریان بازترکیب غلبه می‌کند.



شکل ۱۳. مشخصه یکسوسازی پیوندگاه $p-n$ در ژرمانیم.

وقتی ولتاژ موافق اعمال شود جریان باز ترکیب افزایش می‌یابد، زیرا سد انرژی پتانسیل پایینتر می‌آید. در نتیجه الکترونهای بیشتری می‌توانند از طرف n به طرف p جاری شوند:

$$J_{nr}(V \text{ موافق}) = J_{nr}(0) \exp(-e|V|/k_B T) \quad (31)$$

در اینجا نیز جریان تولید تغییر نمی‌کند:

$$J_{ng}(V \text{ موافق}) = J_{ng}(0) \quad (32)$$

جریان حفره که در طول پیوندگاه جاری می‌شود همانند جریان الکترون رفتار می‌کند. ولتاژ اعمال شده‌ای که ارتفاع سد را برای الکترونها کاهش می‌دهد برای حفره‌ها نیز چنین می‌کند، در نتیجه تعداد زیادی الکترون تحت همان شرایط ولتاژی از ناحیه n جاری می‌شوند که جریانهای حفره‌ای بزرگی در جهت مخالف به‌وجود می‌آورند.

جریانهای الکتریکی ناشی از حفره‌ها و الکترونها با هم جمع می‌شوند. در نتیجه جریان الکتریکی موافق کل، برابر است با:

$$I = I_s [\exp(eV/k_B T) - 1] \quad (33)$$

که در آن I_s جمع دو جریان تولید است. این معادله در مورد پیوندگاه‌های $p-n$ در ژرمانیم به خوبی صادق است (شکل ۱۳)، ولی برای نیمرساناهای دیگر چندان صادق نیست.

باتریهای خورشیدی و آشکارسازهای فوتولتایی

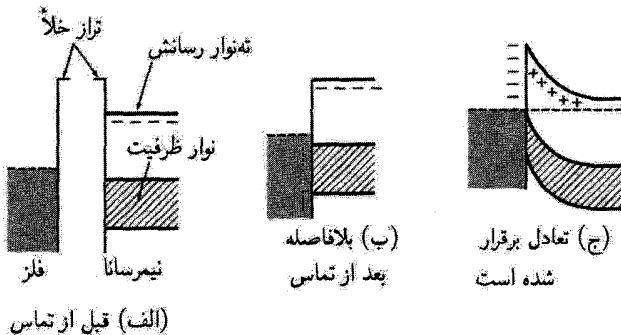
روی یک پیوندگاه $p-n$ بدون ولتاژ بیاس خارجی نور می‌تابانیم. هر فوتون جذب‌شده یک الکترون و یک حفره ایجاد می‌کند. وقتی این حاملها به سوی پیوندگاه پخش می‌شوند، میدان الکتریکی درونی در داخل پیوندگاه آنها را در سد انرژی جدا می‌سازد. جدایی این حاملها در عرض سد ولتاژ موافقی به وجود می‌آورد: موافق، به این دلیل که میدان الکتریکی حاملهایی که بر اثر فوتون برانگیخته شده‌اند در جهت مخالف میدان درونی پیوندگاه است.

پیدایش ولتاژ موافق در دو طرف پیوندگاهی که به آن نور تابانده شده است، اثر فوتولتایی می‌نامند. پیوندگاهی که به آن نور تابانده شده است می‌تواند برای مدار خارجی توان ایجاد کند. از پیوندگاههای $p-n$ سیلیسیم با مساحت بزرگ به صورت صفحه‌های خورشیدی برای تبدیل فوتونهای خورشیدی به انرژی الکتریکی استفاده می‌کنند.

سد شونکی

اگر نیمرسانا در تماس با فلزی قرار گیرد، در آن یک لایه سدی تشکیل می‌شود که حاملهای بار شدیداً تهی می‌شوند. این لایه سدی را تهی لایه یا لایه تخلیه نیز می‌نامند.

در شکل ۱۴ نیمرسانای نوع n در تماس با فلز قرار دارد. با انتقال الکترونها از نیمرسانا به نوار رسانش فلز، ترازهای فرمی فلز و نیمرسانا یکسان می‌شوند. در ناحیه‌ای از نیمرسانا که عملاً تهی از الکترونهاست،



شکل ۱۴. سد یکسوساز بین فلز و نیمرسانای نوع n . تراز فرمی به صورت خط چین نمایش داده شده است.

یونهای دهنده با بار مثبت بر جای می‌مانند. در اینجا معادله پواسون عبارت است از

$$(CGS) \quad \text{div} \mathbf{D} = 4\pi ne \quad \boxed{(\text{div} \mathbf{D} = ne/\epsilon_0)} \quad (34)$$

که در آن n غلظت دهنده‌هاست. پتانسیل الکتروستاتیکی با معادله زیر تعیین می‌شود

$$(CGS) \quad d^2\varphi/dx^2 = -4\pi ne/\epsilon \quad \boxed{d^2\varphi/dx^2 = ne/\epsilon\epsilon_0} \quad (35)$$

که دارای پاسخی به شکل زیر است:

$$(CGS) \quad \varphi = -(4\pi ne/\epsilon)x^2 \quad \boxed{\varphi = -(ne/2\epsilon\epsilon_0)x^2} \quad (36)$$

برای سهولت مبدأ x در لبه طرف راست سد اختیار شده است. تماس در $-x_b$ است و در اینجا انرژی پتانسیل نسبت به طرف راست برابر است با $-e\varphi_0$ ، بنابراین ضخامت سد برابر است با

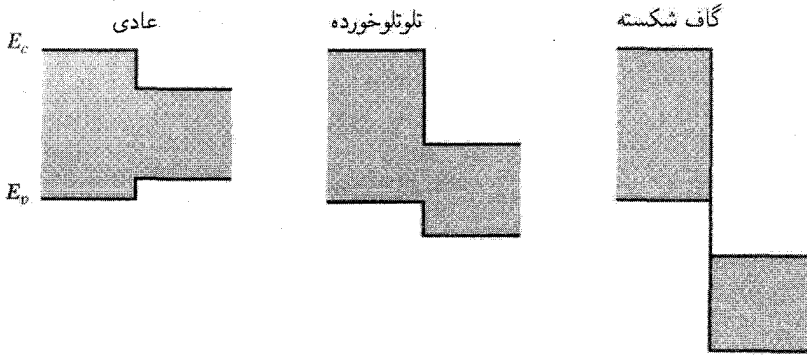
$$(CGS) \quad x_b = (\epsilon|\varphi_0|/4\pi ne)^{1/2} \quad \boxed{x_b = (2\epsilon\epsilon_0|\varphi_0|/ne)^{1/2}} \quad (37)$$

به ازای $\epsilon = 16$ ، $e\varphi_0 = 0.5\text{eV}$ و $n = 10^{16}\text{cm}^{-3}$ ، داریم $x_b = 0.3\mu\text{m}$. این نمای ساده‌شده‌ای از تماس واقعی فلز نیمرساناست.

ساختارهای چندگن (هترو ساختارها)

ساختارهای چندگن نیمرسانا لایه‌هایی از دو یا چند نیمرسانای مختلف‌اند که با یک ساختار بلورین مشترک به‌طور هم‌دوس رشد می‌یابند. این ساختارها درجات آزادی بیشتری در طراحی قطعات پیوندگاهی نیمرسانایی ارائه می‌دهند، زیرا در آنها هم آلیش ناخالصیها هم تغییرات نوارهای رسانش و ظرفیت دو پیوندگاه را می‌توان کنترل کرد. به دلیل این آزادی، در اغلب قطعاتی که از نیمرساناهای ترکیبی استفاده می‌شود، ساختارهای چندگن به کار می‌رود. برای مثال لیزرهای نیمرسانا در دستگاههای پخش CD و قطعات با سرعت بالا در دستگاههای تلفن همراه را می‌توان نام برد.

ساختار چندگن را می‌توان به صورت تک‌بلوری که در آن اشغال جایگاههای اتمی در سطح مشترک تغییر می‌کند در نظر گرفت. برای مثال یک طرف فصل مشترک می‌تواند Ge و طرف دیگر GaAs باشد: ثابتهای هر دو شبکه 5.65\AA است. یک طرف دارای ساختار الماسی و طرف دیگر ساختار سولفیدروی مکعبی است. هر دو ساختار از پیوندهای کووالانسی چاروجهی ساخته شده‌اند و با هم به‌طور هم‌دوس جفت‌وجور شده‌اند، گویی که تک‌بلورند. تعدادی در رفتگیهای لبه‌ای (فصل ۲۱) وجود دارند تا انرژی کرنشی نزدیک فصل مشترک را رها کنند.



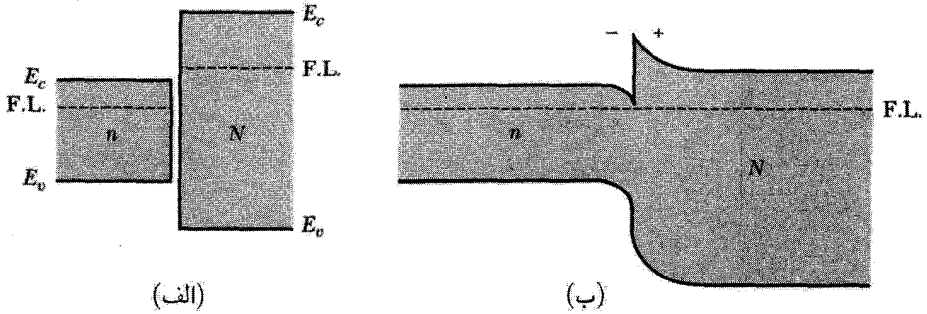
شکل ۱۵. سه نوع تغییر پله‌ای لبه نوار در وجوه مشترک چندگن. گافهای ممنوع سایه زده شده‌اند. برای مثال تغییر عادی در $\text{GaAs}/(\text{Al}\cdot\text{Ge})\text{As}$ رخ می‌دهد. تغییر «گاف شکسته» در پیوندگاه چندگن GaSb/InAs رخ می‌دهد.

در هر حال، گافهای نواری متفاوت‌اند، و این تفاوت باعث می‌شود که ساختارهای چندگن علاوه بر دارا بودن محسنات تکنیکی واقعاً مورد توجه قرار گیرند. گافهای نواری در 30°K برای Ge برابر با 6eV و برای GaAs برابر با 1.43eV است. همان‌گونه که در شکل ۱۵ نشان داده شده است، برای صف‌آراییهای لبه نوارهای رسانش و ظرفیتی، امکانهای گوناگونی وجود دارد. از محاسبات می‌فهمیم که بالاترین قسمت نوار ظرفیت E_v در Ge باید در حدود 42eV بالاتر از GaAs باشد. پایینترین نوار رسانش E_c در Ge باید در حدود 35eV از GaAs پایینتر باشد، تا اینکه نقطه تغییر نوارها به صورت عادی در طرح شکل ۱۵ رده‌بندی شود. تغییرات پله‌ای لبه نوار در مقابل الکترونها و حفره‌ها به صورت سدهای پتانسیل با علامت مخالف عمل می‌کند. یادآور می‌شویم که در نمودار انرژی، انرژی الکترونها با «پایین آمدن» کم می‌شود، در حالی که انرژی حفره‌ها در همان نمودار با «بالا رفتن» در همان نمودار کاهش می‌یابد. در صف‌آرایی عادی، الکترونها و حفره‌ها هر دو توسط سد از گاف پهن به گاف باریک ساختار چندگن رانده می‌شوند.

دیگر زوجهای مهم نیمرسانا که در ساختار چندگن به کار می‌روند عبارت‌اند از AlAs/GaAs ، ZnSe/GaAs ، GaP/Si ، InAs/GaSb . اغلب می‌توان با استفاده از آلیاژهای عناصر گوناگون جورشدگی شبکه‌ای مناسبی درگستره 1° تا 1° درصد به دست آورد، که می‌توان گافهای انرژی را نیز برای حصول نیازهای ویژه قطعات الکترونیکی تنظیم کرد.

پیوندگاه چندگن $n-N$

برای مثالی عملی، دو نیمرسانای نوع n را با یک تغییر پله‌ای بزرگ در دو نوار رسانش به گونه‌ای در نظر بگیریم که در شکل ۱۶ الف برای یک زوج نیمرسانا با صف‌آرایی گاف انرژی عادی رسم شده است. ماده



شکل ۱۶. (الف) دو نیمرسانا بدون تماس: انرژیهای مطلق لبه نواری برای نوار رسانش با E_c و برای نوار ظرفیت با E_v برچسب زده می‌شوند. منظور از «انرژی مطلق» انرژی در قیاس با بینهایت است. ترازهای فرمی در دو ماده را غلطتهای دهنده و نیز ساختار نوار مشخص می‌کنند. (ب) همین نیمرساناها به صورت پیوندگاه چندگن، که در آن دو قسمت در تعادل پخش می‌یابند. این امر ایجاب می‌کند که تراز فرمی ($F \cdot L$) مستقل از مکان باشد، و با انتقال الکترونها از طرف N به طرف n وجه مشترک تحقق می‌یابد. یک لایه تهی از دهنده‌های یونیده مثبت در طرف N برجای می‌ماند.

نوع n با لبه نوار رسانش بالاتر، نوع N نامیده می‌شود، و پیوندگاه نشان داده شده را پیوندگاه $n-N$ می‌نامند. ویژگیهای تراپردی الکترون در طول پیوندگاه مشابه با ویژگیهای سد شوتکی است. دو نیمرسانا باید دور از وجه مشترک از نظر الکتریکی دارای ترکیب خنثی باشند. ولی اگر قرار باشد تراپرد الکترونی در غیاب ولتاژ بیاس خارجی صفر باشد، باید دو تراز فرمی که هر یک با آرایش تعیین می‌شود، برهم منطبق باشند.

همانگونه که در شکل ۱۶ (ب) نشان داده شده است، این ملاحظات تعیین کننده «فاصله» انرژیهای لبه نوار رسانش نسبت به سطح فرمی است. یک تغییر پله‌ای نواری مشخص در وجه مشترک (که توسط ترکیب ماده میزبان تعیین می‌شود) تنها در صورتی با انرژیهای نواری در فواصل دور (که با سطح فرمی تعیین می‌شود) سازگار می‌شود که نوارها در نزدیکی وجه مشترک همانند شکل خم شوند. خم شدن نواری لازم را بارهای فضایی، که پیامد انتقال الکترونها از طرف N به طرف n کمتر است، به وجود می‌آورند. این انتقال در طرف N لایه بار فضایی دهنده مثبت بر جای می‌گذارد، که بنا بر معادله پواسون در الکتروستاتیک، به مثبت بودن مشتق دوم انرژی لبه نوار رسانش در آن طرف (انحنای رو به بالا) منجر می‌شود.

هم‌اکنون در طرف n به دلیل فزونی الکترونها بار فضایی منفی وجود دارد. این لایه بار منفی فضایی یک مشتق دوم انرژی لبه نوار رسانش منفی (انحنای رو به پایین) به وجود می‌آورد. در طرف n تمامی نوار در نزدیکی پیوندگاه به طرف پایین خم می‌شود. این وضعیت با پیوندگاه $p-n$ معمولی تفاوت دارد. خم‌شدگی رو به پایین و پله پتانسیل برای الکترونها چاه پتانسیل به وجود می‌آورد. این چاه اساس پدیده‌های جدید فیزیکی، مشخصه فیزیک ساختار چندگن است.

اگر آرایش در طرف n (E_c کمتر) تا یک مقدار ناچیز کاهش یابد، دهنده‌های یونیده بسیار اندکی در آن طرف، در لایه پراکترون، وجود خواهند داشت. تحرک پذیری این الکترونها را عمدتاً پراکندگی شبکه‌ای محدود می‌کند. این پراکندگی با کاهش دما به شدت کاهش می‌یابد. در دماهای پایین تحرک پذیریهایی به بزرگی $10^7 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ در $\text{GaAs}/(\text{Al}, \text{Ga})\text{As}$ مشاهده شده است.

اکنون اگر ضخامت نیم‌رسانای طرف N به مقداری کمتر از ضخامت لایه تهی آن طرف کاهش یابد، ماده N کاملاً از الکترونها با تحرک پذیری پایین‌اش تهی می‌شود. همه رسانش الکتریکی به موازات وجه مشترک تماماً توسط الکترونها با تحرک پذیری بالا در طرف n انجام می‌گیرد. تعداد این الکترونها برابر با تعداد دهنده‌های یونیده طرف N اند، ولی از نظر فضایی به اندازه پله‌ی پتانسیل از هم جدایند. چنین ساختارهایی با تحرک پذیری بالا در مطالعات حالت جامد گازهای دوبعدی و نیز در دسته‌های جدید ترازبستورهای اثر میدانی سرعت-بالا در کاربردهای رایانه‌ای در دماهای پایین نقش عمده‌ای ایفا می‌کنند.

لیزرهای نیم‌رسانا

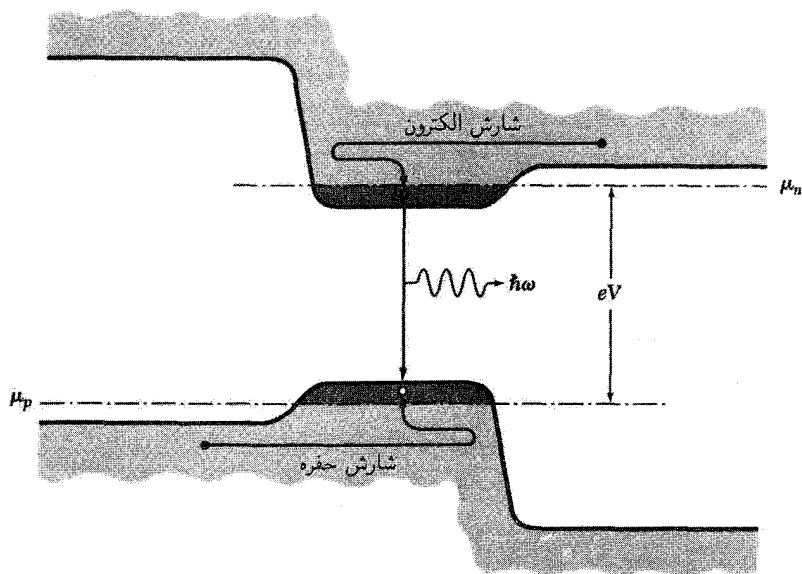
گسیل القایی تابش می‌تواند در نیم‌رساناهای با گاف مستقیم، از تابش گسیل یافته در اثر بازترکیب الکترونها با حفره‌ها، رخ دهد. غلظت‌های الکترون و حفره که از تحت تابش قرار دادن به وجود می‌آیند، بزرگتر از غلظت‌های تعادلی‌اند. زمانهای بازترکیب برای فزونی حاملها، بسیار طولانیتر از زمانهای رسیدن الکترونها رسانش به تعادل گرمایی با یکدیگر در نوار رسانش، و زمانهای رسیدن حفره‌ها به تعادل گرمایی با یکدیگر در نوار ظرفیت‌اند. این شرط پایا برای جمعیت‌های الکترون و حفره توسط ترازهای فرمی جداگانه μ_c و μ_v دو نوار، به نام ترازهای شبه‌فرمی، توصیف می‌شود.

اگر μ_c و μ_v در قیاس با لبه نوارهایشان سنجیده شوند، شرط وارونی جمعیت عبارت است از:

$$\mu_c > \mu_v + \epsilon_g \quad (38)$$

برای آنکه لیزر عمل کند، باید فاصله بین ترازهای شبه‌فرمی بیش از گاف نواری باشد.

وارونی جمعیت و عمل لیزر را می‌توان از طریق بایاس مستقیم پیوندگاه GaAs یا InP معمولی به دست آورد، ولی در عمل تقریباً در تمام لیزرهای تزریقی از ساختار چندگانه دوگانه پیشنهادی کرومر استفاده می‌شود (شکل ۱۷). در اینجا نیم‌رسانای لیزرکننده بین دو ناحیه نیم‌رسانا با گاف بهتر که آرایش مخالف دارند جای می‌گیرد. این عمل چاه کوانتومی ایجاد می‌کند که در آن الکترونها و حفره‌ها محبوس می‌شوند. جای دادن GaAs درون $(\text{Al}, \text{Ga})\text{As}$ نمونه‌ای از این ساختار است. در چنین ساختاری سد پتانسیلی وجود دارد که مانع از خروج الکترونها به ناحیه نوع p می‌شود، به علاوه سد پتانسیل مخالفی که مانع خروج حفره‌ها به ناحیه نوع n است.



شکل ۱۷. لیزر تزریقی دو گانه با ساختار چندگن. الکترونها از سمت راست به داخل لایه فعال نوری، که در آنجا تشکیل گاز الکترون واکن می‌دهند، شارش می‌یابند. سه پتانسیل ایجاد شده توسط گاف انرژی پهن در طرف p مانع از فرار الکترونها به سمت چپ می‌شود. حفره‌ها از چپ به داخل لایه فعال شارش می‌یابند، ولی نمی‌توانند به سوی راست فرار کنند.

مقدار μ_c در لایه فعال نوری با μ_n در محل تماس n هم‌تراز می‌شود و μ_v نیز با μ_p در تماس p هم‌تراز می‌شود. اگر ولتاژ بایاس بزرگتر از ولتاژ معادل گاف انرژی لایه فعال باشد، وارونی حاصل می‌شود. ورقه نازک دیودی کاواک الکترومغناطیسی خود را فراهم می‌سازد، زیرا بازتابش در فصل مشترک بلور-هوا بالاست. بلورها معمولاً صیقل می‌شوند تا دو سطح موازی تخت ایجاد شود؛ تابش در صفحه پیوندگاههای چندگن گسیل می‌شود.

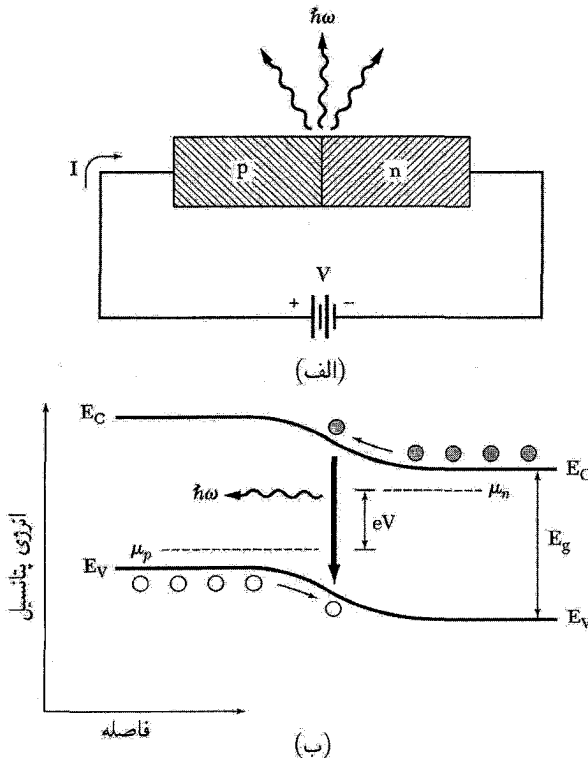
معمولاً برای لیزرهای پیوندگاهی به بلورهای با گاف نواری مستقیم نیاز است. گافهای غیر مستقیم علاوه بر فوتونها، فونونها را نیز درگیر می‌کنند؛ باز ترکیب حاملها به دلیل فرایندهای رقیب کارایی کمتری دارد و عمل لیزر و نیمرساناهای با گاف غیرمستقیم مشاهده نشده است.

گالیم آرسنید به صورت لایه فعال نوری به طور گسترده مطالعه شده است. این نیمرسانا، در فروسرخ نزدیک در 8383 \AA یا 1.48 eV گسیل می‌کند؛ طول موج دقیق به دما بستگی دارد. این گاف مستقیم است (فصل ۸). در پیوندگاه چندگن دستگانه کارایی بالایی دارد؛ نسبت خروجی انرژی نوری به ورودی انرژی الکتریکی dc نزدیک به 50% است، و کارایی دیفرانسیلی برای تغییرات کوچک تا 90% درصد است.

در دستگاه آلیاژی $Ga_xIn_{1-x}P_yAs_{1-y}$ طول موج را می‌توان روی گستره وسیعی تنظیم کرد، در نتیجه می‌توان طول موج لیزر را با کمینه جذب تارهای نوری که به عنوان محیط تراگسیلنده به کار می‌روند، جور کرد. ترکیب لیزرهای با ساختار چندگن دوگانه همراه با تارهای شیشه‌ای، مبنای فناوری جدید ارتباطات موج نوری را تشکیل می‌دهد. این فناوری به سرعت جایگزین تراگسیل سیگنالها از طریق خطوط مسی می‌شود.

دیودهای نور گسیل

امروزه دیودهای گسیلنده نور نسبت به لامپهای التهابی کارایی بیشتری دارند. یک پیوندگاه $p-n$ با منبع ولتاژ V ، که دو پتانسیل شیمیایی μ_p و μ_n را به اندازه eV (مطابق شکل ۱۸) از هم جدا می‌سازد، در نظر بگیرید. الکترونها از طرف n به داخل طرف p و حفره‌ها از طرف p به داخل طرف n تزریق می‌شوند. این حاملهای تزریقی در طول پیوندگاه یکدیگر را از بین می‌برند و اگر کارایی کوانتومی یک باشد فوتون ایجاد می‌کنند.



شکل ۱۸. بازترکیب الکترون-حفره به فوتون، در طول پیوندگاه $p-n$.

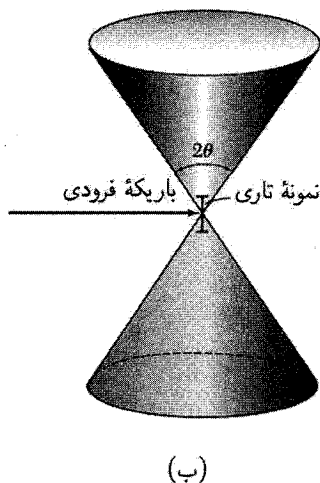
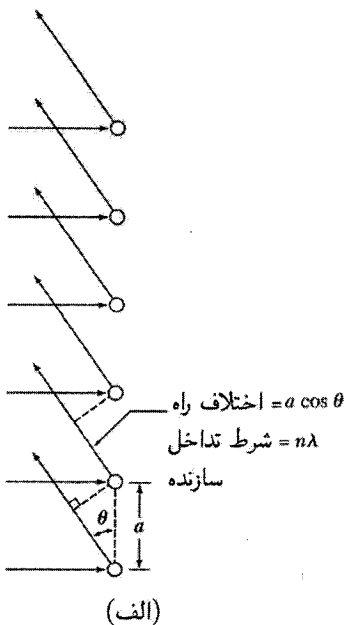
فرایند تولید یا باز ترکیب در نیم رسانای گاف مستقیم (شکل ۸ الف) از فصل ۵) بسیار قویتر از نیم رسانای گاف نامستقیم (شکل ۸ ب) از فصل ۵) است. در نیم رسانای گاف مستقیمی مثل GaAs، فوتونهای نوار به نوار در فاصله‌ای حدود $1 \mu m$ جذب می‌شوند، که جذبی است قوی. نیم رسانای سه تایی گاف مستقیم $GaAs_{1-x}P_x$ نوری ارثه می‌دهد که با افزایش متغیر ترکیبی x به سوی طول موجهای کوتاهتر می‌شود. هولونیاک^۱ از این ترکیب نخستین لیزر دیودی $p-n$ و نخستین LED طیف مرئی (سرخ) را ساخت. امروزه ساختارهای چندگنن آبی گسیل، نظیر $In_xGa_{1-x}N - Al_yGa_{1-y}N$ ساخته شده‌اند. عملکرد LEDها به طور چشمگیری در سالهای اخیر ارتقا یافته است، طوری که از حدود 10^6 لومن بر وات در ۱۹۶۲ به حدود 40^6 لومن بر وات در ۲۰۰۴ رسیده است. این عملکرد با ۱۵ لومن بر وات برای لامپ الکتریکی سفید فیاتر شده استاندارد مقایسه شده است. به نقل از کرافورد^۲ و هولونیاک: «با این شکل نهایی از لامپ-ساختار چندگن $p-n$ آلیاژ III-V گاف مستقیم به عصر کاملاً جدیدی از نوردهی (بر تابندگی) وارد می‌شویم.»

مسائل

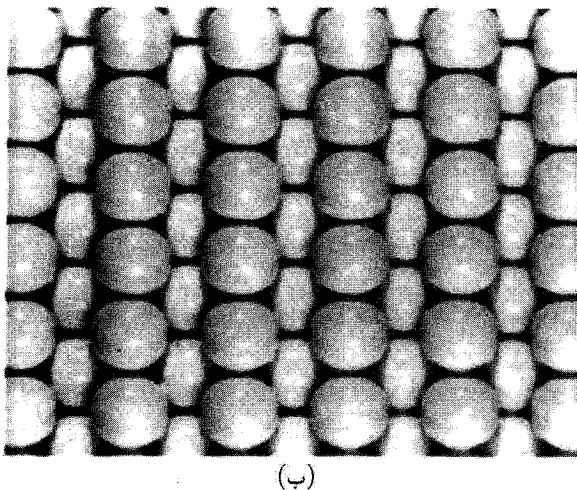
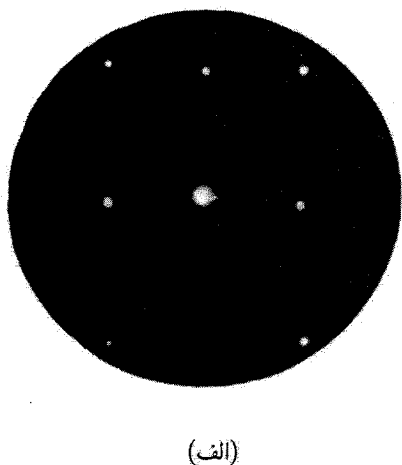
۱. پراش ناشی از آرایه خطی و آرایه مربعی. الگوی پراش ساختار خطی با ثابت شبکه a در شکل ۱۹ توضیح داده شده است.* ساختارهای مشابهی در زیست‌شناسی مولکولی حائز اهمیت‌اند: DNA و بسیاری از پروتئینها به صورت مارپیچهای خطی‌اند. (الف) یک فیلم استوانه‌ای در معرض پرتوهای پراشیده حاصل از شکل ۱۹ (ب) قرار می‌گیرد؛ محور استوانه بر محور ساختار خطی یا تار منطبق است. شکل ظاهری الگوی پراش روی فیلم را توضیح دهید. (ب) یک صفحه عکاسی مسطح در پشت تار و عمود بر باریکه فرودی قرار می‌گیرد. شکل ظاهری نقشه پراش روی این صفحه را به طور تقریبی رسم کنید. (ج) تک صفحه‌ای از اتمها شبکه‌ای مربعی با ثابت شبکه a تشکیل می‌دهد. این صفحه بر باریکه پرتو x فرودی عمود است. شکل ظاهری الگوی پراش روی صفحه عکاسی را به طور تقریبی رسم کنید. راهنمایی: پراش ناشی از صفحه‌ای از اتمها را می‌توان از الگوهای حاصل از دو خط عمود برهم از اتمها استنتاج کرد. (د) شکل ۲۰، الگوی پراش برگشتی الکترونها توسط اتمهای واقع در صفحه (110) بلور نیکل را نشان می‌دهد. سمتگیری پراش را نسبت به مکان اتمهای سطح، که در مدل نشان داده شده‌اند، توضیح دهید. فرض کنید فقط اتمهای سطح در بازتاب الکترونهای کم انرژی مؤثرند.

1. Holonyak 2. Craford

* دیدگاهی دیگر نیز مفید است: برای شبکه خطی الگوی پراش با تک معادله لایه $\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi q$ توصیف می‌شود که در آن q عدد درست است. جمع‌زینهای شبکه‌ای که به سایر معادلات لایه منجر شدند، برای شبکه خطی رُج نمی‌دهند. در اینجا رابطه (ثابت $\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k} =$) معادله صفحه است، بنابراین شبکه وارون عبارت است از مجموعه‌ای از صفحات موازی که بر خط اتمها عمودند.



شکل ۱۹. الگوی پراش حاصل از تک خطی با ثابت شبکه a که در معرض باریکه پرتو x تکفام، که بر خط عمود است، قرار دارد. (الف) شرط تداخل سازنده عبارت است از $a \cos \theta = n \lambda$ ، که در آن n عدد درست است. (ب) برای یک n معین پرتوهای پراشیده با λ ثابت روی سطح مخروط قرار می‌گیرند.



شکل ۲۰. (الف) الگوی پراکندگی برگشتی الکترونیهای ۷۶ الکترون ولتی که به‌طور عمود بر وجه (110) بلور نیکل فرود می‌آیند؛ مدل این سطح در (ب) نشان داده شده است.

۲. زیرنوارهای سطح در خط کوانتومی الکتریکی. صفحه تماس بین عایق و نیمرسانا را، مثل ترانزیستور فلز-اکسید-نیمرسانا یا MOSFET، در نظر بگیرید. با اعمال میدان الکتریکی قوی در طول فصل مشترک SiO₂-Si، انرژی پتانسیل الکترون رانش را می‌توان با $V(x) = eEx$ برای x مثبت و با $V(x) = \infty$ برای x منفی تقریب زد؛ مبدأ x در فصل مشترک است. تابع موج برای x منفی صفر است و ممکن است به صورت $\psi(x, y, z) = u(x)\exp[i(k_y y + k_z z)]$ جدا شود که $u(x)$ در معادله دیفرانسیل

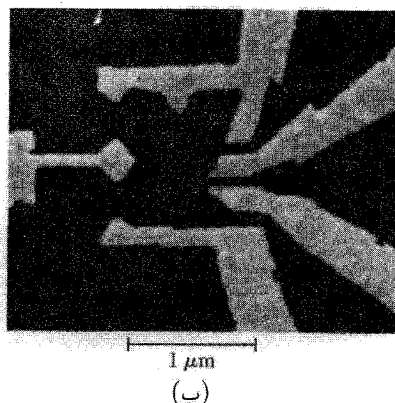
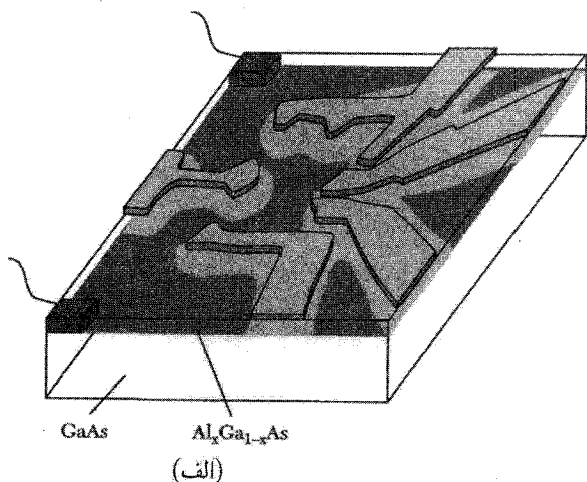
$$-(\hbar^2/2m)d^2u/dx^2 + V(x)u = \epsilon U$$

صدق می‌کند. برای پتانسیل مدلی $V(x)$ ، ویژه توابع دقیق توابع ابری اند، اما می‌توانیم انرژی حالت پایه نسبتاً خوبی از تابع آزمون وردشی $x \exp(-ax)$ به دست آوریم. (الف) نشان دهید که $\langle \epsilon \rangle = (\hbar^2/2m)a^2 + 3eE/2a$. (ب) نشان دهید که وقتی $a = (3eEm/2\hbar^2)^{1/3}$ ، انرژی کمینه است. (ج) نشان دهید که $\langle \epsilon \rangle_{\min} = 1.89(\hbar^2/2m)^{1/3}(3eE/2)^{2/3}$. در پاسخ دقیق انرژی حالت پایه ضریب ۱.۸۹ با ۱.۷۸ تعویض می‌شود. با افزایش E گستره تابع موج در راستای x کاهش می‌یابد. تابع $u(x)$ یک کانال رسانشی سطحی را در طرف نیمرسانای فصل مشترک مشخص می‌کند. ویژه مقادیرهای گوناگون $u(x)$ مشخص کننده کانالهای مشهور به زیرنوارهای الکتریکی اند. چون این ویژه توابع، توابعی حقیقی از x اند، حالتها در راستای x حامل جریان نیستند، با این حال جریان کانال سطحی را در صفحه yz حمل می‌کنند. وابستگی کانال به میدان الکتریکی E در راستای x قطعه را به ترانزیستور اثر میدان تبدیل می‌کند.

۳. ویژگیهای گاز الکترونی دوبعدی. گاز الکترونی دوبعدی (۲DEG) را با واگنی اسپین دوتایی ولی بدون واگنی دره‌ای در نظر بگیرید. (الف) نشان دهید که تعداد اوربیتالها به ازای واحد انرژی با رابطه $D(\epsilon) = m/\pi\hbar^2$ داده می‌شود. (ب) نشان دهید که چگالی صفحه با رابطه $n_s = k_F^2/2\pi$ به تابع موج فرمی مربوط می‌شود. (ج) نشان دهید که در مدل درود مقاومت صفحه، مثلاً، مقاومت بخش مربعی ۲DEG را می‌توان به صورت $R_s = (h/e^2)/(k_F l)$ نوشت که در آن $l = v_{\mu}\tau$ مسافت آزاد میانگین است.

نانوساختارها

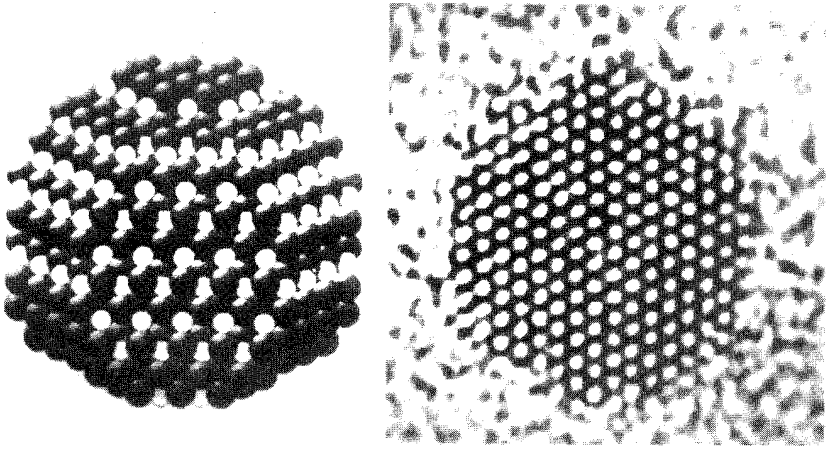
در فصل پیشین به جامدهایی با حبس‌شدگی فضایی در مقیاس نانومتری در یک راستا پرداخته شد: سطوح، وجوه مشترک، و چاههای کوانتومی. این دستگاهها عملاً دوبعدی بودند که آنها را گسترده در دو راستا ولی با مقیاسی نانومتری در راستای سوم تعریف کردیم. در راستای محبوس تنها شمار اندکی از حالت‌های کوانتومی - اغلب تنها یک حالت - اشغال می‌شوند. در این فصل جامدهایی را مورد بحث قرار می‌دهیم که در دو یا سه راستای عمود بر هم محبوس‌اند، و عملاً نانوساختارهای یک‌بعدی ($1D$) یا صفر بعدی ($0D$) را ایجاد می‌کنند. نمونه‌های $1D$ ی مهم عبارت‌اند از نانولوله‌های کربن، سیمهای کوانتومی، و بسپارهای رسانا. نمونه‌های دستگاههای $0D$ شامل نانوبلورهای نیمرسانا، نانوذره‌های فلزی، و نقطه‌های کوانتومی منقوش به روش لیتوگرافی‌اند. برخی نمونه‌ها در شکلهای ۱ تا ۳ نشان داده شده‌اند. توجه خود را تقریباً تنها بر نانوساختارهایی معطوف می‌کنیم که از جامدهای دوره‌ای محبوس تولید می‌شوند. نانوساختارهای غیردوره‌ای در زمینه‌های دیگر نظیر مجتمعهای مولکولی در شیمی درشت‌مولکولهای آلی در زیست‌شناسی بسیار مورد توجه‌اند.



شکل ۱. تصویر نموداری الگوی الکترون در برجه روی ساختار چندگن GaAs/AlGaAs که برای ایجاد نقطه‌ای کوانتومی به شکل پیچیده در گاز الکترونی دوبعدی (۲D) زیرین مورد استفاده قرار گرفته است، همراه با تصویر حاصل از میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) آن.

روشهای تولید نانوساختارها را می‌توان به دو دسته وسیع تقسیم کرد. در رهیافتهای بالا به پایین، با استفاده از نقش‌دهی با روش لیتوگرافی، در مواد ماکروسکوپی ساختارهای نانومقیاسی ایجاد می‌کنند، نظیر الکترودهای فلزی روی ساختار چندگن نیمرسانا که در شکل ۱ نشان داده شده است. در رهیافتهای پایین به بالا، از رشد و خودساماندهی برای ساختن نانوساختارها از آغازگرهای اتمی یا مولکولی استفاده می‌شود. نانوبلور CdSe که در محلول رشد یافته در شکل ۲ نشان داده شده است. تولید ساختارهایی کوچکتر از 50 nm توسط روشهای بالا به پایین نوعاً دشوار است، این در حالی است که تولید ساختارهای بزرگتر از 50 nm نیز توسط روشهای پایین به بالا اغلب دشوار است. یک چالش بزرگ در دانش و فناوری نانو ترکیب این رهیافتها و گسترش راهبردهایی است که دستگاههای پیچیده در تمام مقیاسهای طول، از مولکولی تا ماکروسکوپی، به‌طور مطمئنی تولید شوند. در شکل ۳ نمونه‌ای نشان داده شده است که در آن الکترودهای لیتوگرافی با پهنای 100 nm در تماس با نانولوله‌های کربنی ۲ نانومتری اند که توسط رسوب بخار شیمیایی رشد داده شده‌اند.

هنگامی که پهنای جامد در یک یا دو بعد کم می‌شود، ویژگیهای فیزیکی، مغناطیسی، الکتریکی، و اپتیکی آن ممکن است تغییرات عمده‌ای پیدا کنند. این امر نانوساختارها را به مبحثی تبدیل کرده، که هم از نظر بنیادی و هم به لحاظ عملی مورد توجه است؛ با کنترل اندازه و شکل نانوساختارها در مقیاس نانومتری می‌توان ویژگیهای آنها را به تناسب و دلخواه تنظیم کرد. دسته‌ای از آثار به نسبت تعداد اتمهای سطحی



شکل ۲. تصویر مدلی نانوبلور CdSe همراه با تصویر میکروسکوپ الکترونی تراگسیلی (TEM) از آن ردیفهای مجزای آنها در تصویر TEM به وضوح تفکیک شده‌اند.

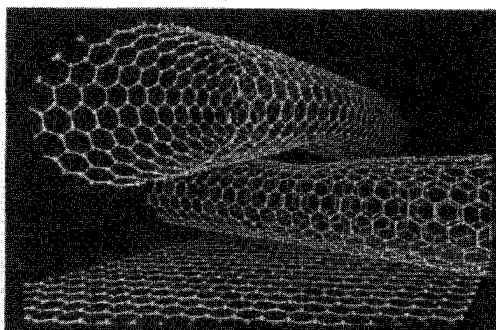
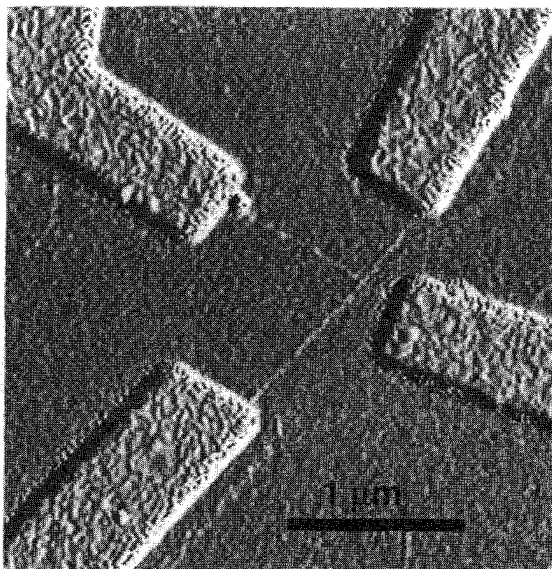
به تعداد اتمهای حجمی در نانوساختار مربوط می‌شود. این نسبت برای نانوذرة کروی به شعاع R که از اتمهایی با فاصله متوسط a تشکیل شده به قرار زیر است

$$N_{\text{surf}}/N \cong 3a/R \quad (۱)$$

برای $R = 6a \sim 1 \text{ nm}$ ، نیمی از اتمها روی سطح‌اند. مساحت سطح زیاد نانوذرها مزیتی است برای کاربستهایی در ذخیره کردن گاز، که در آنها مولکولها روی سطوح جذب سطحی می‌شوند، یا در کاتالیز کردن که واکنشهایی روی سطح کاتالیست روی می‌دهد. این مساحت اثرهای چشمگیری نیز روی پایداری نانوذرها دارد. انرژی چسبندگی به دلیل آنکه اتمهای روی سطح پیوندهای ناکامل دارند به طور چشمگیری پایین می‌آید. از این رو نانوذرها در دماهایی بسیار کمتر از دمای ذوب جامد حجم متناظر، ذوب می‌شوند. برانگیختگیهای بنیادی ارتعاشی و الکترونی نانوساختار نیز کوانتیده می‌شوند، و این برانگیختگیها بسیاری از مهمترین ویژگیهای ماده‌ای را که به شکل نانوساختار در آمده است، تعیین می‌کنند. این پدیده‌های کوانتشی موضوع اصلی این فصل‌اند. این پدیده‌ها نوعاً در گستره اندازه‌های ۱ تا ۱۰۰ نانومتر اهمیت دارند.

روشهای تصویر برداری از نانوساختارها

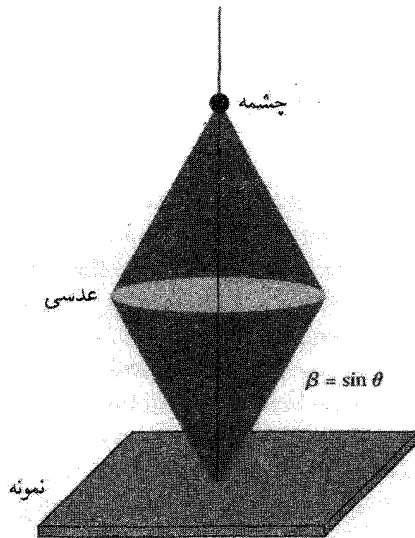
گسترش روشهای جدید برای تصویر برداری و گمانه‌زنی نانوساختارها در تحول این رشته نقش اساسی داشته است. برای ساختارهای ۳D دوره‌ای، پراش الکترونها یا پرتوهای x را می‌توان به منظور تعیین ساختار در



شکل ۳. تصویر میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM)، از یک زوج از نانولوله‌های کربنی متقاطع که با الکترودهایی از Au در تماس‌اند که با استفاده از لیتوگرافی توسط باریکه الکترونی منقوش شده‌اند. مدلی از ناحیه تقاطع نانولوله‌ها نیز نشان داده شده است که شبکه کندی عسلی ورقه‌های گرافین، که دیوارهای نانولوله را می‌سازند، را نشان می‌دهد.

فضای وارون به‌کار برد و با وارون کردن این ساختار، همان گونه که در فصل ۲ مورد بحث قرار گرفت، ترتیبهای اتمی را در فضای واقعی به‌دست آورد. پراش هم به دلایل بنیادی و هم به دلایل عملی، برای جامدهای نانومقیاس مجزا کارایی محدودی دارد. اندازه کوچک جامد دوره‌ای بودن شبکه را نقض می‌کند و باعث کم شدن وضوح قله‌های پراش می‌شود و نیز علامت پراکنده‌شده بسیار کوچکی ایجاد می‌کند.

از این رو گمانه‌های فضای واقعی که می‌توانند ویژگیهای نانوساختارها را مستقیماً تعیین کنند، بسیار ارزشمندند. این گمانه‌ها با استفاده از برهم‌کنش ذره، نوعاً الکترون یا فوتون، با شیء مورد بررسی، یک تصویر



شکل ۴. نمودار طرحوار میکروسکوپ کانونی. باریکه‌ای که از چشمه گسیل می‌شود توسط رشته‌ای از عدسیها روی نمونه کانونی می‌شود. برای کانونی کردن ذره یا موجهای گسیل شده از نمونه روی آشکارساز، می‌توان از دستگاه کانونی‌ساز معادلی استفاده کرد.

ایجاد می‌کنند. روشهای مربوط در رده اصلی قرار می‌گیرند، که آنها را گمانه کانونی و روبشی می‌نامیم. در میکروسکوپی کانونی، ذره گمانه توسط رشته‌ای از عدسیها روی نمونه کانونی می‌شود. شکل ۴ طرحواری را نشان می‌دهد. تفکیک نهایی دستگاه توسط ماهیت موج‌گونه ذره از طریق اصل عدم قطعیت هایزنبرگ، یا هم‌ارز آن از طریق پراش، محدود می‌شود. کوچکترین فاصله‌ای که می‌توان تفکیک کرد، با رابطه زیر داده می‌شود

$$d \approx \lambda / 2\beta \quad (2)$$

که در آن λ طول موج ذره گمانه و $\beta = \sin \theta$ روزنه عددی است که در شکل ۴ تعریف شده است. دستیابی به تفکیک نانومقیاسی مستلزم استفاده از ذره‌هایی با طول موجهای کوچک و بیشینه کردن روزنه عددی است.

در مقابل، در میکروسکوپی گمانه روبشی، گمانه ریزی به نمونه نزدیک می‌شود و سطح نمونه را می‌روبد. تفکیک این میکروسکوپ، به جای طول موج ذره گمانه، توسط گستره مؤثر برهم‌کنش بین گمانه و ساختار مورد بررسی تعیین می‌شود.

گمانه‌های روبشی و کانونی، علاوه بر تصویرگیری، اطلاعاتی درباره ویژگیهای الکتریکی، ارتعاشی،

اپتیکی، و مغناطیسی نانوساختارهای مجزا ارائه می‌کنند. چگالی حالتها برای یک دستگاه با اندازه متناهی به صورت رشته‌ای از تابعهای دلتاست.

$$D(\epsilon) = \sum_j \delta(\epsilon - \epsilon_j) \quad (۳)$$

که در آن روی همهٔ ویژه‌حالتهای انرژی دستگاه جمع زده می‌شود. برای جامد گسترده چگالی حالتها را می‌توان با تابع پیوسته نمایش داد، ولی برای نانوساختار، در راستاهای محبوس شده، شکل جمع‌زنی گسسته لازم است. این چگالی حالتهاى کوانتیده بسیاری از مهمترین ویژگیهای نانوساختار را تعیین می‌کند، و می‌توان آن را با استفاده از روشهایی که در ادامه توصیف می‌شوند، مستقیماً اندازه‌گیری کرد.

میکروسکوپی الکترونی

میکروسکوپ الکترونی ابزار کانونی مؤثری است. باریکهٔ هم‌مخت‌شده‌ای از الکترون‌ها توسط ولتاژهای بالا شتاب داده می‌شوند و از طریق رشته‌ای از عدسیهای الکتروستاتیکی یا مغناطیسی روی نمونه تحت بررسی کانونی می‌شوند.

در میکروسکوپی الکترونی تراگسیلی، یا TEM، باریکهٔ الکترونی درون نمونه حرکت می‌کند و روی تیغهٔ آشکارساز کانونی می‌شود، بسیار شبیه به روشی که تصویر روی قطعهٔ چشمی میکروسکوپ اپتیکی کانونی می‌شود. توان تفکیک نهایی d توسط طول‌موج الکترونهای شتاب‌داده‌شده تنظیم می‌شود

$$d = \lambda / 2\beta \cong 0.6 \text{ nm} / (\beta \sqrt{V}) \quad (۴)$$

که در آن V ولتاژ شتابده (برحسب ولت) است. بنابراین توان تفکیک نظری برای ولتاژهای شتابده نوعی (100 kV) در مقیاس زیراتمی است. اثرهای دیگری، نظیر ناکاملیهای عدسیها، تفکیک TEM را بسیار بالاتر از این حد نگه می‌دارد، در هر حال به 1 nm دست یافته‌اند. شکل ۲ تصویر TEM نانوبلور نیرسانا را نشان می‌دهد که در آن ردیفهای اتمها به‌وضوح تفکیک شده‌اند.

یک محدودیت عمدهٔ TEM آن است که باریکهٔ الکترونی باید در نمونه نفوذ کند، که این امر بررسی ساختارهایی روی زیرلایه‌های جامد را غیرممکن می‌سازد. در میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) بر این مشکل فائق می‌آییم. در SEM، یک باریکهٔ الکترونی پراثری (100 V تا 100 kV) به شدت کانونی شده روی نمونه روبانیده می‌شود. تعداد الکترونهای پس‌پراکنده‌شده یا الکترونهای ثانویه تولیدشده توسط باریکه، که از نمونه دور می‌شوند، به ترکیب موضعی و توپوگرافیکی نمونه بستگی دارد. این الکترون‌ها توسط آشکارساز الکترونی جمع می‌شوند، و با ترسیم این علامت آشکارساز به صورت تابعی از مکان باریکه تصویری شکل می‌گیرد. از این روش توانمند می‌توان در بیشتر نمونه‌ها استفاده کرد، ولی این روش نوعاً از

TEM تفکیک پایبندی (پیش از ۱ nm) دارد. شکل ۱ تصویر SEM از الکترودهای فلزی روی زیرلایه GaAs/AlGaAs است.

باریکه SEM را علاوه بر تصویرگیری، می توان با در معرض قرار دادن ماده حساس به الکترون برای ترسیم نقشهای ریز روی آن، که به روش لیتوگرافی باریکه الکترونی معروف است به کار برد. تفکیک نهایی (کوچکتر از ۱۰ nm) بسیار بالاست، ولی این روش فرایند کندی است، زیرا نقشها باید پیکسل به پیکسل ترسیم شوند. از این رو این روش در درجه اول در پژوهش، پیش نمونه سازی، و ساخت ماسک اپتیکی به کار می رود.

میکروسکوپی اپتیکی

میکروسکوپ اپتیکی، پیش نمونه ابزار کانونی است. بالاترین تفکیک دسترس پذیر، با استفاده از نور مرئی و روزنه عددی بزرگ ($\beta \approx 1$)، ۲۰۰ تا ۴۰۰ نانومتر است. از این رو میکروسکوپی اپتیکی، در تصویرگیری مستقیم تنها تا مرز حوزه نانومقیاس می رسد. ولی بسیاری از طیف نگاریهای اپتیکی که در فصل ۱۵ مورد بحث قرار گرفتند به گونه ای توفیق آمیز برای بررسی نانوساختارهای مجزا به کار گرفته شده اند. از جمله می توان پراکندگی کشسان نور، جذب، نورتایی و پراکندگی رامان را نام برد. اندازه گیریهای تک نانوساختار یا حتی تک مولکول تنها وقتی امکان پذیر است که شخص در میدان دید میکروسکوپ باشد.

در اینجا گسیل و جذب تابش الکترومغناطیسی توسط ماده را به اختصار به شیوه ای مرور می کنیم، که برای کاربرد در مورد نانوساختارها مناسب باشد. آهنگ گذار بین حالت آغازی i و حالت j با انرژی بالاتر j ناشی از جذب، در تقریب دو قطبی الکتریکی، با استفاده از قاعده طلایی فرمی به قرار زیر است

$$w_{i \rightarrow j} = (\frac{2\pi}{\hbar}) \left| \langle j | e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} | i \rangle \right|^2 \delta(\epsilon_j - \epsilon_i - \hbar\omega) \quad (5)$$

بنابراین گذار بین حالتی روی می دهد که عنصر ماتریسی دو قطبی غیر صفر داشته باشند و انرژیهای آنها به اندازه انرژی فوتون جذب شده، $\hbar\omega$ ، با هم تفاوت داشته باشد. به همین ترتیب آهنگ گسیل از حالت j به i با رابطه زیر داده می شود

$$w_{i \rightarrow j} = (\frac{2\pi}{\hbar}) \left| \langle j | e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} | i \rangle \right|^2 \delta(\epsilon_i - \epsilon_j + \hbar\omega) + (\frac{4\alpha\omega_{ji}^2}{c^2}) \left| \langle j | \mathbf{r} | i \rangle \right|^2 \quad (6)$$

که در آن $w_{ij} = (\epsilon_j - \epsilon_i)/\hbar$ و α ثابت ساختار ریز است. جمله های اول و دوم، به ترتیب، گسیلهای القایی و لحظه ای را نمایش می دهند.

از این رابطه ها می توان، با جمع زدن روی همه حالتیهای ممکن، توان کل $\sigma' E^2$ جذب شده از میدان

الکترومغناطیسی و به کمک آن بخش حقیقی رسانندگی را محاسبه کرد:

$$\sigma'(\omega) = (\pi e^2 \omega / V) \sum_{i,j} \left| \langle j | \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{r} | i \rangle \right|^2 [f(\epsilon_i) - f(\epsilon_j)] \delta(\epsilon_i - \epsilon_j - \hbar\omega) \quad (7)$$

که در آن $\hat{\mathbf{n}}$ بردار یکه‌ای است در سوی جهت میدان الکتریکی. جذب متناسب است با چگالی توأم همه حالت‌های آغازی و پایانی که از یکدیگر به اندازه انرژی $\hbar\omega$ فاصله دارند، با وزنی برابر عنصر ماتریسی دوقطبی و عمل‌های اشغال حالتها. تابعهای فرمی نشان می‌دهند که جذب تنها هنگامی رخ می‌دهد که حالت آغازی i پر و حالت پایانی j خالی باشد.

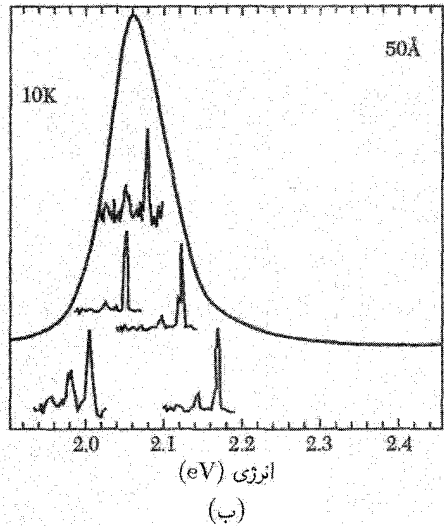
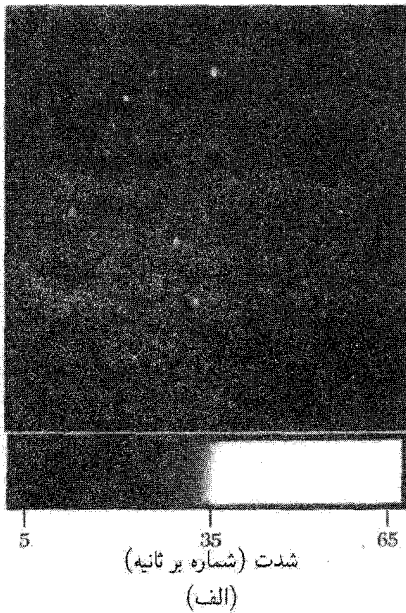
رابطه‌های بالا نشان می‌دهند که جذب و گسیل را می‌توان برای گمانه‌زنی طیفهای تراز انرژی الکترونی نانوساختارها به‌کار برد. به‌سادگی می‌توان اندازه‌گیریهایی روی مجموعه‌ای ماکروسکوپی از نانوساختارهای اسماً یکسان انجام داد، ولی آثار پهن‌شدگی ناهمگن ناشی از متفاوت بودن ویژگیهای نانوساختارهای مجزا مهم‌اند. به علاوه گاهی تنها چند تا یا حتی یک نانوساختار برای اندازه‌گیری در دسترس است. از این‌رو اندازه‌گیریهای اپتیکی‌ای که تک‌نانوساختارها را گمانه‌زنی می‌کنند ارزش ویژه‌ای یافته‌اند.

شکل ۵ نمونه‌ای از گسیل لحظه‌ای، یا فلوتورسان از نقطه‌های کوانتومی نیم‌رسانای مجزا را نشان می‌دهد. گسیل از پایتترین حالت انرژی در نوار رسانش به بالاترین حالت انرژی در نوار ظرفیت روی می‌دهد. پهنای خطوط گسیلی از تک‌نانو بلورها بسیار باریک‌اند، ولی این خطوط در گسترده‌ای از انرژیهای ناشی از تفاوت در اندازه، شکل، و محیط اطراف نانوبلورها توزیع شده‌اند. به همین دلیل است که اندازه‌گیری از یک مجموعه قله پهنی نشان می‌دهد که ویژگیهای تک‌نانوبلور را به‌دقت مشخص نمی‌کند.

دستگاههای کانونی اپتیکی، علاوه بر کار بستهایی که در گمانه‌زنی نانوساختارها دارند، برای ساخت قطعات میکرونی نیز به‌طور وسیع مورد استفاده قرار می‌گیرند. در فوتولیتوگرافی تصویری، نقشی را که روی یک نقاب قرار دارد، با استفاده از وسایل اپتیکی روی یک لایه محافظ حساس به نور تصویر می‌کنند. پس از در معرض نور قرار دادن و ظاهر کردن این لایه محافظ، نقش را با خوراندن یا رسوب از استنسیل این لایه روی ماده مورد نظر منتقل می‌کنند. لیتوگرافی اپتیکی اساس تولید انبوه دستگاههای میکروالکترونی و میکرومکانیکی است. با استفاده از طول‌موجهایی در UVی ژرف، قطعاتی با اجزای 100 nm به مرحله تولید صنعتی رسیده‌اند. با استفاده از نور UVی فرین یا حتی پرتوهای x می‌توان به پیشرفتهای بیشتری دست یافت، ولی ساخت و کنترل ماسکها و عناصر کانونی‌ساز بیش از پیش چالش‌برانگیز می‌شوند.

میکروسکوپی تونلی روبشی

معروفترین ابزار گمانه‌رویشی، میکروسکوپ تونلی روبشی (STM) است که به صورت طرح‌وار در شکل ۶ نشان داده شده است. اختراع این میکروسکوپ پیشرفت بزرگی در زمینه نانودانش بود. در STM، یک

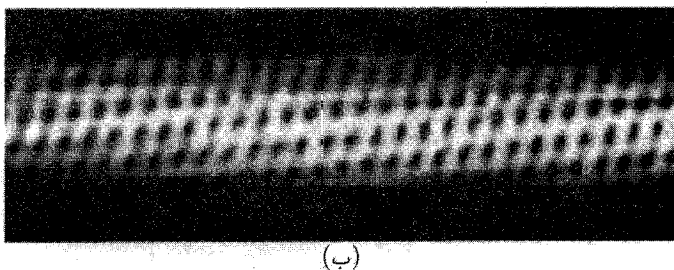
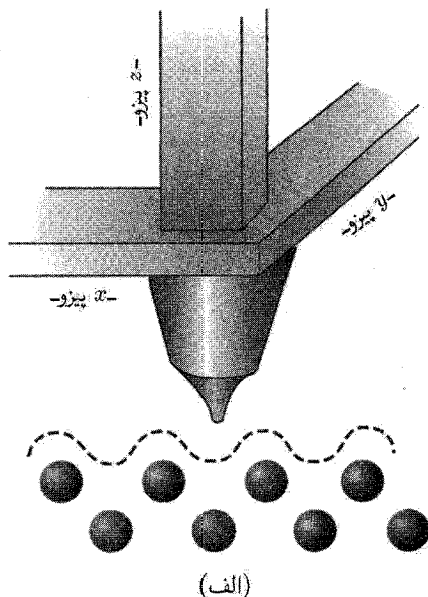


شکل ۵. (الف) تصویر فلوتورسان از نانوبلورهای CdSe مجزا که در دمای $T = 10\text{K}$ به طور رقیق روی سطحی توزیع شده‌اند. (ب) طیفهای فلوتورسان مربوط به تعدادی نانوبلورهای مجزای مختلف. در هر طیف، قله پراثری گذار اصلی بین پایستترین حالت الکترونی در نوار رسانش و پراثری‌ترین حالت در نوار ظرفیت است. قله‌های کم‌انرژیتر به گذارهایی مربوط می‌شوند که گسیل فونون LO را شامل می‌شوند. تفاوت در اندازه نانوبلورها و محیط الکترونی اطراف آنها مکان قله‌ها را انتقال می‌دهد. قله پهن طیفی است که برای مجموعه‌ای از نانوبلورهای اسماً یکسان به دست می‌آید.

نوک فلزی تیز، ترجیحاً با یک تک‌اتم در انتهای تیز آن، به فاصله یک نانومتری نمونه رسانای مورد بررسی آورده می‌شود. مکان نوک با استفاده از مواد پیزوالکتریکی، که در پاسخ به علامتهای الکتریکی دستگاه کنترل منبسط یا منقبض می‌شوند، با دقت پیکومتری کنترل می‌شود. ولتاژ بایاس V به نمونه اعمال می‌شود، و جریان تونلی بین نوک و نمونه اندازه‌گیری می‌شود. جریان با احتمال تونل‌زنی از گاف بین نوک و نمونه، متناسب است. احتمال تونل‌زنی به صورت نمایی به فاصله تونل‌زنی حساس است. در تقریب WKB داریم

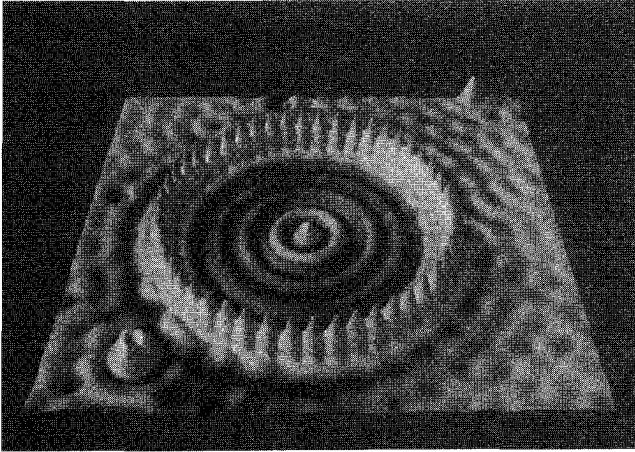
$$J \propto \exp(-2\sqrt{2m\phi/\hbar^2}z) \quad (۸)$$

که در آن z فاصله بین نوک و نمونه است، و ϕ ارتفاع مؤثر سد تونل‌زنی است. یک تغییر 10% در نانومتری در مکان نوک، به ازای پارامترهای نوعی، منجر به یک مرتبه بزرگی تغییر در J می‌شود.



شکل ۶. (الف) طرحواره میکروسکوپ تونلی روبشی (STM). هنگامی که STM در مد پس خور کار می‌کند، پیزوها نوک را روی نمونه می‌روبانند و جریان تونلی بین نوک و نمونه را ثابت نگاه می‌دارند. (ب) تصویر STM نانولوله کربنی.

وقتی STM در مد پس خور عمل می‌کند، I با تغییر ارتفاع نوک، z ، در مقدار ثابت نگه داشته می‌شود. در نتیجه STM توپوگرافی سطح را ردگیری می‌کند، و هر تغییر کوچک در ارتفاع سطح (کوچکتر از ۱ پیکومتر) را می‌توان آشکار کرد. این موضوع در شکل ۶، که تصویر STM نانولوله کربنی را نشان می‌دهد، نمایش داده شده است. از STM می‌توان برای جابه‌جا کردن و کنترل مکان تک‌تک اتمهای روی سطح نیز استفاده کرد. نمونه‌ای از این کار در شکل ۷ نشان داده شده است، که در آن با هل دادن اتمهای Fe روی سطح $Cu(111)$ توسط نوک STM، و قرار دادن آنها در یک حلقه، «حصار کوانتومی» ساخته شده است.



شکل ۷. یک «حصار کوانتومی» به شعاع متوسط 7.1 nm که با حرکت دادن 48 اتم Fe روی سطح $\text{Cu}(111)$ تشکیل شده است. اتمهای Fe، الکترونیهای حالتیهای سطحی را پراکنده می‌کنند و آنها را درون حصار محبوس می‌کنند. حلقه‌های موجود در حصار، توزیع چگالی الکترونها در سه حالت کوانتومی حصار است که نزدیک به انرژی فرمی‌اند. تصویربرداری از اتمها و آوردن آنها سر جای خود توسط میکروسکوپ تونلی روبشی در دمای پایین و خلأ بسیار بالا انجام شده است.

از I ، جریان تونلی STM، به صورت تابعی از ولتاژ بایاس می‌توان اطلاعات طیف نمایی و فضایی درباره حالتیهای کوانتومی نانو ساختار به دست آورد. مشتق جریان نسبت به ولتاژ در دمای صفر به قرار زیر است

$$dI/dV \propto \sum_j \left| \psi_j(\mathbf{r}_t) \right|^2 \delta(\epsilon_F + eV - \epsilon_j) \quad (9)$$

این کمیت متناسب است با چگالی حالتها به ازای انرژی الکترون تونل زن، $\epsilon_F + eV$ ، با وزنی برابر با چگالی احتمال الکترونی حالتیهایی که در \mathbf{r}_t مکان نوک STM، قرار دارند.

برای حصار کوانتومی، الکترونیهایی که در حالتیهای سطحی دوعدی Cu هستند، توسط اتمهای Fe بازتابانده می‌شوند، و مجموعه گسسته‌ای از حالتها درون حصار تولید می‌کنند. چین و شکنهای مشاهده شده در شکل ۷ از مدوله شدن چگالی احتمال $|\psi_j(\mathbf{r}_t)|^2$ مربوط به این حالتیهای جایگزیده با انرژی نزدیک به انرژی الکترون تونل زن ناشی می‌شود. تصویرهای حاصل از ولتاژهای بایاس متفاوت، ساختار فضایی حالتیهای کوانتیده را در انرژیهای متفاوتی نتیجه می‌دهند.

میکروسکوپ نیروی اتمی

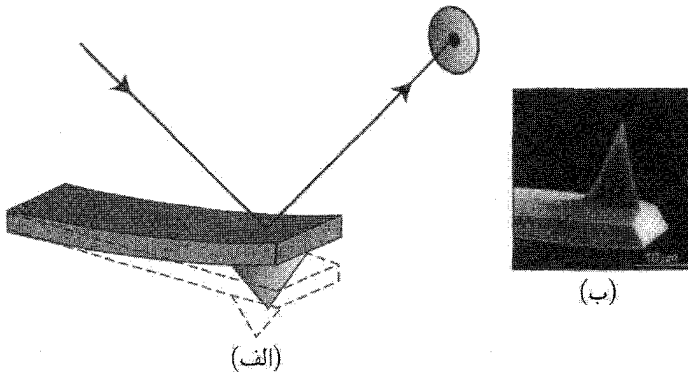
میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) اندکی پس از STM تکمیل شد. روش AFM بسیار انعطاف پذیرتر از STM است، و می‌توان از آن هم برای نمونه‌های رسانا و هم عایق استفاده کرد. ولی این روش نوعاً

تفکیک ضعیفتری دارد. AFM به جای جریان تونلی، نیروی بین نوک و نمونه را اندازه می‌گیرد. یک نوک تیز، همان گونه که در شکل ۸ نشان داده شده است، روی انتهای تیغه درگیر با ابعاد میلی‌متری قرار می‌گیرد. نیروی F که از طرف نمونه به نوک وارد می‌شود تیغه درگیر را به اندازه Δz منحرف می‌کند:

$$F = C\Delta z \quad (10)$$

که در آن C ثابت نیروی تیغه درگیر است. جابه‌جایی تیغه درگیر، به صورت تابعی از مکان نوک، اغلب با به‌کار بردن پشت تیغه به صورت بازتابنده برای باریکه لیزری (شکل ۸) اندازه گرفته می‌شود. حرکت بازتابنده مسیر باریکه لیزری را تغییر می‌دهد. این تغییر مسیر با استفاده از آرایه فوتودیودی آشکار می‌شود؛ جابه‌جاییهای در مقیاس پیکومتری را می‌توان به آسانی اندازه گرفت. با توجه به آنکه مقدار نوعی ثابت نیرو برابر است با $C = 1 \text{ N/m}$ ، نیروهایی در مقیاس 1 pN را می‌توان آشکار ساخت. تحت شرایط ویژه، نیروهایی کاملاً کوچکتر از 1 fN اندازه‌گیری شده‌اند.

ساده‌ترین مد عملکرد، مد تماسی است، که در آن نوک در تماس با سطح کشاننده و انحراف تیغه درگیر اندازه‌گیری می‌شود. این کار معیاری از توپوگرافی به دست می‌دهد، ولی می‌تواند به آن آسیب وارد کند. مدهای غیرتماسی یا متناوباً تماسی کمتر تهاجمی‌اند، این مد نیز می‌توانند اطلاعاتی درباره نیروهای بلندبرد بین نمونه و نوک ارائه دهند. در این روشها، یک نیروی وادارنده با دامنه F_w با بسامد نزدیک به بسامد تشدید تیغه درگیر به آن اعمال می‌شود، و آن را درست در بالای نمونه به نوسان وامی‌دارد. با مدل‌سازی تیغه درگیر به صورت نوسانگر هماهنگ ساده واداشته، دامنه پاسخ تیغه در بسامد ω از رابطه زیر به دست می‌آید



شکل ۸. (الف) طرحواره‌ای از نیروی اتمی (AFM). انحرافهای تیغه درگیر را فوتو آشکارسازی اندازه‌گیری می‌کند که مکان باریکه لیزری را، که از بالای تیغه باز می‌تابد، ثبت می‌کند. (ب) تصویر نوک AFM توسط SEM. شعاع انحنای مؤثر نوک می‌تواند کمتر از 10 nm باشد.

$$|z\omega| = \frac{F\omega}{C} \frac{\omega_0^2}{[(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + (\omega\omega_0/Q)^2]^{1/2}} \quad (11)$$

که در آن Q ، ضریب کیفیت نوسانگر، برابر است با نسبت انرژی ذخیره شده در تیغه درگیر به انرژی تلف شده در هر چرخه. توجه کنید که در تشدید $\omega = \omega_0$ ، پاسخ در مقایسه با بسامدهای پایین Q بار بزرگتر است، و این مسئله آشکارسازی نیروهای کوچک را ممکن می سازد.

پارامترهای مشخصه تیغه های درگیر نوسان کننده به هر نیرویی که بین نوک و نمونه وجود داشته باشد، حساس اند. این نیروها می توانند وان در والسی، الکتروستاتیکی، مغناطیسی، یا بسیاری نیروهای دیگر باشند. برهم کنش، بسامد تشدید ω_0 و/یا Q را تغییر می دهد. این تغییر ثبت می شود و برای ساختن تصویر به کار می رود. برای مثال، در تصویرگیری به روش مد تقه ای، نوک به هنگام قرار گرفتن در نزدیکترین وضعیت در چرخه نوسان به سطح «تقه» می زند، این امر هم باعث انتقال بسامد و هم اتلاف اضافی می شود. قطعه نانولوله ای که در شکل ۳ نشان داده شد، در مد تقه ای تصویر برداری شده است.

روش مهم دیگر، میکروسکوپی نیروی مغناطیسی (MFM) است که به اختصار در فصل ۱۲ توصیف شد. نوک با ماده ای مغناطیسی اندود می شود، به گونه ای که گشتاور مغناطیسی μ عمود بر سطح نمونه داشته باشد. در نتیجه نوک با نیروی ناشی از تغییرات در میدانهای مغناطیسی موضعی ایجاد شده توسط نمونه مواجه می شود

$$F(z_0 + \Delta z) = F(z_0) + \left. \frac{\partial F}{\partial z} \right|_{z=z_0} \Delta z = \mu \left. \left(\frac{\partial B}{\partial z} \right) \right|_{z=z_0} \Delta z + \mu \left. \left(\frac{\partial^2 B}{\partial z^2} \right) \right|_{z=z_0} \Delta z \quad (12)$$

که در آن z_0 مکان تعادل نوک و Δz جابه جایی در حین نوسان است. جمله $\mu(\partial B/\partial z)$ در تیغه درگیر انحراف استاتیکی ایجاد می کند، ولی بسامد نوسان یا میرایی را تغییر نمی دهد. از سوی دیگر، جمله $\mu(\partial^2 B/\partial z^2)\Delta z$ به دلیل خطی بودن بر حسب جابه جایی Δz تیغه درگیر، به شکل تغییر C ، در ثابت نیروست. در نتیجه بسامد تشدید تیغه درگیر را انتقال می دهد. با نظارت بر این انتقال بسامد، یک تصویر ایجاد می شود. شیب میدانهای نیروی موضعی دیگر را می توان به روش مشابهی اندازه گرفت.

دیگر روشهای گمانه رویی بسیاری نیز وجود دارند. میکروسکوپی اپتیکی روبشی میدان نزدیک (NSOM) با استفاده از روزه زیر طول موج (با طول موج کمتر) که فوتونها از طریق آن «تونل» می زنند، تصویرهای اپتیکی ای با تفکیک کمتر از حد پراش ایجاد می کند. میکروسکوپی ظرفیت رویی (SCM) تغییرات ظرفیت بین نوک و نمونه را به صورت تابعی از مکان اندازه می گیرد. استفاده از این خانواده رو به رشد روشها، برای مشخصه یابی اشیائی در گستره مولکولهای مجزا تا ترازنیستورهای Si در مدارهای مجتمع رو به افزایش دارد.

ساختر الکترونی دستگاههای ۱D

حالت‌های الکترونی کوانتیده نانو ساختارها، ویژگی‌های الکتریکی و اپتیکی آنها را تعیین می‌کنند، و برویگیهای فیزیکی و شیمیایی نیز اثر می‌گذارند. برای توصیف این حالتها، برای شروع به ساختار نواری ماده حجیم می‌پردازیم. تقریب جرم مؤثر را برای پاشیدگی الکترونی یک نوار خاص به کار می‌بریم و توابع موج مربوط را به صورت امواج تخت در نظر می‌گیریم. این کارها برای ساده‌سازی اند؛ نوارها همواره سهموی نیستند و ویژه حالت‌های واقعی، حالت‌های بلوخ‌اند نه امواج تخت. ولی این فرضها ریاضیات مسئله را بسیار ساده‌تر می‌کنند و به لحاظ کیفی (و اغلب کمی) صحیح‌اند. از برهم‌کنش کولنی بین الکترون‌ها نیز اغلب چشم‌پوشی می‌کنیم. ولی همان‌گونه که بعداً در این فصل توضیح داده خواهد شد، موارد زیادی در فیزیک نانو ساختارها وجود دارد که در آنها از برهم‌کنش‌های الکترون-الکترون نمی‌توان چشم‌پوشید.

زیرنوارهای یک بعدی (۱D)

جامد نانومقیاسی با هندسه یک سیم در نظر بگیرد. ابعادش در راستاهای x و y نانومقیاسی‌اند، ولی در جهت z پیوسته است. انرژیها و ویژه حالت‌های چنین ترسیمی از این قرارند

$$\epsilon = \epsilon_{i,j} + \hbar^2 k^2 / 2m; \quad \psi(x, y, z) = \psi_{i,j}(x, y) e^{ikz} \quad (13)$$

که در آن i و j اعدادی کوانتومی‌اند که ویژه حالتها را در صفحه x, y شاخص‌گذاری می‌کنند و k بردار موج در جهت z است. برای سیم مستطیلی که در شکل ۹ نشان داده شده است، $\epsilon_{i,j}$ و $\psi_{i,j}(x, y)$ همان انرژیها و ویژه حالت‌های ذره در یک جعبه‌اند که در فصل ۶ مورد بررسی قرار گرفت. رابطه پاشیدگی شامل رشته‌ای از زیرنوارهای ۱D است، که هر یک متناظر با حالت انرژی عرضی متفاوت $\epsilon_{i,j}$ است. چگالی کل حالت‌های الکترونی $D(\epsilon)$ برابر است با مجموع چگالی حالت‌های زیرنوارهای مجزا:

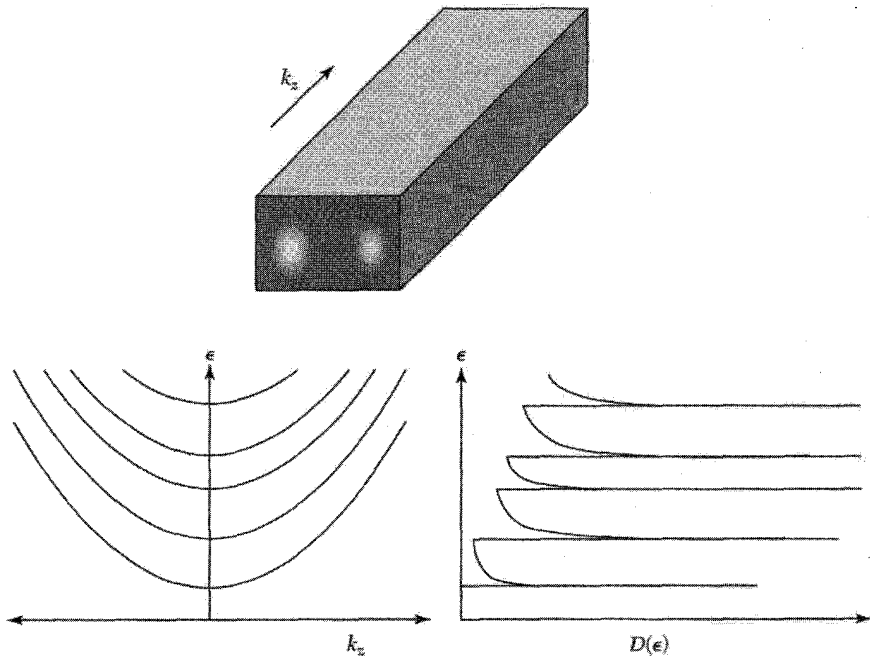
$$D(\epsilon) = \sum_{i,j} D_{i,j}(\epsilon) \quad (14)$$

که در آن $D_{i,j}(\epsilon)$ با رابطه زیر داده می‌شود

$$D_{i,j}(\epsilon) = \frac{dN_{i,j}}{dk} \frac{dk}{d\epsilon} = (2)(2) \frac{L}{2\pi} \left[\frac{m}{2\hbar^2(\epsilon - \epsilon_{i,j})} \right]^{1/2} = \frac{4L}{h\nu_{i,j}} \quad \epsilon > \epsilon_{i,j} \quad (15)$$

$$= 0 \quad \epsilon < \epsilon_{i,j}$$

اولین ضریب دو در عبارت وسطی ناشی از واگنی اسپینی است و دومی از لحاظ کردن مقادیر مثبت و منفی k . در عبارت طرف راست $\nu_{i,j}$ سرعت الکترون در زیرنوار i, j با انرژی جنبشی $\epsilon - \epsilon_{i,j}$

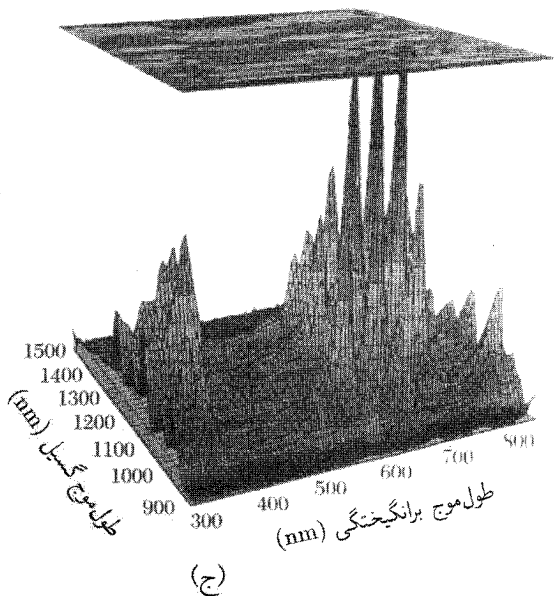
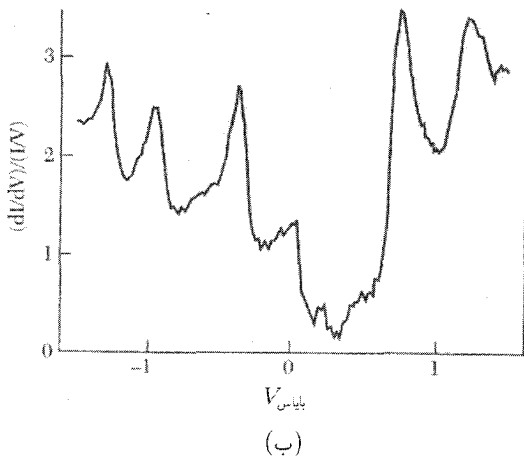
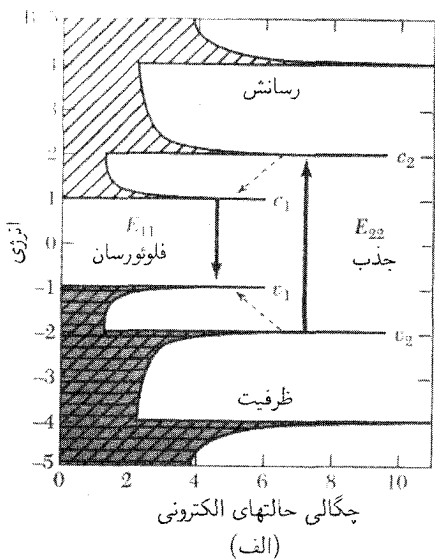


شکل ۹. طرحوارهٔ سیم شبه یک‌بعدی مستطیلی همراه با رابطه‌های پاشیدگی و چگالی حالت‌های زیرنوارهای ۱D. قله‌های چگالی حالتها در آستانهٔ زیرنوارها تکینگیهای وان هوف نامیده می‌شوند. چگالی احتمال برای حالت $i = 2$ و $j = 1$ به صورت پولک خاکستری در مقطع سیم نشان داده شده است.

است. توجه کنید که چگالی حالتها در آستانهٔ هر زیرنوار به صورت $(\epsilon - \epsilon_{i,j})^{-1/2}$ واگرا می‌شود. اینها تکینگیهای وان هوف نام دارند. این رفتار نقطهٔ مقابل رفتار در سه بعد است، که در آن $D(\epsilon)$ در انرژیهای کم صفر می‌شود (فصل ۶)، و در دو بعد که $D(\epsilon)$ در هر زیرنوار ۲D یک گام به اندازهٔ ثابت بالا می‌رود (فصل ۱۷ مسئلهٔ ۳).

طیف نمایی تکینگیهای وان هوف

تکینگیهای وان هوف که در رابطهٔ (۱۵) توصیف شدند بر ویژگیهای الکتریکی و اپتیکی دستگاههای ۱D اثر می‌گذارند. در اینجا، نانولولهٔ کربنی نیم‌سانا را مورد بحث قرار می‌دهیم که ساختار نواری آن در مسئلهٔ ۱ محاسبه و در شکل ۱۰ (الف) نشان داده شده است. تکینگیهای وان هوف، همان گونه که در شکل ۱۰ (ب) نشان داده شده است، توسط طیف نمایی تونلی روبشی دیده می‌شوند. قله‌های رسانندگی دیفرانسیلی، که طبق رابطهٔ (۹) با چگالی حالتها متناسب است، در ولتاژهای بایاس متناظر با انرژیهای این تکینگیها مشاهده می‌شوند.



شکل ۱۰. (الف) چگالی حالتها در نانولوله کربنی نیمرسانا به صورت تابعی از انرژی تکینگیهای وان هوف در طیف تونلی STM نانولوله در (ب) نشان داده شده است. در (ج) شدت گسیل به صورت تابعی از طول موج گسیل و طول موج برانگیختگی ترسیم شده است. قله‌های شدت هنگامی مشاهده می‌شوند که انرژیهای جذب و گسیل متناظر با مقدارهایی باشند که در نمودار (الف) نشان داده شده است. قله‌های متفاوت متناظرند با نانولوله‌ها با شعاعها و دستوارگی (کایرالیته) (راستگردی و چپگردی)های متفاوت.

جذب و گسیل از نانولوله‌های نیم‌رسانا نیز، به دلیل وابستگی آنها به چگالی حالت‌های آغازی و پایانی توسط روابط (۵) تا (۷)، تحت سلطهٔ این تکنیکها قرار دارند. در شکل ۱۰ (ج) شدت فوتونورتایی مجموعه‌ای از نانولوله‌های کربنی به صورت تابعی از طول موج نور برانگیزاننده و گسیل شده نشان داده شده است. جذب نور فرودی هنگامی تقویت می‌شود که انرژی با $\epsilon_{v2} - \epsilon_{c2}$ ، یعنی اختلاف انرژی بین دومین تکنیکی وان هوف در نوارهای رسانش و ظرفیت، جور باشد. الکترونها و حفره‌ها به سرعت به ته نخستین زیرنوار واهلش می‌کنند، و در آنجا باز ترکیب می‌شوند و با انرژی $\epsilon_{c1} - \epsilon_{v1}$ نورتابی ایجاد می‌کنند. بنابراین قله‌ها هنگامی مشاهده می‌شوند که نوره‌های گسیل و جذب شده همزمان، به ترتیب، با انرژیهای بین نخستین و دومین تکنیکهای وان هوف جور باشند. قله‌های متفاوت شدت گسیل در شکل متناظرند با نانولوله‌های با قطرهای و دستوارگیهای متفاوت.

فلزهای ۱D - برهم‌کنشهای کولنی و جفت‌شدگیهای شبکه‌ای

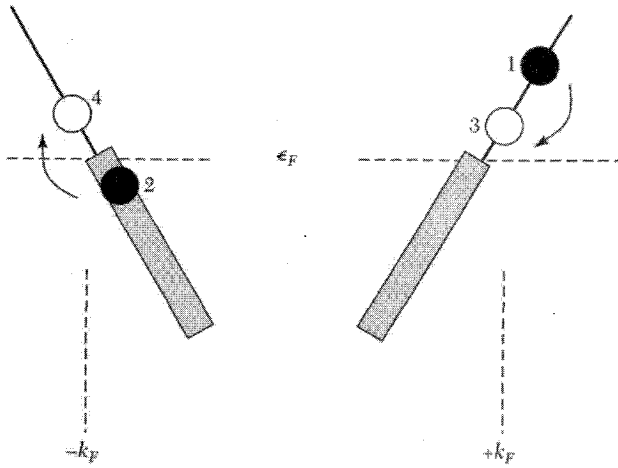
در فلز شبه‌یک‌بعدی، الکترونها زیرنوارهای ۱D مجزا را پر می‌کنند، و چگالی الکترونی انرژی فرمی و تعداد کل زیرنوارهای اشغال شده را تعیین می‌کند. در فلز اکیداً ۱D، تنها یک زیرنوار (با واگنی اسپینی) اشغال می‌شود. در این مورد، اگر n_{1D} حامل در واحد طول موجود باشد، داریم

$$n_{1D} = 2k_F/\pi \quad (16)$$

سطح فرمی فلز ۱D، همان گونه که در شکل ۱۱ نشان داده شده است، تنها شامل دو نقطه در $+k_F$ و $-k_F$ است. این سطح کاملاً با سطح مربوط به فلزهای الکترون آزاد ۲D و ۳D که به ترتیب کره و دایره است، فرق می‌کند. در ادامه دو پیامد این سطح فرمی غیرعادی را مورد بحث قرار می‌دهیم. برهم‌کنشهای کولنی باعث پراکندگی بین الکترونهای نزدیک به انرژی فرمی می‌شوند. در فلزهای ۳D پراکندگی در نزدیکی ϵ_F توسط محدودیت ناشی از ترکیب پایستگی انرژی/تکانه و اصل تردپاؤلی قویاً سرکوب می‌شود. در انرژی ϵ که نسبت به ϵ_F اندازه‌گیری شده باشد، داریم $(1/T_0)(\epsilon/\epsilon_F)^2 \approx 1/T_{ee}$ ، که در آن $1/T_0$ آهنگ پراکندگی کلاسیکی است. این آهنگ پراکندگی، با استفاده از اصل عدم قطعیت، عدم قطعیتی به قرار زیر در انرژی الکترون ایجاد می‌کند:

$$\delta\epsilon(3D) \approx \hbar/T_{ee} \sim (\hbar/T_0)(\epsilon/\epsilon_F)^2 \quad (17)$$

با کوچک شدن انرژی (که نسبت به ϵ_F اندازه گرفته می‌شود)، عدم قطعیت در انرژی به صورت توان دوم ϵ به صفر می‌گراید. بنابراین تضمین می‌شود که اگر به اندازه کافی به ϵ_F نزدیک باشیم، عدم قطعیت $\delta\epsilon$ در مقایسه با ϵ کوچک خواهد بود. این امر اطمینان می‌دهد که شبه‌ذره‌های نزدیک سطح فرمی خوش‌تعریف‌اند.



شکل ۱۱. ساختار الکترونی فلز ۱D نزدیک انرژی فرمی. سطح فرمی شامل دو نقطه در $\pm k_F$ است. پراکندگی الکترونها از حالت‌های ۱ و ۲ به حالت‌های خالی ۳ و ۴، تا جایی که اختلاف انرژی بین ۱ و ۳ و بین ۲ و ۴ برابر باشد، انرژی را پایسته نگه می‌دارد. همزمان تکانه پایسته است، زیرا انرژی برحسب k به‌طور موضعی خطی است.

مورد یک‌بعدی در شکل ۱۱ نشان داده شده است. در این مورد پایستگی انرژی و تکانه معادل هم‌اند، برای ϵ کوچک، انرژی برحسب تغییر تکانه $\Delta k = k - k_F$ به‌طور موضعی خطی است:

$$\epsilon \cong (\hbar^2 k_F / m) \Delta k \quad (18)$$

پایستگی انرژی، با مراجعه به شکل ۱۱، مستلزم آن است که در الکترونی که از حالت ۱ با انرژی ϵ به حالت ۳ پراکنده می‌شود، باید به‌طور همزمان پراکندگی یک الکترون از حالت ۲ به ۴ روی دهد. تنها قید موجود آن است که انرژی حالت پایانی ۳ باید مثبت و کمتر از ۴ باشد. این امر ضریب کاهش $1/T_{ee} \sim (1/T_0)(\epsilon/\epsilon_F)$ را ایجاد می‌کند، و از اصل عدم قطعیت داریم

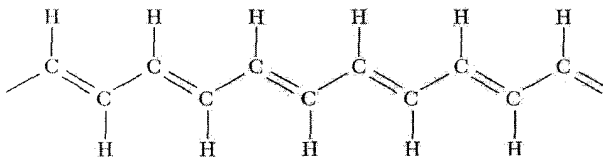
$$\delta\epsilon(1D) = \hbar/\tau_{ee} \sim (\hbar/T_0)(\epsilon/\epsilon_F) \quad (19)$$

با توجه به آنکه عدم قطعیت برحسب ϵ خطی است، هیچ تضمینی وجود ندارد که با $\epsilon \rightarrow 0$ ، $\delta\epsilon$ کوچکتر از ۴ باشد. در نتیجه فرض بنیادی موجود در نظریه مایع فرمی، مبنی بر اینکه شبه‌ذره‌های با برهم‌کنش ضعیف در $\epsilon \rightarrow 0$ وجود دارند، در ۱D تضمین شده نیست. در واقع باور بر آن است که حالت پایه گاز الکترونی ۱D برهم‌کنش‌کننده مایع فرمی نیست، بلکه مایع لوتینگر است که برانگیختگیهای کم‌انرژی آن ماهیت جمعی دارند. برانگیختگیها بیشتر به فونونها یا پلاسْمونها، یعنی حرکت جمعی تعداد زیادی شیء

شبهه‌اند تا الکترونهاى منزوى‌اى كه مستقل از همسايه‌هاى خود حركت مى‌كنند. اين ماهيت جمعى چند اثر دارد. براى نمونه، تونل‌زنى به درون فلز ۱D در انرژى كم سركوب مى‌شود، زيرا الکترون تونل‌زن بايد مدهاى جمعى را برانگيزد. على‌رغم اين موضوع، تصوير الکترون مستقل براى گاز الکترونى ۱D كماكان تقريب مفيدى است. اين تصوير در توصيف اغلب آزمايشهاى كه روى دستگاهاى ۱D واقعى صورت گرفته، نه همه آنها، موفق بوده است، و ادامه مطلب را در همين تصوير ارائه خواهيم كرد.

ويژگى غيرمعمولى دوم فلزهاى ۱D آن است كه اين فلزها در مقابل اختلالهاى با بردار موج $2k_F$ ناپايدارند. براى مثال، واپيچش شبكه با اين بردار موج، يك گاف نواری در طيف الکترونى باز مى‌كند و فلز را به عايق بدل مى‌سازد. اين ناپايدارى پايرلز است كه در فصل ۱۴ به تفصيل بررسى شد. اين اثر به ويژه در پليمرهاى رساناى ۱D نظير پلى‌استيلن (شكل ۱۲) مهم است. اين پليمر به ازاي هر فاصله بين اتمى كرن، a ، يك الکترون رسانشى دارد، بنا بر اين از رابطه (۱۶) داريم $k_F = \pi/2a$. پلى‌استيلن در غياب واپيچشها يك نوار نيمه پر دارد و فلز است. ولى يك واپيچش شبكه با $2k_F = \pi/a$ متناظر با طول موج $2a$ گافى در انرژى فرمى باز مى‌كند. اين وضعيت متناظر است با ديمرى شدن شبكه. اين ديمرشدگى راستاى زنجيره پيوندهاى متناوباً يگانه و دوگانه ايجاد مى‌كند و پلى‌استيلن را به نيمرساناى با گاف نواری 1.5eV تبديل مى‌كند.

از پلى‌استيلن و بسيارهاى نيمرساناى مربوط مى‌توان ترانزيستورهاى اثر ميدان، ديودهاى نورگسيل و قطعات ديگر نيمرسانا را ساخت. اين مواد را همچنين مى‌توان به روش شيميايى آلايش داد و رفتار فلزى با رسانندگيهاى قابل قياس با فلزهاى متداول ساخت. ولى اين مواد انعطاف پذيرى مكانيكى و سهولت پردازش مشخصه بسيارها را حفظ مى‌كنند. كشف اين مواد به انقلابى در الکترونيك پلاستيك انعطاف پذير منجر شده است. واپيچش پايرلز در پليمرها به اين دليل بزرگ است كه ستون اصلى آنها شامل تك زنجيره‌اى اتمى است، كه مى‌تواند به راحتى واپيچش يابد. دستگاهاى ۱D ديگر نظير نانولوله‌ها و نانوسيمها بسيار محكمترند، و گذار پايرلز در دماهاى تجربى مناسب، در آنها مشاهده نمى‌شود.



شكل ۱۲. ساختار پلى‌استيلن. شبكه به دليل واپيچش پايرلز، ديمرى مى‌شود، كه در آن اتمهاى كرنى كه با پيوندهاى دوگانه به هم اتصال دارند، به يكديگر نزديكتر از اتمهاى اتمى اند كه با پيوند يگانه به هم متصل اند. واپيچش پايرلز، گاف نيمرساناى تقريباً برابر 1.5eV باز مى‌كند.

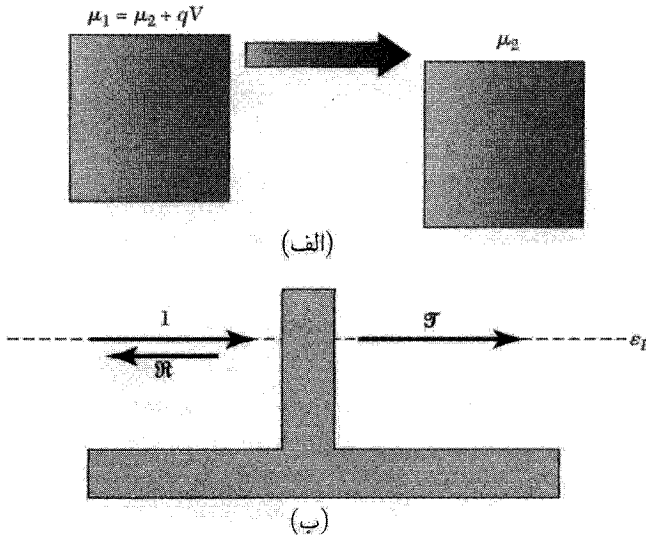
ترابرد الکتريکي در ۱D کوانتش رسانش و فرمول لاندائر

هر کانال ۱D برای ولتاژ معيني که به دو سر آن اعمال شود، برای حمل جريان ظرفيتي منتهای دارد. بنابراین رسانندگي کانال، حتی اگر هيچ پراکندگي ای در آن وجود نداشته باشد، منتهای است. سيمي را در نظر بگيريد که یک زيرنوار اشغال شده دارد و دو منبع بزرگتر را که اختلاف ولتاژ V بين آنها برقرار است مطابق شکل ۱۳ به هم متصل می کند. حالتهای μ_1 و μ_2 چپ و راست می شوند، که در آن $qV = \mu_1 - \mu_2 = -e$ و برای الکترونها، $+e$ برای حفره هاست. در نتیجه جريان خالصی که به دليل فزونی Δn در چگالی حاملان راست رو در کانال شارش می کند برابر است با

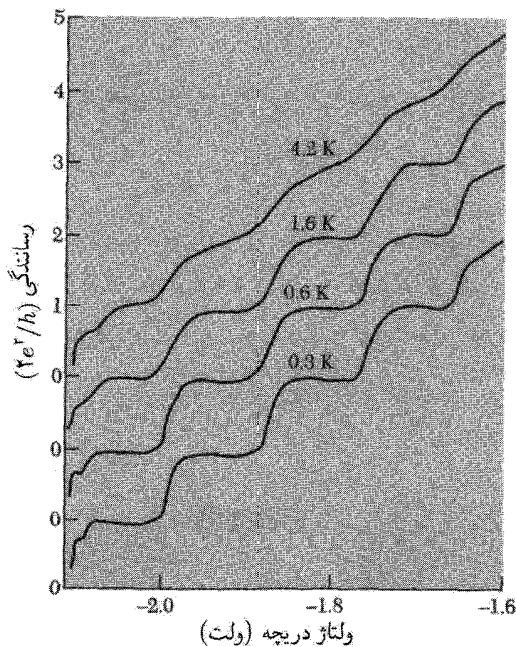
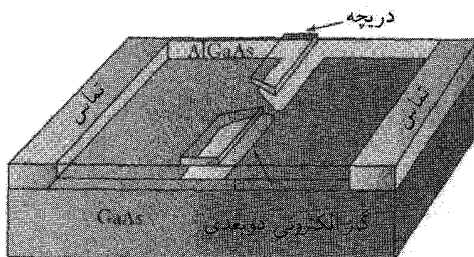
$$I = \Delta n q v = \frac{D_R(\epsilon) q V}{L} q v = \frac{2}{h v} v q^2 V = \frac{2 e^2}{h} V \quad (20)$$

که در آن $D_R(\epsilon)$ ، چگالی حاملان راست رو، برابر $1/2$ چگالی کل حالتهاست که در (۱۵) داده شده است. شایان توجه است که در ۱D سرعت دقیقاً با چگالی حالتهای حذف شده، جريانی ایجاد می شود که تنها به ولتاژ و ثابتهای بنيادی بستگی دارد. در نتیجه رسانش دو پایانه ای I/V و مقاومت V/I برابرند با

$$G_Q = 2e^2/h; \quad R_Q = h/2e^2 = 12,906 \text{ k}\Omega \quad (21)$$



شکل ۱۳. (الف) جريان خالصی که به ازای اختلاف ولتاژ بایاس اعمال شده $V_1 - V_2$ ، بين دو منبع منتشر می شود. (ب) نمایش طرحوار احتمال تراکسیل T و احتمال بازتاب R از سد به کانال، که در آن $T + R = 1$.



شکل ۱۴. کوانتس رساندگی در یک کانال کوتاه که به گونه الکتروستاتیکی در ساختار چندگن GaAs/AlGaAs در دماهای متفاوت تعریف شده است. ولتاژ منفی دریچه V_g که به دریچه‌های فلزی در سطح نمونه اعمال می‌شود، گاز الکترونی دوبعدی زیرین را از حاملها تهی کرده و کانال باریکی ایجاد می‌کند. این کانال در $V_g = -2.17$ کاملاً تهی از حاملهاست. با افزایش V_g ، زیرنوارهای ۱D یک‌به‌یک اشغال می‌شوند، و هر زیرنوار جدید رساندگی را برابر $2e^2/h$ افزایش می‌دهد.

کانال تراکسیلنده کامل یک‌بعدی رسانش متناهی دارد که مقدار آن برابر نسبت ثابتهای بنیادی است. این نسبت را کوانتوم رساندگی G_Q ؛ و وارون آن را کوانتوم مقاومت R_Q می‌نامند. این کمیتها که در اینجا در تقریب جرم مؤثر به دست آمدند برای یک نوار ۱D با هر پاشیدگی اختیاری صادق‌اند. کوانتس رساندگی به گونه‌ای مبالغه‌آمیز در داده‌های شکل ۱۴ نمایش داده شده است. یک کانال شبیه

۱D کوتاه بين دو ناحیه متشکل از گاز الکتروني ۲D در ساختار چندگن GaAs/AlGaAs تشکیل شده است. با افزایش چگالی حاملهاي کانال، رسانندگي با پله‌هاي گسسته به ارتفاع $2e^2/h$ اضافه می‌شود. هر پله متناظر است با اشغال یک زیرنوار ۱D اضافی در سیم. کوانتس رسانندگي در پلهای با مقياس اتمی بين فلزهای ماکروسکوپی نیز دیده می‌شود.

اگر کانال کاملاً رسانا نباشد، رسانندگي کل برابر است با کوانتوم رسانندگي ضربدر احتمال $\mathcal{T}(\epsilon_F)$ برای تراگسیل الکترون از کانال (شکل ۱۳):

$$G(\epsilon_F) = (2e^2/h)\mathcal{T}(\epsilon_F) \quad (22)$$

این معادله غالباً فرمول لاندائر نامیده می‌شود. برای دستگاه شبه ۱D با کانالهای چندگانه سهمهای کانالها را جمع می‌کنیم، زیرا رسانندگیهای موازی با هم جمع می‌شوند:

$$\mathcal{T}(\epsilon_F) = \sum_{i,j} \mathcal{T}_{i,j}(\epsilon_F) \quad (23)$$

که در آن i و j ویژه حالتهاي عرضی را مشخص می‌کنند. برای مثال برای N کانال کاملاً تراگسیلیده موازی هم، همانند داده‌های شکل ۱۴، $\mathcal{T} = N$.

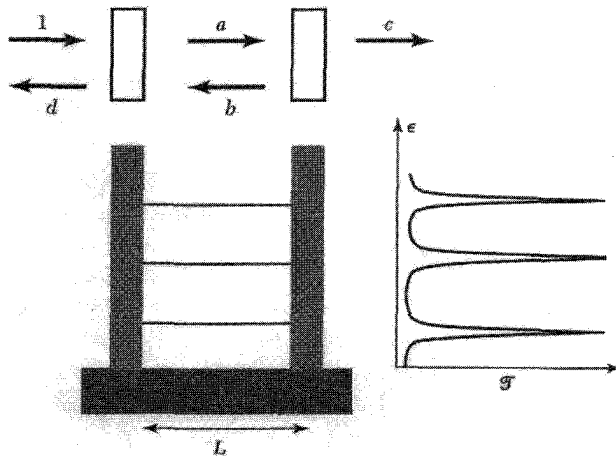
در دماها و بایاسهای متناهی، توزیع انرژی فرمی-دیراک f مربوط به الکترونها در سیمهای چپ و راست نیز باید منظور شوند:

$$I(\epsilon_F, V, T) = (2e/h) \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon [f_L(\epsilon - eV) - f_R(\epsilon)] \mathcal{T}(\epsilon) \quad (24)$$

جریان خالص به سادگی برابر است با انتگرال تفاوت بين جریانهای راسترو و چپرو روی همه انرژیها. فرمول لاندائر (۲۲) مقاومت یک دستگاه را مستقیماً به ویژگیهای تراگسیلی کانال مربوط می‌کند. مقاومت مورد یک کانالی را به این صورت بازنویسی می‌کنیم

$$R = \frac{h}{2e^2} \frac{1}{\mathcal{T}} = \frac{h}{2e^2} \frac{\mathcal{T} + (1 - \mathcal{T})}{\mathcal{T}} = \frac{h}{2e^2} + \frac{h}{2e^2} \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{T}} \quad (25)$$

که در آن $\mathcal{R} = 1 - \mathcal{T}$ ضریب بازتاب است. مقاومت قطعه برابر است با مجموع اولین جمله، یعنی مقاومت تماسی کوانتیده به اضافه دومین جمله، یعنی مقاومت ناشی از پراکندگی از سدهای درون کانال. جمله دوم در رسانای کامل صفر است. در ادامه به کاربرد فرمول لاندائر در مورد مسئله دو سد متوالی خواهیم پرداخت. این مسئله را در هر دو حد انتشار همدوس و ناهمدوس الکترون بين سدها بررسی خواهیم کرد.



شکل ۱۵. تونل زنی تشدید از دو سد همانند متوالی به فاصله L از یکدیگر. نمودار بالایی دامنه‌های تراگسیل بین دو سد و خارج از آنها را برای موج فرودی با دامنه واحد نشان می‌دهد. تشدیدهای تراگسیل به ازای انرژیهای حالتی شبه مقید بین دو سد نشان داده شده‌اند.

دو سد متوالی-تونل زنی تشدید

دو سد متوالی را، مطابق شکل ۱۵، با دامنه‌های تراگسیل/بازتاب t_1, r_1 و t_2, r_2 در نظر بگیرید که از یکدیگر به فاصله L باشند. این دامنه‌ها مختلط‌اند:

$$t_j = |t_j|e^{i\varphi_{tj}}, \quad r_j = |r_j|e^{i\varphi_{rj}} \quad (26)$$

برای محاسبه احتمال تراگسیل از کل ساختار دو سدی، باید دامنه تراگسیل متناظر را محاسبه کنیم. برای موجی که با دامنه a ، از سمت چپ فرود می‌آید، دامنه‌هایی که در شکل ۱۵ تعریف شده‌اند از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند

$$a = t_1 + r_1 b; \quad b = ar_2 e^{i\varphi}; \quad c = at_2 e^{i\varphi/2} \quad (27)$$

که در آن $\varphi = 2kL$ فازی است که الکترون با انرژی جنبشی $\hbar^2 k^2 / 2m$ با انتشار به اندازه $2L$ در یک مسیر رفت و برگشت بین سدها انباشته می‌کند. با ترکیب این رابطه‌ها، برای دامنه تراگسیلیده به دست می‌آوریم:

$$c = \frac{t_1 t_2 e^{i\varphi/2}}{1 - r_1 r_2 e^{i\varphi}} \quad (28)$$

بنابراین احتمال تراگسیل از سد دوگانه برابر است با

$$\mathcal{J} = |c|^2 = \frac{|t_1|^2 |t_2|^2}{1 + |r_1|^2 |r_2|^2 - 2|r_1||r_2| \cos(\varphi^*)} \quad (29)$$

که در آن $\varphi^* = 2kL + \varphi_{r1} + \varphi_{r2}$.

این رابطه در شکل ۱۵ ترسیم شده است. توجه کنید که انباشتگی فاز φ^* در مسیر رفت و برگشت انتقال فازهای وابسته به بازتاب از سدها را نیز شامل می‌شود.

احتمال تراگسیل (۲۹) وقتی $\cos(\varphi^*)$ به یک نزدیک شود به مقدار زیادی تقویت می‌شود، زیرا مخرج کسر کوچک می‌شود. این وضعیت برای شرط تشدید زیر روی می‌دهد

$$\varphi^* = 2kL + \varphi_{r1} + \varphi_{r2} = 2\pi n \quad (30)$$

که در آن n عدد صحیح است. این رابطه ویژگی عمومی امواج است و از تداخل سازنده تعداد زیادی مسیر درون نمونه ناشی می‌شود. این موضوع را با بازنویسی رابطه (۲۸) و با استفاده از بسط سری می‌توان به سادگی دریافت:

$$c = t_1 t_2 e^{i\varphi/2} / (1 - r_1 r_2 e^{i\varphi}) = t_1 t_2 e^{i\varphi/2} [1 + r_1 r_2 e^{i\varphi} + (r_1 r_2 e^{i\varphi})^2 + \dots] \quad (31)$$

مرتبه m در این بسط مطابق است با مسیر m رفت و برگشت بین سدها این مسیرها در تشدید به طور همفاز با هم جمع می‌شوند و به تراگسیل قویاً تقویت شده منجر می‌شوند. حالت خاصی را در نظر بگیرید که دو سد یکسان باشند: $t_1 = t_2$. در نتیجه داریم

$$\mathcal{J}(\varphi^* = 2\pi n) = |t_1|^4 (1 - |r_1|^2)^{-2} = 1 \quad (32)$$

تراگسیل از ساختار سد دوگانه متقارن در تشدید برابر ۱ است، حتی اگر تراگسیل از هر یک از سدهای جداگانه کم باشد. این وضعیت را تونل‌زنی تشدید می‌نامند. مخرج (۲۹) در وضعیت غیرتشدید برای سدهای کدر (غیرشفاف) از مرتبه ۱ است و تراگسیل تقریباً برابر حاصلضرب ضریبهای تراگسیل هر یک از دو سد متوالی است: $\mathcal{J} \sim |t_1|^2 |t_2|^2$.

شرط تشدید $\varphi^* = 2\pi n$ با انرژیهای حالت‌های الکترونی شبه‌مقید محبوس‌شده بین دو سد متناظر است. برای دیوارهای بسیار کدر، این درست همان شرط کوانتس زده در جعبه است: $kL = \pi n$. این شرط تونل‌زنی تشدید را برای مورد یک‌بعدی به دست آوردیم، ولی این نتیجه‌ای عام است. تراگسیل از یک دستگاه الکترونی محبوس‌شده به ازای انرژیهای متناظر با ترازهای انرژی حالت‌های مقید حبس‌شده

قویاً تقویت می‌شود. این امر از عبارت (۹) برای تونل‌زنی STM نیز که در آن حالت‌های شبه‌مقید قله‌هایی در رسانندگی دیفرانسیلی ایجاد می‌کنند، آشکار است.

در مورد سدهای کدر که $|t_1|^2 \ll 1$ و $|t_2|^2 \ll 1$ می‌توان، همان‌گونه که در مسئله ۳ نشان داده شده است، با بسط دادن جمله کسینوس در مخرج (۲۹)، این صورت آشنای برایت^۱-ویگنر را برای تشدید به دست آورد:

$$\mathfrak{J}(\epsilon) = \frac{4\Gamma_1\Gamma_2}{(\Gamma_1 + \Gamma_2)^2 + 4(\epsilon - \epsilon_n)^2} \quad (33)$$

که در آن $\Gamma_j = \frac{\Delta\epsilon}{\pi}|t_j|^2$. بنابراین تشدیدها قله‌های لورنتسی با پهنای انرژی برابر با $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$ هستند. این پهنای با فاصله بین ترازهای انرژی $\Delta\epsilon$ و احتمال گسیل از دو سد تعیین می‌شود که صرفاً پهن‌شدگی عدم قطعیتی تراز است که از طول عمر متناهی حالت مقید سد دوگانه ناشی می‌شود.

جمع زدن ناهمدوس و قانون اهم

اگر، برعکس، الکترون‌ها را کلاسیکی در نظر بگیریم، به جای دامنه‌ها احتمالها را جمع می‌زنیم. این روش هنگامی معتبر است که الکترون بین دو سد عملاً رد فازش را، برای مثال، به دلیل پراکندگی ناکشسان از فونونها گم کند. این روش متناظر است با نشان دادن رابطه‌های زیر به جای (۲۷)

$$|a|^2 = |t_1|^2 + |r_1|^2|b|^2; \quad |b|^2 = |a|^2|r_2|^2; \quad |c|^2 = |a|^2|t_2|^2 \quad (34)$$

در نتیجه داریم

$$\mathfrak{J} = \frac{|t_1|^2|t_2|^2}{1 - |r_1|^2|r_2|^2} \quad (35)$$

با مقداری دستکاری مقدماتی (مسئله ۴) به دست می‌آوریم

$$R = (h/2e^2)(1 + |r_1|^2/|t_1|^2 + |r_2|^2/|t_2|^2) \quad (36)$$

مقاومت به‌سادگی برابر است با مجموع مقاومتهای تماسی کوانتیده و مقاومتهای ذاتی سدهای مجزا (معادله ۲۵ را ببینید). این قانون اهم است—مقاومتهای متوالی با هم جمع می‌شوند. این قانون وقتی معتبر است که از اثرهای تداخلی بتوان چشم پوشید.

معادله (۳۶) ارتباط با فرمول درود را می‌سازد. فرایندی را در نظر بگیرید که آهنگ پس‌پراکندگی $1/\tau_b$ داشته باشد. این پس‌پراکندگی می‌تواند از پراکندگیهای کشسانی نظیر پراکندگی از ناخالصی یا از فرایند ناکشسانی نظیر پراکندگی فونونی نتیجه شده باشد. احتمال بازتاب ($d\mathcal{R} \ll 1$) برای انتشار در فاصله

کم dL برابر است با

$$d\mathcal{R} = \frac{1}{\tau_b} \frac{dL}{v_F} = \frac{dL}{\ell_b} \quad (37)$$

این احتمال بازتاب سهمی در مقاومت دارد، با مقاومت ویژه:

$$\rho_{1D} = dR/dL = (h/2e^2)/\ell_b \quad (38)$$

همان گونه که در مسئله ۴ نشان داده شده است، این مقاومت برابر است با مقاومت درود در 1D $\sigma_{1D}^{-1} = (n_{1D} e^2 \tau / m)^{-1}$. با چشم‌پوشی از اثرهای تداخلی، مقاومت قطعه‌های مجزا به‌طور اهمی با هم جمع می‌شوند و داریم

$$R = R_Q + (h/2e^2)(L/\ell_b) \quad (39)$$

جایگزیدگی

اکنون وضعیتی را در نظر می‌گیریم که در آن دو سد به‌طور متوالی به هم متصل شده‌اند، ولی از همدوسی صرف نظر نمی‌کنیم. در اینجا در تناظر با میانگین‌گیری روی انرژی‌های متفاوت، روی تمامی فازهای ممکن میانگین‌گیری می‌کنیم. مقاومت متوسط با استفاده از معادله (۲۹) برابر است با

$$\langle R \rangle = \frac{h}{2e^2} \frac{1 + |r_1|^2 |r_2|^2 - 2|r_1||r_2| \langle \cos \varphi^* \rangle}{|t_1|^2 |t_2|^2} = \frac{h}{2e^2} \frac{1 + |r_1|^2 |r_2|^2}{|t_1|^2 |t_2|^2} \quad (40)$$

شایان توجه آنکه مقاومت میانگین‌گیری‌شده روی فاز در رابطه (۴۰) بزرگتر از مقاومت در حد ناهمدوس (۳۶) است.

برای آنکه مقیاس‌بندی با طول وابسته به رابطه (۴۰) را درک کنیم، میله رسانای بلندی به طول L در نظر می‌گیریم که حاوی رشته‌ای از پراکنده‌سازهای فقط کشسان (فاز-پایستار) باشد، که با طول پس‌پراکندگی کشسان ℓ_e مشخص می‌شوند. فرض کنید مقاومت رسانا، $\langle R \rangle$ ، بزرگ باشد، به گونه‌ای که $1 \simeq \mathcal{R}$ و $1 \ll \mathcal{J}$. برای فزونی طول کوچک dL ، بازتاب و تراگیسیل اضافی $d\mathcal{R} = dL/\ell_e$ ، همانند رابطه (۳۷)، و $d\mathcal{J} = 1 - d\mathcal{R}$ وجود خواهد داشت. با ترکیب این رابطه‌ها طبق دستورالعمل (۴۰) و با فرض آنکه $d\mathcal{R} \ll 1$ ، به دست می‌آوریم

$$\langle R + dR \rangle = \frac{h}{2e^2} \frac{1 + \mathcal{R}d\mathcal{R}}{\mathcal{J}(1 - d\mathcal{R})} \simeq \langle R \rangle \left(1 + \frac{2dL}{\ell_e} \right) \quad (41)$$

یا هم‌ارز آن

$$\langle dR \rangle = \langle R \rangle (2dL/\ell_e) \quad (42)$$

با جدا کردن متغیرها و انتگرالگیری از دو طرف معادله به دست می آوریم

$$\langle R \rangle = (h/2e^2) \exp(2L/l_e) \quad (43)$$

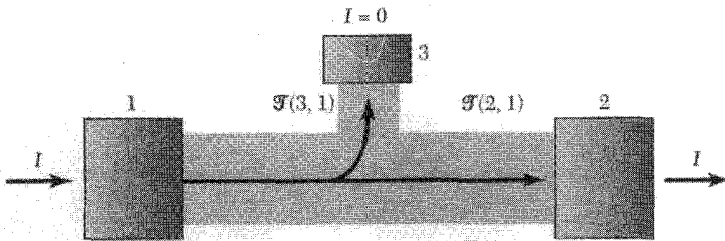
شایان توجه است که مقاومت به جای آنکه مثل رسانای اهمی به طور خطی با طول نمونه تغییر کند، به طور نمایی تغییر می کند. این رفتار پیامدی از جایگزیدگی است. به دلیل تداخل کوانتومی بین حالت های پراکنده شده توسط بی نظمی، این حالتها در مقیاس اندازه ای برابر با $l_e \sim \xi$ جایگزیده می شوند، که در آن ξ طول جایگزیدگی نامیده می شود. هیچ حالت گسترده ای وجود ندارد که تمامی طول رسانا را ببیماید، در نتیجه مقاومت به طور نمایی بزرگ است. در دستگاه های شبه ۱D نتیجه مشابهی برقرار است، با این تفاوت که در این دستگاهها، طول جایگزیدگی $Nl_e \sim \xi$ است، که در آن N تعداد زیرنوارهای ۱D اشغال شده است.

در دماهای بسیار کم، تنها فرایندهای همدوس روی می دهند و مقاومت با استفاده از رابطه (۴۳) به طور نمایی بزرگ است. الکترونها، در دماهای متناهی، به دلیل برهم کنش با دیگر درجه های آزادی نظیر فونونها یا الکترونها، تنها در بازه طول همدوسی فاز l_φ ، حافظه فازی خود را حفظ می کنند. این طول به طور نوعی تابع قانون توانی از دماست، $l_\varphi = AT^{-\alpha}$ ، زیرا تعداد برانگیختگیهای الکترونی و ارتعاشی موجود به صورت قانون توانی برحسب دما بیان می شود. مقاومت هر قطعه همدوس فازی را می توان با رابطه (۴۳) تقریب زد که در آن l_φ به جای L قرار داده شود. مقاومت هر قطعه همدوس فازی، با افزایش دما، به تندی (به صورت تابع نمایی از قانون توانی برحسب T) کاهش می یابد. این امر مقاومت کلی را، که ترکیب متوالی (ناهمدوس) تعداد L/l_φ از چنین قطعه های همدوس فازی است، به طور چشمگیری کاهش می دهد. در دماهای به اندازه کافی بالا، که در آن $l_\varphi \leq l_e$ ، همه همدوسی فاز، بین رویدادهای پراکندگی از بین می رود و عبارت اهمی (۳۶) به کار می رود.

یک موضوع مرتبط، ماهیت حالت های الکترونی در دستگاه های ۲D و ۳D در حضور بی نظمی است. در ۲D نیز باور بر آن است که برای الکترونهای غیر برهم کنشی، همه حالتها توسط بی نظمی جایگزیده می شوند. از سوی دیگر در ۳D برای جایگزیده کردن حالتها، به مقداری بحرانی از بی نظمیها نیاز است. جایگزیدگی کماکان موضوع بحث برانگیزی است که به لحاظ بنیادی بسیار مورد توجه است، به ویژه هنگامی که برهم کنشهای کولنی بین الکترونها نیز مطرح باشد.

گمانه های ولتاژ و فرمول بندی بوتیکر^۱ - لانداتر

در بسیاری از اندازه گیریها بیش از دو گمانه به رسانا متصل می شود، برخی از گمانه ها به عنوان گمانه های ولتاژ (که هیچ جریانی از نمونه نمی کشند) و بقیه به گونه ای که در شکل ۱۶ نشان داده شده است، به عنوان



شکل ۱۶. نمایش طرحوار رسانای چندپایانه‌ای. تماسهای ۱ و ۲ گمانه‌های جریان و تماس ۳ گمانه ولتاژ است. احتمال تراگسیل از تماس ۱ به ۲ و از ۱ به ۳ به گونه طرحوار نشان داده شده است.

گمانه جریان به کار می‌روند. بوتیکر، فرمولبندی لاندائر را برای بررسی این مورد چندگمانه‌ای گسترش داد. $\mathcal{T}^{(n,m)}$ را احتمال تراگسیل کل، شامل سهمهای همه کانالهای ۱D، برای الکترونی که تماس m را ترک می‌کند و به تماس n می‌رسد، تعریف می‌کنیم. برای گمانه جریان n با N_n کانال پتانسیل الکتروشیمیایی تماس از طریق ولتاژ اعمال شده تعیین می‌شود، و جریان خالصی که در تماس شارش می‌کند برابر است با

$$I_n = (2e^2/h)(N_n V_n - \sum_m \mathcal{T}^{(n,m)} V_m) \quad (44)$$

این درست برابر با جریانی است که از تماس به خارج شارش می‌کند منهای جریانهایی که از هر یک از تماسهای دیگر سرچشمه گرفته و از تماس مورد نظر به داخل شارش می‌کنند. توجه کنید که $N_n = \sum_m \mathcal{T}^{(n,m)}$ را می‌توان به سادگی با در نظر گرفتن وضعیت تعادل که در آن تمامی ولتاژها مساوی و همه جریانهها صفرند از رابطه (۴۴) به دست آورد.

برای یک گمانه ولتاژ، V_n خود را به گونه‌ای تنظیم می‌کند که هیچ جریان خالصی شارش نکند $(I_n = 0)$:

$$V_n = \frac{\sum_{m \neq n} \mathcal{T}^{(n,m)} V_m}{\sum_{m \neq n} \mathcal{T}^{(n,m)}} \quad (45)$$

پتانسیل الکتروشیمیایی‌ای که گمانه اندازه می‌گیرد، متوسط وزندار پتانسیلهای الکتروشیمیایی تماسهای مختلف است، که در آن ضریبهای وزنی عبارت‌اند از احتمالهای تراگسیل.

معادله‌های (۴۴) و (۴۵) تعدادی پیامد شگفت‌انگیز دارند. از آنجاکه جریانهها و ولتاژهای اندازه‌گیری شده به $\mathcal{T}^{(n,m)}$ بستگی دارند، جزئیات مسیری که الکترون برای عبور از نمونه دنبال می‌کند بر مقاومت تأثیر می‌گذارد. گمانه ولتاژ می‌تواند مسیرها را مختل سازد، و ولتاژ اندازه‌گیری شده به نوبه خود می‌تواند تحت

تأثیر تراکسیل از همه مسیرهای درون نمونه قرار گیرد. در ادامه سه مثال می‌آوریم که این ویژگیها را نمایش می‌دهند.

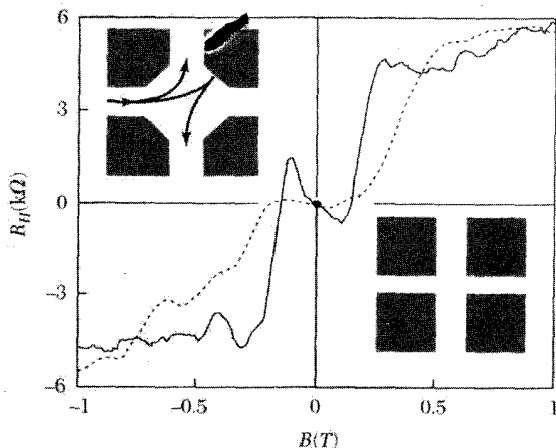
گمانه ولتاژی را در نظر بگیرید که، همان گونه که در شکل ۱۶ نشان داده شده است، به مرکز یک رسانای ۱D که در غیاب گمانه بالیستیکی است، متصل شده است. فرض کنید الکترونیهای که گمانه ۱ را ترک می‌گویند، به گمانه ۲ یا ۳ وارد می‌شوند، ولی هیچ یک پس‌پراکنده نمی‌شوند. در نتیجه ولتاژی که گمانه ۳ نشان می‌دهد، برابر است با

$$V_3 = \frac{\mathcal{J}^{(3,1)}V}{\mathcal{J}^{(3,1)} + \mathcal{J}^{(3,2)}} = \frac{V}{2} \quad (46)$$

که در گام آخر فرض کرده‌ایم که گمانه ولتاژ به‌طور متقارن به کانالهای چپ‌رو و راست‌رو جفت شده است، $\mathcal{J}^{(3,1)} = \mathcal{J}^{(3,2)}$ ، ولتاژی که در کانال اندازه گرفته می‌شود درست برابر است با میانگین ولتاژ دو تماس. جریانی که از تماس ۱ به بیرون شارش می‌کند از این رابطه به دست می‌آید:

$$I = (2e^2/h)(V - \mathcal{J}^{(1,3)}V_3) = (2e^2/h)V(1 - \frac{1}{2}\mathcal{J}^{(1,3)}) \quad (47)$$

که در آن در گام دوم از رابطه (۴۶) استفاده شده است. توجه کنید که حضور گمانه ولتاژ تراکسیل را به مقداری کمتر از یک مربوط به کانال کامل کاهش می‌دهد. برخی از الکترونها به گمانه ولتاژ پراکنده شده بازگسیل می‌شوند و سپس به کانال ۱ باز می‌گردند. این امر نشان می‌دهد که گمانه‌های ولتاژ عموماً تهاجمی‌اند؛ این گمانه‌ها بر آنچه اندازه می‌گیرند تأثیر می‌گذارند، مگر آنکه تنها به‌طور ضعیف به دستگاه جفت شده باشند. یک اندازه‌گیری مقاومت هال مربوط به دو تقاطع نانومقیاس که روی گاز الکترونی ۲D با تحرک بالا نقش داده شده‌اند، در شکل ۱۷ نشان داده شده است. هندسه این تقاطعها در شکل نمایش داده شده است. ناحیه پیوندگاه، بالیستیکی است، به این معنا که در آن هیچ پراکندگی ناشی از بی‌نظمی وجود ندارد و تنها ناشی از دیوارهاست. مقاومت هال اندازه‌گیری شد، به شکل $B/n_s e$ ، که از گاز الکترونی ماکروسکوپی ۲D انتظار می‌رود، نیست. در این رابطه n_s غلظت حاملهای ورقه است. این مقاومت در مقابل، تعدادی ویژگیهای شایان توجه دارد. شگفت‌انگیزتر از همه آنکه ولتاژ هال، برای نمونه نشان داده شده در قسمت بالای چپ شکل، در Bی کوچک علامت مخالف این ولتاژ در Bی بزرگ دارد. این موضع را می‌توان به سادگی، به کمک مسیرهای کلاسیکی الکترون که در شکل ترسیم شده است، درک کرد. در Bی بزرگ، نیروی لورنتس الکترونها را ترجیحاً به درون الکتروند بالایی منحرف می‌کند، و علامتی را که انتظار داریم، برای ولتاژ هال به دست می‌دهد. ولی در B کوچک الکترون از مرز رسانا به عقب می‌جهد، به الکتروند دوم می‌رسد، و علامت ولتاژ هال اندازه‌گیری شده را معکوس می‌کند. در رسانای چندگمانه‌ای کوچک، مقاومت به جای آنکه به سادگی به ویژگیهای ذاتی نظیر چگالی الکترونی مربوط باشد، مقیاسی است برای مسیرهای الکترونی درون نمونه.



شکل ۱۷. اندازه‌گیریهای چهارپایانه‌ای مقاومت هال پیوندگاه‌های زیرمیکرونی به شکلهای مختلف. در پیوندگاهی که در بالای سمت چپ نشان داده شده است، ولتاژ هال، در B کوچک منفی، و در B بزرگ مثبت است. دلیل این امر در نمودار نشان داده شده است؛ در B کوچک الکترون‌ها از دیوار به عقب می‌جهند و به گمانه «اشتباه» وارد می‌شوند.

معادله‌های (۴۴) و (۴۵) را می‌توان برای بررسی رساناهای میکروسکوپی (یا حتی ماکروسکوپی) پیچیده‌ی اختیاری به‌کار برد. از این معادله‌ها به‌طور گسترده برای توصیف اندازه‌گیریهای روی نمونه‌های فلزی بی‌نظم کوچک، در دماهای کم، به صورت تابعی از میدان مغناطیسی استفاده شده است. این نمونه‌ها دارای کانالهای عرضی زیاد و حاوی ناخالصی‌اند. طول پراکندگی کشسان l_e کوچکتر از ابعاد نمونه است، ولی طول همدوسی فاز l_ϕ بزرگتر است. بنابراین الکترون‌ها به صورت پخشی، ولی فاز-همدوسانه، درون نمونه انتشار می‌یابند. این وضعیت را رژیم مزوسکوپی می‌نامند. دامنه‌ی تراگسیل بین دو گمانه n و m در تصویر نیمه‌کلاسیکی متناظر است با مجموع مسیرهای کلاسیکی زیادی در درون نمونه:

$$(CGS) \quad t^{(m,n)} \propto \sum_j a_j \exp \left((i/\hbar) \int_\ell^m (\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c) \cdot d\mathbf{l} \right)$$

$$(SI) \quad t^{(m,n)} \propto \sum_j a_j \exp \left((i/\hbar) \int_\ell^m (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \cdot d\mathbf{l} \right) \quad (48)$$

توجه کنید که فاز وابسته به هر دامنه‌ی مسیر a_j ، به گونه‌ای که در پیوست (ج) توصیف شده است، شامل سهمی ناشی از پتانسیل برداری مغناطیسی \mathbf{A} است. از آنجا که $\tilde{t}^{(n,m)} = |t^{(n,m)}|^2$ ، نتیجه می‌شود که تداخل کوانتومی بین مسیرهای رسانای متفاوت درون نمونه، تراگسیل را مدوله می‌کند.

یک مثال جالب در شکل ۱۸ نشان داده شده است. در طرف چپ مقاومت چهارپایانه‌ای یک سیم فلزی نانومقیاس نشان داده شده است. افت و خیزهای غیردوره‌ای در رسانندگی برحسب میدان مغناطیسی دیده می‌شود. این افت و خیزها از مدولاسیونهای تداخل بین مسیره‌های پخشی زیادی ناشی می‌شود، که تماسها را به هم متصل می‌کنند. با توجه به آنکه مسیره‌های زیادی وجود دارد، نتیجه اساساً یک متغیر کاتوره‌ای است. این مدولاسیونها را افت و خیزهای رسانندگی می‌نامند.

هنگامی که یک حلقهٔ اضافی، به گونه‌ای که در طرف راست شکل ۱۸ نشان داده شده است، در خارج ناحیهٔ بین تماسها اضافه می‌شود، رسانندگی G از نظر کیفی تغییر می‌کند. در اینجا با مدولاسیونی دوره‌ای برحسب میدان مغناطیسی مواجه می‌شویم. این مدولاسیون، از اثر آهارانوف-بوم ناشی می‌شود. پتانسیل برداری، تداخل کوانتومی بین مسیره‌های الکترونی‌ای که حلقه را دور می‌زنند، و مسیره‌هایی که دور نمی‌زنند، را مدوله می‌کند. برای سادگی، تداخل بین تنها دو تا از چنین مسیره‌هایی را در نظر بگیرید که در غیاب میدان مغناطیسی، دارای دامنه‌های تراگسیل a_1 و a_2 باشند (شکل ۱۸). در میدان متناهی B ، داریم

$$(CGS) |a_1 + a_2 \exp[(ie/hc) \oint_{\text{حلقه}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}]|^2 = |a_1|^2 + |a_2|^2 + 2|a_1||a_2| \cos[2\pi\Phi/(hc/e)]$$

$$(SI) |a_1 + a_2 \exp[(ie/h) \oint_{\text{حلقه}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}]|^2 = |a_1|^2 + |a_2|^2 + 2|a_1||a_2| \cos[2\pi\Phi/(h/e)] \quad (49)$$

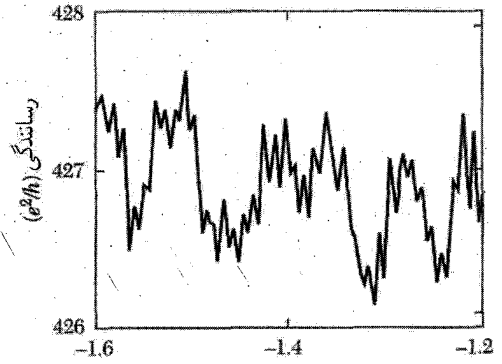
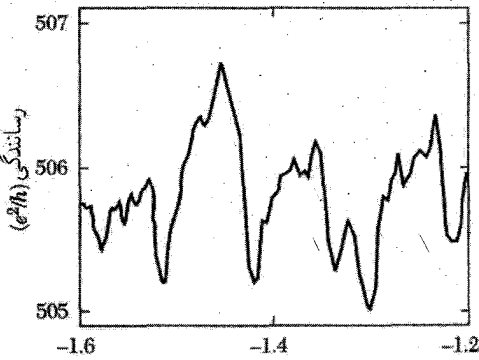
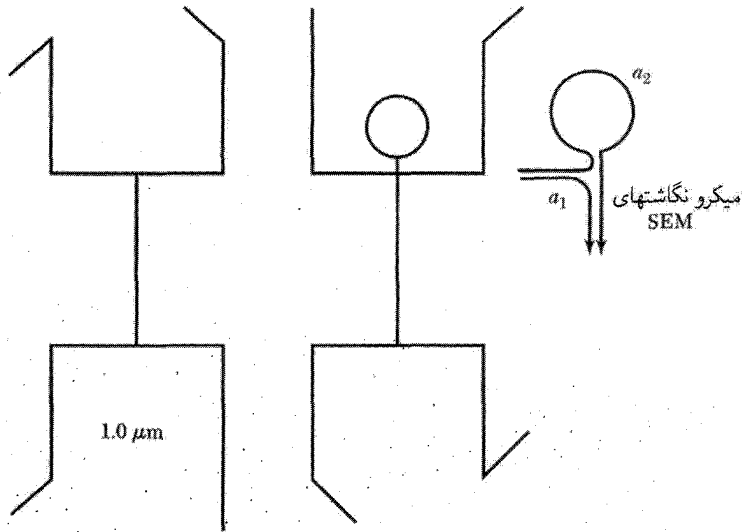
در گام آخر، قضیهٔ استوکس را به‌کار گرفته‌ایم، که در آن Φ شار مغناطیسی‌ای است که از حلقه می‌گذرد و در hc/e (در SI) کوانتوم شار مغناطیسی است. با افزایش شار، تراگسیل درون سیم با دورهٔ یک کوانتوم شار، نوسان می‌کند. این اثر با کوانتس شار که در فصل ۱۰ مورد بحث قرار گرفت، ارتباط نزدیکی دارد، با این تفاوت که باری که در کوانتوم شار ظاهر می‌شود، در اینجا e است، نه $2e$ ؛ زیرا در اینجا الکترونها حامل‌اند، نه زوجهای کوپر.

این نکته شایان توجه است که افزودن یک حلقه در خارج ناحیهٔ بین تماسهای ولتاژ، ویژگیهای اندازه‌گیری شده را تغییر می‌دهد. مقاومتها در رژیم مزوسکوپی غیرموضعی‌اند. الکترونها در حین حرکت بین تماسها به‌طور همدوس در سراسر نمونه پخش می‌شوند، و فاز آنها مسیر را در حافظهٔ خود دارد.

ساختار الکترونی دستگاههای D

ترازهای انرژی کوانتیده

دستگاهی از الکترونهایی که در هر سه بعد محبوس باشد، همان گونه که برای اتمها و مولکولها



میدان مغناطیسی (T)

شکل ۱۸. بالا: میکرونگاشتهای SEM مربوط به دو سیم Au قائم که گمانه‌های جریان و ولتاژ به آنها نصب شده‌اند. در قطعه سمت راستی، حلقه‌ای اضافی، در خارج از ناحیه بین گمانه‌ها اضافه شده است. نمودار سمت راست دو مسیر را نشان می‌دهد، یکی که حلقه را دور می‌زند و دیگری که نمی‌زند. پایین سمت چپ: رسانندگی برحسب میدان الکتریکی برای نمونه سمت چپ. افت و خیزهای غیردوره‌ای رسانندگی ناشی از تداخل کوانتومی بین دو مسیر رسانا در درون نمونه در شکل دیده می‌شود. پایین سمت راست: نوسانهای دوره‌ای وابسته به اثر آهارانوف-بیوم برای مسیرهایی مشاهده می‌شود که حلقه‌ای را احاطه کرده‌اند، که اسماً خارج از ناحیه بین تماسهاست؛ این نوسانها ماهیت غیرموضعی ترابرد همدوس پخشی را در دستگانه‌های مزوسکوپی نشان می‌دهد.

داریم، دارای حالت‌های الکترونی و بارگسسته است. این دستگاهها را اغلب به منظور انعکاس اهمیت پدیده‌های کوانتومی در ویژگی‌هایشان، اتمهای مصنوعی یا نقطه‌های کوانتومی می‌نامند. در مثالی ساده، الکترونی را در چاه پتانسیل کروی در نظر بگیریم. هامیلتونی به دلیل تقارن کروی، به بخشهای شعاعی و زاویه‌ای تفکیک می‌شود، و این وضعیت، ویژه حالتها و ویژه مقادارها را می‌دهد:

$$\epsilon_{n,l,m} = \epsilon_{n,l}; \quad \psi(r, \theta, \phi) = Y_{l,m}(\theta, \phi) R_{n,l}(r) \quad (50)$$

که در آن $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ هماهنگهای کروی و $R_{n,l}(r)$ توابع موج شعاعی اند. ترازهای انرژی و توابع موج شعاعی به جزئیات پتانسیل محبوس کننده خاص بستگی دارند. برای چاه کروی نامتناهی، که در آن V به ازای $r < R$ برابر صفر، و بقیه جاها نامتناهی است، داریم

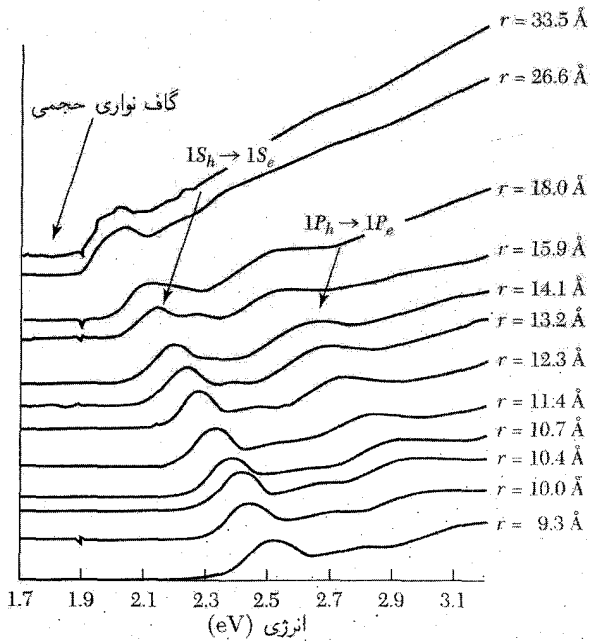
$$\epsilon_{n,l} = \hbar^2 \beta_{n,l}^2 / (2m^* R^2) \\ R_{n,l}(r) = j_l(\beta_{n,l} r / R), \quad r < R \quad (51)$$

تابع $j_l(x)$ لامین تابع بسل کروی، و ضریب $\beta_{n,l}$ n امین صفر $j_l(x)$ است. برای مثال، $(1S)\beta_{1,0} = \pi$ ، $(1P)\beta_{1,1} = 4.49$ ، $(2S)\beta_{2,0} = 5.42$ ، $(2P)\beta_{2,1} = 7.07$ ، و $(2D)\beta_{2,2} = 8.43$ است. شاخصهای درون پزانتزها، نمادگذاری مربوط به حالتهاست، که دارای واگنهای متداول وابسته به اسپین و سمگیری تکانه زاویه‌ای اند.

نانوبلورهای نیم رسانا

نانوبلور نیم رسانا را، نظیر آنچه در شکل ۲ نشان داده شده است، می‌توان با تقریب خوب با مدل کروی فوق توصیف کرد. هم حالت‌های الکترونی در نوار رسانش و هم حالت‌های حفره‌ای در نوار ظرفیت هر دو کوانتیده‌اند. در نانوذره CdSe جرم مؤثر نوار رسانش $m_e^* = 0.13$ و از $\epsilon_{n,l} = (2.9 \text{ eV} / R^2) (\beta_{n,l} / \beta_{1,0})^2$ که در آن R شعاع نانوذره برحسب نانومتر است. به ازای $R = 2 \text{ nm}$ ، فاصله بین دو تراز انرژی پایین برابر است با $0.76 \text{ eV} = \epsilon_{1,1} - \epsilon_{1,0}$.

انرژی حالت الکترونی ۱S با کاهش R افزایش می‌یابد، در حالی که انرژی حالت حفره‌ای ۱S کاسته می‌شود. بنابراین گاف نواری رشد می‌کند، در نتیجه می‌توان آن را با تغییر دادن R روی گسترده وسیعی تنظیم کرد. این امر در شکل ۱۹ نشان داده شده است، که در آن طیفهای جذبی نانوبلورهای با اندازه‌های متفاوت CdSe ارائه شده‌اند. برای کوچکترین شعاعها، آستانه جذب به اندازه تقریباً ۱ eV نسبت به مقدار حجمی آن انتقال پیدا می‌کند. انتقال مشابهی در طیف گسیلی دیده می‌شود. طیفهای اپتیکی نانوبلورها را می‌توان به طور پیوسته، روی گسترده مرئی تنظیم کرد، که این امر آنها را برای کاربردهایی نظیر شاخص گذاری فلئوئورسان تا دیوده‌های نورگسیل مفید می‌سازد.



شکل ۱۹. طیفهای جذب اپتیکی برای رشته‌ای از نمونه‌های نانوبولور cdSe با شعاعهای متوسط مختلف. پایستترین انرژی گذار در کوچکترین نمونه نانوبولور، در مقایسه با گاف نواری حجمی، به اندازه تقریباً ۱ eV انتقال یافته است. دو گذار عمده شاخص‌گذاری شده‌اند.

شدت جذب در نانوبولورها در بسامدهای ویژه‌ای متمرکز می‌شود، که همان گونه که در رابطه (۷) توصیف شد، متناظر با گذارهای بین حالت‌های گسسته‌اند. یک نتیجه مهم برای جذب انتگرالی را می‌توان از رابطه‌های کریمزیکرونیگ، که در فصل ۱۵ مورد بحث قرار گرفتند، به دست آورد. از معادله (۱۱) در فصل ۱۵ داریم

$$\sigma''(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\sigma'(s)}{s^2 - \omega^2} ds \quad (52)$$

در بسامدهای بسیار بالا، $\omega \rightarrow \infty$ ، پاسخ الکترونها همانند پاسخ الکترون آزاد است. از معادله (۲۰) فصل ۱۵ داریم

$$\sigma''(\omega) = ne^2/m\omega \quad (53)$$

علاوه بر این، با $\omega \rightarrow \infty$ ، از بسامد s در مخرج (۵۲) می‌توان چشم پوشید. در نتیجه با ترکیب روابط

(۵۲) و (۵۳) داریم

$$\int_0^{\infty} \sigma'(s) ds = \pi n e^2 / 2m \quad (54)$$

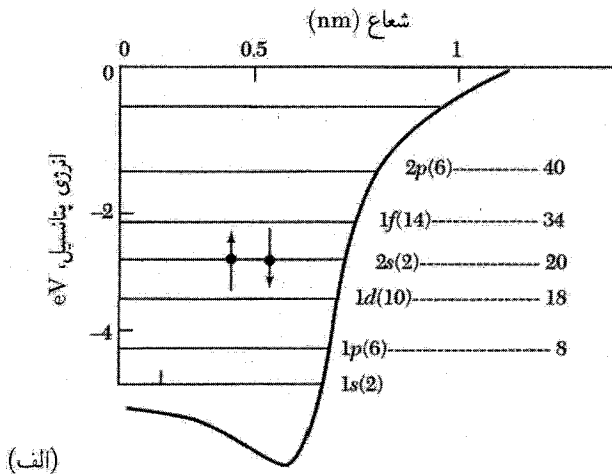
بنابراین وقتی روی همهٔ بسامدها انتگرال بگیریم، نیم رسانای حجیم و نانوبلور دارای جذب کلی یکسانی به ازای واحد حجم خواهند بود. ولی توزیعها بسیار متفاوت است. طیف جذبی نیم رسانای ماکروسکوپیکی پیوسته است، ولی در نانوبلور، این طیف در بسامدهای گذار شامل رشته‌ای از گذارهای گسسته با شدت جذب بسیار بالاست. این گذارهای قوی در بسامدهای ویژه، پژوهشگران را بر آن داشته است تا لیزرهای تولید کنند که در گذارهای کوانتیدهٔ الکترونی نقطه‌های کوانتومی کار کنند.

نقطه‌های فلزی

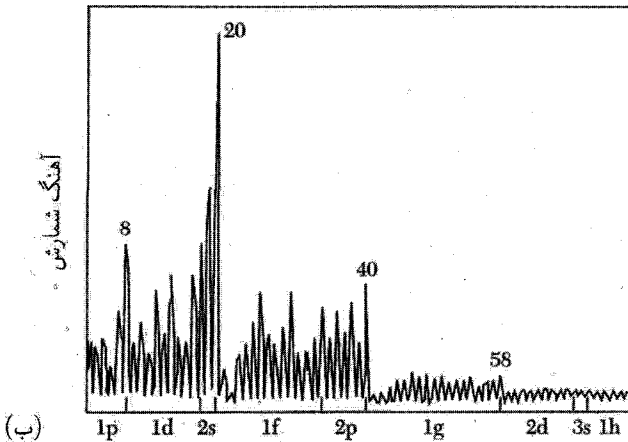
در نقطه‌های فلزی کروی کوچک، نظیر خوشه‌های فلز قلبیایی که در باریکهٔ اتمی تولید می‌شوند، الکترونیهای نوار رسانش ترازهای انرژی کوانتیده‌ای را که در رابطه (۵۰) توصیف می‌شوند، به گونه‌ای که در شکل ۲۰ (الف) نشان داده شده است، به سمت بالا پر می‌کنند. این ترازهای کوانتیده بر ویژگیهای الکتریکی و اپتیکی تأثیر می‌گذارند، و حتی می‌توانند بر پایداری نقطه نیز اثر بگذارند. خوشه‌های کوچک را می‌توان توسط طیف نمایی جرمی مورد تحلیل قرار دارد و تعداد اتمهای موجود در خوشه را به دست آورد (شکل ۲۰ ب). این تعداد با تعداد الکترونیهای موجود در نوار رسانش برابر است، زیرا در فلز قلبیایی، به ازای هر اتم یک الکترون رسانشی وجود دارد. در «عددهای جادویی» معین اتمهای موجود در خوشه، فراوانیهای زیادی دیده شده است. این امر از پایداری تقویت شدهٔ خوشه‌های دارای پوسته‌های الکترونی پر نتیجه می‌شود. برای مثال قلهٔ خوشهٔ ۸ اتمی متناظر است با پرشدگی پوسته‌های ۱S ($n=1, \ell=0$) و ۱P ($n=1, \ell=1$). این خوشه‌های با پوستهٔ پر همانند اتمهای با پوستهٔ پر و از نظر شیمیایی پایداری دارند (گازهای نادر). در نقطه‌های فلزی بزرگتر یا با شکل نامنظم، ساختار پوسته‌ای تخریب می‌شوند. فاصلهٔ بین ترازها در مقایسه با انتقالهای ناشی از ناکاملیهای شکلی، وجه‌دار شدن بلورها، یا بی‌نظمی، کوچک می‌شود. درحالی که پیش‌بینی جزئیات طیف ترازهای دشوار است، ولی فاصلهٔ متوسط بین ترازهای انرژی فرمی را می‌توان با استفاده از رابطه (۲۱) از فصل ۶ به قرار زیر برآورد کرد

$$\Delta \epsilon = 1/D(\epsilon_F) = 2\epsilon_F / 3N \quad (55)$$

فاصلهٔ متوسط بین ترازها، در نانوذرهٔ کروی Au با $R = 2\text{nm}$ ، تقریباً برابر است با $\Delta \epsilon \sim 2\text{meV}$. این فاصله بسیار کمتر از فاصلهٔ بین پایستترین حالتها (7.6eV) در نوار رسانش نانوبلور SdSe است که پیش از این محاسبه شد. اثرهای کوانتشی تراز انرژی در نقطه‌های نیم رسانا بسیار مهمترند تا در نقطه‌های فلزی.



(الف)



(ب)

شکل ۲۰. (الف) نمودار تراز انرژی برای حالت‌های درون خوشه فلز قلیایی کروی کوچک. عددهای سمت راست نمودار، تعداد الکترونی لازم را برای پر کردن پوسته‌های الکترونی متوالی نشان می‌دهند. (ب) طیف فراوانی خوشه‌های سدیم که شدتهای زیادی را برای خوشه‌های با پوسته‌های الکترونی کاملاً پر نشان می‌دهد.

دلیل این امر آن است که برای حالت‌های با انرژی کم در چاه پتانسیل ۳D فاصله ترازهای انرژی بیشتر است، و نیز جرم مؤثر الکترون در نیم‌رساناها همان طور که انتظار داشتیم کوچکتر از جرم مؤثر الکترون در فلزهاست. ویژگی‌های اپتیکی نقطه فلزی نوعاً تحت سلطه تشدید پلاسمونی سطحی آن قرار دارد. قطبش‌پذیری کره با استفاده از رابطه (۱۶) در فصل ۱۱ برابر است با

$$(CGS) \quad P = \frac{\chi E_0}{1 + 4\pi\chi/3} \quad (SI) \quad P = \frac{\chi\epsilon_0 E_0}{1 + \chi/3} \quad (56)$$

که در آن E_0 میدان الکتریکی خارجی و χ پذیرفتاری الکترونی است. این رابطه در فصل ۱۶ برای مورد استاتیکی ارائه شد، ولی تا آنجا که نقطه کوانتومی آن قدر کوچک باشد تا آثار تأخیری در آن حضور نداشته باشند، در بسامدهای بالا نیز به کار می رود. با مدل سازی حاملهای درون نقطه، به صورت گاز الکترون آزاد بدون اتلاف، پذیرفتاری از رابطه (۱۴) در فصل ۶ به این صورت به دست می آید:

$$(CGS) \quad \chi(\omega) = -ne^2/m\omega^2; \quad (SI) \quad \chi(\omega) = -ne^2/m\epsilon_0\omega^2 \quad (57)$$

با ترکیب روابط (۵۶) و (۵۷) به دست می آوریم

$$(CGS) \quad P(\omega) = \frac{E_0}{1 - 4\pi ne^2/3m\omega^2} = \frac{E_0}{1 - \omega_p^2/3\omega^2}$$

$$(SI) \quad P(\omega) = \frac{\epsilon_0 E_0}{1 - ne^2/3m\epsilon_0\omega^2} = \frac{\epsilon_0 E_0}{1 - \omega_p^2/3\omega^2} \quad (58)$$

که در آن ω_p بسامد پلاسمایی فلز حجیم است. قطبش در بسامد زیر واگرا می شود:

$$\omega_{sp} = \omega_p/\sqrt{3} \quad (59)$$

این، بسامد تشدید پلاسمون سطحی کره است. این رابطه تشدید پلاسمایی حجمی را برای فلزهایی نظیر Au و Ag از UV به بخش مرئی طیف انتقال می دهد. نتیجه (۵۹) مستقل از اندازه ذره است. ولی، در واقعیت، ویژگیهای اپتیکی به دلیلهای ناشی از اثرهای تأخیری، در شعاعهای بزرگتر، و اتلاف و گذارهای درون نواری، در شعاعهای کوچکتر، تا حدودی به اندازه بستگی دارند.

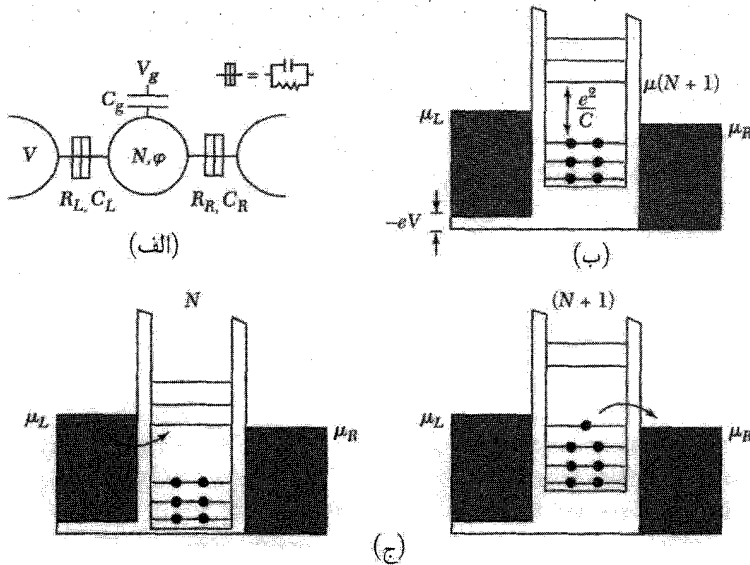
مایعها یا شیشههای حاوی نانوذرههای فلزی به دلیل جذب توسط تشدید پلاسمونهای سطحی، اغلب به طور درخشان رنگی اند. صدها سال است که از آنها در شیشههای رنگی استفاده می شود. در کاربستهایی اپتیکی دیگر برای نانوذرههای فلزی، از میدان الکتریکی بزرگی که درست در بیرون نانوذرهها در نزدیکی تشدید وجود دارد، استفاده می شود. در روشهایی مانند پراکندگی رامان تقویت شده سطحی (SERS)^۱ یا تولید هماهنگ دوم (SHG)^۲ فرایندهای اپتیکی ضعیف در نانو ساختارها، به دلیل وجود میدانهای الکتریکی موضعی قوی، در نزدیکی سطح نانوذرهها اندازه گیری می شوند.

حالت‌های بار گسسته

اگر یک نقطه کوانتومی از محیط اطراف خود نسبتاً منزوی شده باشد، مثل اتم یا مولکول، مجموعه‌ای از حالت‌های بار خوش‌تعریف خواهد داشت. هر حالت بار بعدی، متناظر با افزایش یک یا چند الکترون به نقطه است. اختلاف انرژی بین حالت‌های متوالی بار ممکن است، به دلیل دافعه کولنی بین الکترون‌ها، بسیار بزرگ باشد. پتانسیل الکتروشمیایی برای افزودن $(N + 1)$ امین الکترون به یک نقطه حاوی N الکترون در تقریب توماس-فرمی رابطه (۲۸) از فصل ۱۴ از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\mu_{N+1} = \epsilon_{N+1} - e\phi = \epsilon_{N+1} + NU - \alpha eV_g \quad (60)$$

که در آن U انرژی برهم‌کنش کولنی بین هر دو الکترون در نقطه است، که آن را اغلب انرژی بارگیری می‌نامند. عدد بدون بعد α آهنگی است که با آن، ولتاژ V_g اعمال شده به فلز مجاور، که نوعاً درجه خوانده می‌شود (شکل ۲۱)، پتانسیل الکتروستاتیکی، ϕ ، نقطه را انتقال می‌دهد.



شکل ۲۱. (الف) نمایش طرحوار یک نقطه کوانتومی در تماس تونلی با دو منبع فلزی، و با جفت‌شدگی ظرفیتی با یک درجه. بقیه شکلها: نمودارهای تراز انرژی‌ای که انسداد کولنی را نمایش می‌دهند. در (ب) ولتاژ درجه به گونه‌ای است که نقطه با N الکترون پایدار است، در نتیجه هیچ جریانی شارش نمی‌کند. در (ج) با پایین آوردن پتانسیل الکتروشمیایی به درون پنجره بین پتانسیلهای سیمها، انسداد از بین می‌رود، پر شدن و خالی شدن بار پی‌درپی نقطه مجاز می‌شود، و جریان خالصی شارش می‌کند.

انرژی U عموماً برای حالت‌های متفاوت درون نقطه تغییر می‌کند، ولی در اینجا همانند یک مدل کلاسیکی فرض می‌کنیم که U ثابت باشد. در این صورت می‌توانیم الکتروستاتیک و برهم‌کنش را برحسب ظرفیت توصیف کنیم:

$$\alpha = C_g/C \quad \text{و} \quad U = e^2/C \quad (61)$$

که در آن C ظرفیت الکتروستاتیکی کل نقطه و C_g ظرفیت بین نقطه و دریچه است. کمیت e/C انتقال پتانسیل الکتروستاتیکی نقطه در اثر افزایش یک الکترون است.

اگر نقطه در تماس الکتریکی ضعیف با یک منبع فلزی باشد، الکترونها تا جایی که پتانسیل الکتروشیمیایی برای افزودن یک الکترون دیگر، از پتانسیل الکتروشیمیایی μ ی منبع بیشتر شود، به داخل نقطه تونل می‌زنند، (شکل ۲۱). این امر اشغال تعادلی نقطه، N ، را مشخص می‌کند. با استفاده از V_g ، ولتاژ دریچه، می‌توان حالت بار را تغییر داد. فزونی ولتاژ دریچه لازم، ΔV_g ، برای افزودن یک الکترون بیشتر، از منبع دارای μ ی ثابت با استفاده از رابطه (۶۰) به قرار زیر است

$$\Delta V_g = (1/\alpha e)(\epsilon_{N+1} - \epsilon_N + e^2/C) \quad (62)$$

افزودن یک الکترون اضافی به نقطه، به انرژی کافی برای پر کردن حالت تک‌ذره‌ای بعدی، و نیز کافی برای غلبه بر انرژی بارگیری نیازمند است.

انرژی بارگیری U ، هم به اندازه نقطه و هم به محیط الکتروستاتیکی اطراف آن بستگی دارد. فلزها یا دی‌الکتریک‌های مجاور، برهم‌کنش کولنی را استتار کرده انرژی بارگیری را کاهش می‌دهند. عموماً U را باید برای هر هندسه خاص محاسبه کرد. در مدلی ساده، یک نقطه کروی R را در نظر بگیرید که با پوسته کروی فلزی به شعاع $R + d$ احاطه شده است. این پوسته، برهم‌کنش کولنی بین الکترونها را روی نقطه را استتار می‌کند. با کاربست مقدماتی قانون گاوس (مسئله ۵) ظرفیت و در نتیجه انرژی بارگیری به دست می‌آید:

$$(CGS) \quad U = \frac{e^2}{\epsilon R} \frac{d}{R+d}; \quad (SI) \quad U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \epsilon R} \frac{d}{R+d} \quad (63)$$

انرژی بارگیری برای $R = 2 \text{ nm}$ ، $d = 1 \text{ nm}$ و $\epsilon = 1$ برابر است با $e^2/C = 0.24 \text{ eV}$. این کمیت بسیار بیشتر از $k_B T$ در دمای اتاق $k_B T \approx 0.026 \text{ eV}$ است، که نشان می‌دهد افت و خیزهای بار نقطه، قویاً سرکوب می‌شوند. این انرژی بارگیری قابل مقایسه است با فاصله بین ترازهای انرژی (0.76 eV) برای دو حالت پایینتر در نقطه CdSe به شعاع 2 nm . در مقابل، از فاصله بین ترازهای (2 meV) برای یک نقطه فلزی به شعاع 2 nm بسیار بزرگتر است. بنابراین انرژی افزایش در نقطه‌ای فلزی تحت الشعاع انرژی

بارگیری قرار می‌گیرد، ولی در یک نقطهٔ نیرسانا اهمیت انرژی بارگیری و فاصلهٔ بین تراز با هم قابل مقایسه است.

اگر آهنگ تونل زنی بین نقطه و الکترودها بسیار سریع باشد، اثرهای بارگیری تخریب می‌شوند. بار در یک مقیاس زمانی از مرتبهٔ $\delta t = RC$ روی نقطه می‌نشیند، که در آن R مقاومت تونل زنی به الکترودهاست. تراز انرژی به دلیل اصل عدم قطعیت به اندازه

$$\delta \epsilon \approx h/\delta t = h/RC = (e^2/C)(h/e^2)/R \quad (64)$$

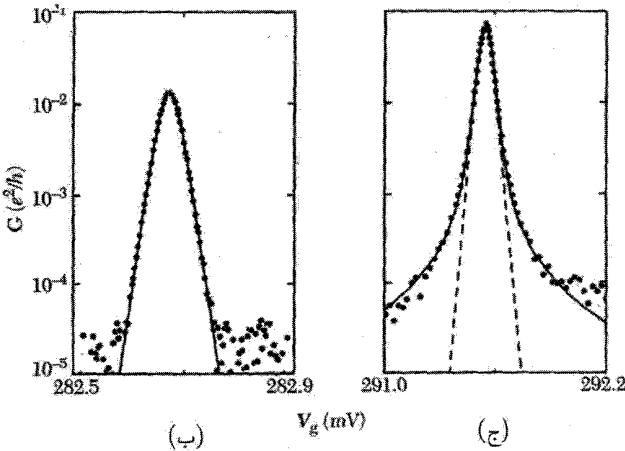
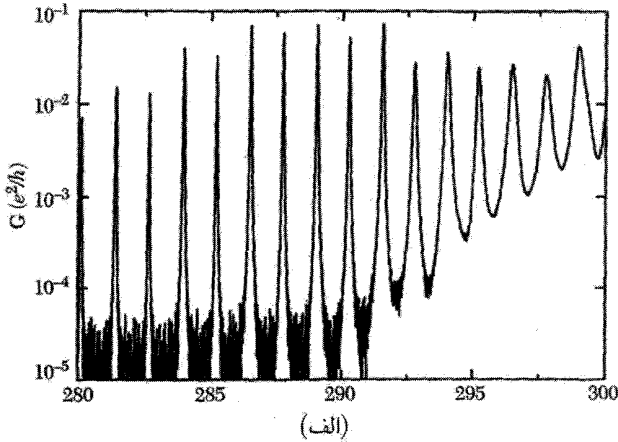
پهن می‌شود. ولی وقتی $R \sim h/e^2$ ، عدم قطعیت در انرژی الکترون با انرژی بارگیری قابل مقایسه می‌شود. برای مقاومت‌های کمتر از این مقدار، افت و خیزهای ناشی از اصل عدم قطعیت، اثرهای بارگیری کولنی را حذف می‌کنند. در نتیجه شرط وجود حالت‌های بار خوش‌تعریف در یک نقطهٔ کوانتومی به قرار زیر است

$$e^2/C \gg k_B T \quad \text{و} \quad R \gg h/e^2 \quad (65)$$

ترابرد الکتریکی در 0 eV نوسانهای کولنی

در دماهای $T < (U + \Delta \epsilon)/k_B$ ، انرژی بارگیری U و فاصلهٔ بین تراز $\Delta \epsilon$ شارش الکترونها را به درون نقطهٔ کوانتومی، به گونه‌ای که در شکل ۲۱ نشان داده شده است، کنترل می‌کنند. هر گاه ترازهای فرمی سیمها بین پتانسیل الکتروشیمیایی حالت‌های بار N و $N + 1$ واقع شوند (شکل ۲۱ ب)، ترابرد در نقطه سرکوب می‌شود. این حالت را انسداد کولنی می‌نامند. جریان تنها هنگامی می‌تواند شارش کند که $\mu_e(N + 1)$ کاهش داده شود و بین ترازهای فرمی سیمهای چپ و راست قرار گیرد. در این صورت الکترون می‌تواند از الکتروده چپ روی نقطه بجهد، از نقطه خارج شود، و به الکتروده راست برود و شارش جریانی را پدید آورد (شکل ۲۱ ج). با افزایش V_g ، این فرایند به ازای هر حالت بار جدیدی تکرار می‌شود. این امر موجب می‌شود که در منحنی رسانندگی به صورت تابعی از V_g ، که در شکل ۲۲ نشان داده شده است، نوسانهایی به وجود آیند، که به نوسانهای کولنی معروف‌اند. اگر $U \gg k_B T$ ، این قله‌ها می‌توانند بسیار تیز باشند. فاصلهٔ بین قله‌های کولنی را رابطهٔ (۶۲) تعیین می‌کند.

نوسانهای کولنی عمدتاً و بیش از هر چیز پیامدی از کوانتتس بارند. این نوسانها در صورتی رخ می‌دهند که $U \gg k_B T$ ، حتی اگر فاصلهٔ بین تراز تک‌ذره‌ای بسیار کوچک باشد، یعنی، $\Delta \epsilon \ll k_B T$. این وضعیت اغلب در نقطه‌های کوانتومی فلزی پیش می‌آید. قطعه‌ای که نوسانهای کولنی را نمایش می‌دهد، اغلب ترانزیستور تک‌الکترونی (SET)^۱ نامیده می‌شود، زیرا با تغییر ضریب اشغال نقطه به اندازهٔ e ، به‌طور دوره‌ای



شکل ۲۲. نوسانهای رسانندگی برحسب ولتاژ دریاچه، V ، که در نقطه کوانتومی تشکیل شده در ساختار چندگن GaAs/AlGaAs دریاچه‌دار در $T = 0.1 \text{ K}$ اندازه‌گیری شده است. داده‌ها در مقیاس لگاریتمی رسم شده‌اند. با افزایش ولتاژ دریاچه، سدها شفافتر و قله‌ها بهتر می‌شوند. شکل خط قله (ب) تنها توسط پهن‌شدگی گرمایی تعیین شده است، ولی (ج) شکل خط برای تویگنر ذاتی را نیز منعکس می‌سازد.

روشن و خاموش می‌شود. این اثر کاملاً شایان توجه است و می‌توان آن را به صورت الکترومتر فراحساس به‌کار برد. این قطعه میدانهای الکتریکی را آشکار می‌سازد، درست همان‌گونه که اسکویید (فصل ۱۰) میدانهای مغناطیسی را آشکار می‌کند. یکی براساس کوانتس بار و دیگری براساس کوانتس شار عمل می‌کنند.

SETها را می‌توان برای ساختن پمپها و کنترل‌های ورود تک‌الکترونی نیز به کار برد. وقتی ولتاژهای نوسان‌کننده با بسامد f به دریاچه‌های دستگاه نقطه کوانتومی ای اعمال می‌شوند، که به تناسب طراحی شده

باشد، می‌تواند در هر چرخه نوسان یک تک‌الکترون را از نقطه بگذرانند. این امر موجب می‌شود که جریان کوانتیده‌ای در نقطه شارش کند:

$$I = ef \quad (66)$$

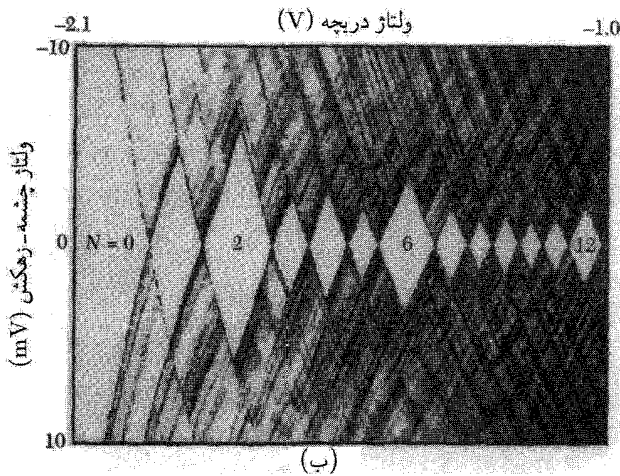
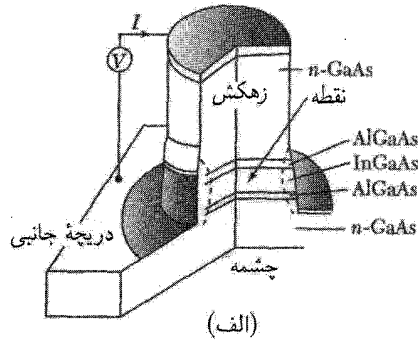
استفاده از چنین قطعه‌هایی به صورت استاندارد جریان در سنجش و اندازه‌گیری، تحت بررسی است. در نقطه کوانتومی شکل ۲۲، فاصله بین ترازهای برابر است با $k_B T \gg \Delta \epsilon$. در نتیجه نوسان کولنی N ام متناظر است با تونل‌زنی تشدیدی از یک تک‌تراز انرژی کوانتیده ϵ_N . در این وضعیت نوسانهای کولنی همانند قله‌های تونل‌زنی تشدید نظری‌اند که در رابطه (۲۹) توصیف و در شکل ۱۵ نشان داده شده‌اند. تفاوت اساسی آن با رابطه (۲۹) آن است که مکان قله‌های کولنی هم با فاصله بین ترازهای و هم با انرژی بارگیری کولنی رابطه (۶۲) تعیین می‌شوند. شکل ۲۲ (ج) برازش یک قله کولنی با شکل برایت-ویگنر مربوط به تونل‌زنی تشدید (۳۳) را نشان می‌دهد.

مشخصه‌های $I-V$ نقطه کوانتومی عموماً پیچیده است و تأثیر متقابل انرژی بارگیری، فاصله بین ترازهای حالت برانگیخته، و ولتاژ بیاس چشمه-زهکش را منعکس می‌سازد. در شکل ۲۳، اندازه‌گیریهای مربوط به چند الکترون اول که به یک نقطه دایره‌ای $2D$ اضافه شده‌اند، نشان داده شده است. رسانندگی دیفرانسیلی dI/dV با تغییر هر دو ولتاژ دریچه و ولتاژ بیاس چشمه-زهکش با استفاده از مقیاس خاکستری نمایش داده شده است. هر یک از خط‌ها متناظر با تونل‌زنی از تک‌تک حالت‌های کوانتومی نقطه است. لوزیهای سفید در راستای محور $V_g = 0$ را نمایش می‌دهند، متناظرند با انسداد کولنی. هر لوزی در توالی متناظر است با الکترون دیگری روی نقطه. محل تماس لوزیهای مختلف در راستای محور V_g ، نوسانهای کولنی‌اند که در آنها حالت بار نقطه تغییر می‌کند. ارتفاع لوزی متناظر است با $eV_{\max} = e^2/C + \Delta \epsilon$ ، یعنی بیشینه ولتاژی که می‌توان بدون شارش جریان در یک حالت بار معلوم اعمال کرد. لوزیهای متناظر با $N = 2$ و $N = 6$ به‌طور چشمگیری بزرگتر از لوزیهای همسایه‌اند، این امر نشان می‌دهد که انرژی افزایش برای اضافه کردن سومین و هفتمین الکترون به نقطه، بیشتر از بقیه است.

این نقطه را عملاً می‌توان با پتانسیل حبس‌شدگی نوسانگر هماهنگ $2D$ ، $U(x, y) = \frac{1}{4} m \omega^2 (x^2 + y^2)$ ، با ترازهای انرژی زیر مدل‌سازی کرد:

$$\epsilon_{ij} = (i + j + l) \hbar \omega \quad (67)$$

که در آن i و j اعداد صحیح مثبت‌اند. این طیف ترازهای را می‌توان همراه با رابطه (۶۲) به کاربرد و انرژیهای افزایشی را، که اندازه‌های لوزیها را در شکل تعیین می‌کنند، به‌دست آورد. اولین الکترون تراز انرژی حالت پایه واگن اسپینی ϵ_{00} را اشغال می‌کند. بعد از افزوده شدن الکترون اول با افزایش $\Delta V_g = U/\alpha e$ ولتاژ دریچه، الکترون دوم هم همین حالت کوانتومی را با اسپین مخالف اشغال می‌کند. الکترون سوم، بعد

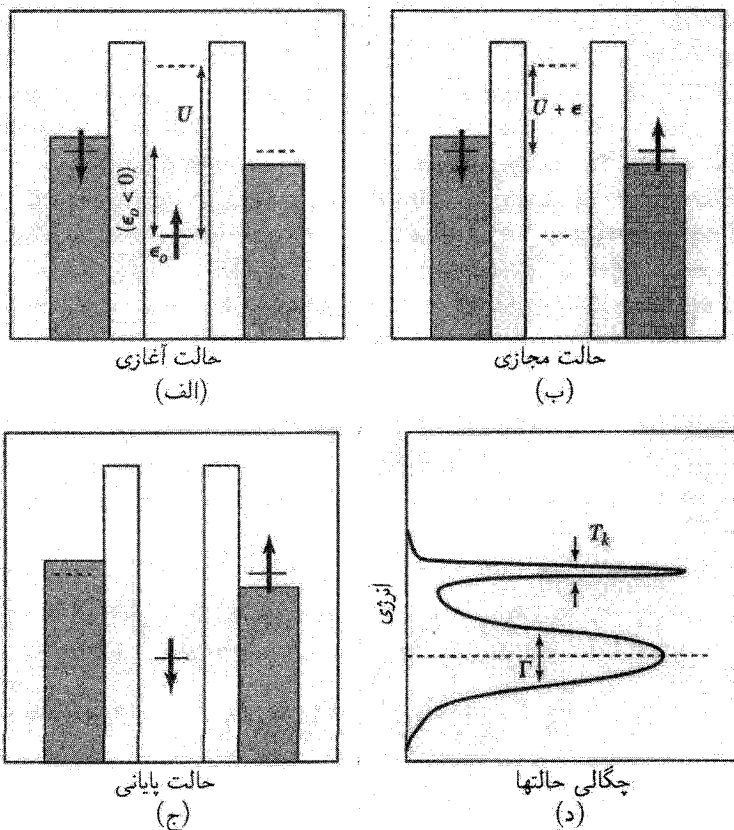


شکل ۲۳. (الف) طرحواره یک نقطه کوانتومی که روی ساختار چندگانه GaAs/AlGaAs تشکیل شده است. (ب) رسانندگی دیفرانسیلی dI/dV به صورت تابعی از هر دو ولتاژ درجه، و بایاس چشمه-زهکش که به صورت یک مقیاس خاکستری ترسیم شده است. ناحیه‌های لوزی سفید متناظرند با حالت‌های بار متفاوت نقطه. به ازای $N = 2$ و $N = 6$ الکترون در نقطه، متناظر با پوسته‌های پر انرژی بارگیری بیشتر است. خط‌های اضافی در نمودار، متناظرند با ترازهای انرژی برانگیخته نقطه.

از $\Delta V_{02} = (U + \hbar\omega)/\alpha e$ ، یکی از حالت‌های واگن ϵ_{01} یا ϵ_{10} را اشغال می‌کند. سه الکترون بعدی هر یک با اختلاف ولتاژ درجه‌ای برابر با $U/\alpha e$ ، بقیه این حالت‌ها را اشغال می‌کنند. الکترون هفتم با اختلاف ولتاژی برابر با $\Delta V_{07} = (U + \hbar\omega)/\alpha e$ ، یکی از حالت‌های واگن ϵ_{11} ، ϵ_{20} ، یا ϵ_{02} را اشغال می‌کند. با این مدل ساده به درستی می‌توان انرژی‌های افزایشی بزرگتر را برای الکترون‌های سوم و هفتم، که در تجربه دیده شده است، پیش‌بینی کرد. هرگاه الکترون اضافی به تراز انرژی جدیدی بالای یک پوسته الکترونی پر دیده شود، انرژی افزایشی به اندازه فاصله بین ترازهای بزرگتر خواهد بود. ($N = 6$ و $N = 2$)

اسپین، عایقهای مات، و اثر کاندو

یک نقطه کوانتومی در نظر بگیرید که، مانند شکل ۲۴، با تعداد فردی الکترون در ناحیه انسداد اشغال شده باشد. بالاترین تراز انرژی تک ذره‌ای نقطه، دوگانه واگن است و الکترون می‌تواند یا در حالت اسپین بالا یا اسپین پایین قرار گیرد. افزودن الکترون دوم با اسپین مخالف، از دیدگاه اصل طرد پاولی مجاز است، ولی



شکل ۲۴. اثر کاندو در نقطه‌ای کوانتومی. در اسپین زوج نشده‌ای درون نقطه، یک فرایند مجازی (ب) ممکن است رخ دهد که حالت اسپین بالا را در (الف) به حالت اسپین پایین در (ج) تبدیل کند، و الکترون را از یک طرف نقطه به طرف دیگر آن انتقال دهد. حالت پایه دستگاه عبارت است از برهم‌نهی هم‌دوس حالت‌های آغازی و پایانی نشان داده شده، که یک یک‌تابی اسپینی، بین اسپین روی نقطه و اسپین‌های روی سیمها ایجاد می‌کند. این وضعیت اثر کاندو نامیده می‌شود و علاوه بر تراز پهن‌شده اصلی با پهنای Γ ، همان‌گونه که در (ج) نشان داده شده است، قله باریکی به پهنای تقریبی $\sim k_B T_K$ در چگالی حالتها، در ϵ_F ایجاد می‌کند.

به دلیل برهم‌کنش کولنی بین الکترونها، از نظر انرژی ممنوع است. این وضعیت، مانسته عایق مات است که در آن نوار نیمه‌پراعی است، زیرا برهم‌کنشهای کولنی مانع از اشغال دوگانه جایگاههای شبکه توسط الکترونها می‌شوند.

بنابراین نقطه، در غیاب جفت‌شدگی با سیمها، دارای گشتاور مغناطیسی اسپین $\frac{1}{4}$ با دو پیکربندی واگن، اسپین بالا و اسپین پایین، است. ولی اگر جفت‌شدگی با سیمها را نیز در نظر بگیریم، این واگنی در دماهای پایین ناپدید می‌شود. حالت پایه عبارت است از برهم‌نهمش کوانتومی دو پیکربندی اسپینی با گذارهایی بین آنها که، همان‌گونه که در شکل ۲۴ نمایش داده شده است، توسط یک حالت واسطه مجازی صورت می‌گیرد، که شامل تعویض الکترونها بین نقطه و سیمهاست. این وضعیت به اثر کاندو معروف است. گشتاور موضعی با الکترونها موجود در الکترودهای فلزی زوج می‌شود، و یک یک‌تایی اسپینی ایجاد می‌کند. این وضعیت در دماهایی کمتر از دمایی که به دمای کاندو، T_K ، معروف است رخ می‌دهد:

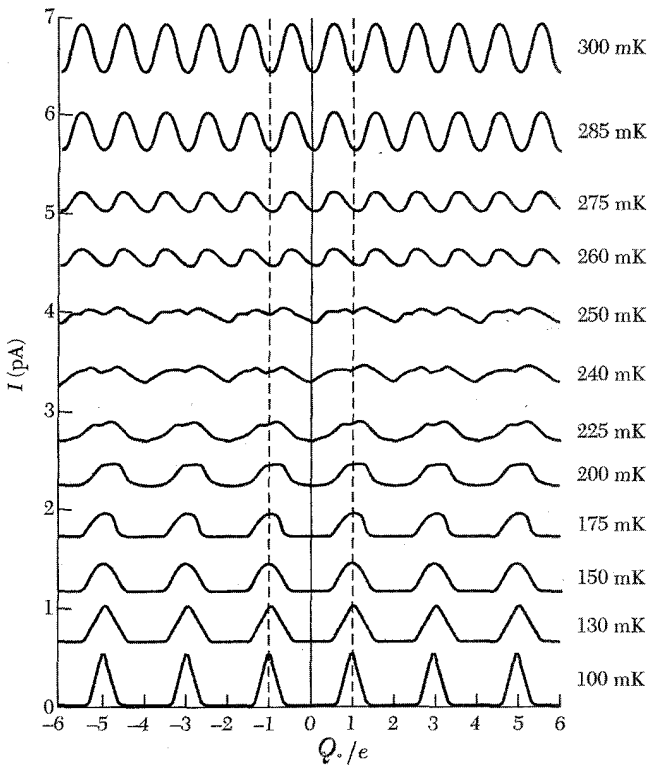
$$T_K = \frac{1}{4} (\Gamma U)^{1/2} \exp[\pi \epsilon_0 (\epsilon_0 + U) / (\Gamma U)] \quad (68)$$

که در آن Γ پهنای تراز است که در رابطه (۳۳) تعریف شد، و ϵ_0 در شکل ۲۴ نشان داده شده است ($\epsilon_0 < 0$). به دلیل آمیخته‌شدن حالت‌های با انرژی ϵ_F مربوط به الکترودها، قله‌ای به عرض $k_B T_K$ در چگالی حالت‌های نقطه ظاهر می‌شود. دمای کاندو بسیار کم است، مگر آنکه جفت‌شدگی Γ با سیمها قابل ملاحظه باشد، زیرا این فرایند متضمن یک حالت واسطه مجازی است.

چون اثر کاندو متضمن تعویض الکترونها با سیمهاست، حتی در ناحیه انسداد نیز، همان‌گونه که در شکل ۲۴ (الف) تا (ج) نشان داده شده است، موجب تراگسیل از نقطه می‌شود. برای سدهای متقارن و $T \ll T_K$ ، ضریب تراگسیل از طریق تشدید کاندو، درست مانند تونل‌زنی تشدید، می‌تواند برابر یک باشد. این اثر در ترازبرد از طریق نقطه‌های کوانتومی و در اندازه‌گیریهای STM از ناخالصیهای مغناطیسی روی سطوح فلزی دیده شده است. اثر کاندو نخستین بار در فلزهای حاوی ناخالصیهای مغناطیسی مشاهده شد. شکل‌گیری یک یک‌تایی اسپینی، بین ناخالصیهای مغناطیسی و الکترونها رسانشی، پراکندگی الکترونها را تقویت می‌کند. این موضوع بعداً در فصل ۲۲ مطرح خواهد شد.

زوج‌گیری کوپری در نقطه‌های ابررسانا

در یک نقطه کوچک فلزی که از ابررسانا ساخته شده باشد، رقابت جالب توجهی بین بارگیری تک‌الکترونی و زوج‌گیری کوپری الکترونها وجود دارد. اگر تعداد الکترونها موجود در نقطه فرد باشد، لزوماً یک الکترون بدون زوج وجود دارد. اگر انرژی بستگی زوج کوپر، Δ ، بیشتر از انرژی بارگیری U باشد، با در نظر گرفتن



شکل ۲۵. اندازه‌گیری نوسانهای کوئنی در نقطهٔ فلزی ابررسانا با کاهش دما. تبدیل از نوسانهای با دوره e به نوسانهای با دوره $2e$ در حین کاهش دما، به دلیل زوج‌گیری کوپری الکترونهای روی نقطه، دیده می‌شود.

انرژی مطلوبتر آن است که، با دادن انرژی U در جهت گرفتن انرژی زوج‌گیری 2Δ ، یک الکترون به نقطه اضافه شود. بنابراین حالت‌های بار فرد با توجه به انرژی نامطلوب‌اند. الکترون‌ها به صورت زوج‌های کوپر به نقطه اضافه می‌شوند و نوسانهای کوئنی دارای دوره $2e$ خواهند بود. این موضوع در شکل ۲۵ نشان داده شده است. این وضعیت علامت شایان توجهی برای زوج‌گیری کوپری است.

ویژگیهای ارتعاشی و گرمایی

برای بررسی ویژگیهای ارتعاشی نانوساختارها از توصیفی پیوستاری از ویژگیهای کشسان آغاز می‌کنیم. این روش مانند به‌کارگیری ساختار نواری به صورت نقطهٔ شروعی برای توصیف ویژگیهای الکترونی است. این کار برای همهٔ نانوساختارها، مگر کوچکترینشان، تقریب خوبی است.

به‌طور عام، یک ماتریس مؤلفه‌های تنش و کرنش را در جامد به هم مربوط می‌کند. تنش در راستای

یک محور، کرنشی در راستای آن محور ایجاد می‌کند، ولی در راستای محورهای دیگر نیز کرنشهایی به وجود می‌آورد. برای مثال، مکعبی که در راستای یکی از محورهایش کشیده شده باشد، نوعاً تا حدودی در راستای محورهای عمود بر آن منقبض می‌شود. در ادامه برای ساده کردن بحث، از عنصرهای غیرقطری چشم خواهیم پوشید، و ماتریس تنش-کرنش را به صورت قطری و همسانگرد در نظر می‌گیریم. به عبارت دیگر، کرنشها تنها در جهت تنش رخ می‌دهند، و بزرگی آنها مستقل از جهت محور است. بررسی کاملتر را می‌توان در کتابهای پیشرفته مکانیک یافت.

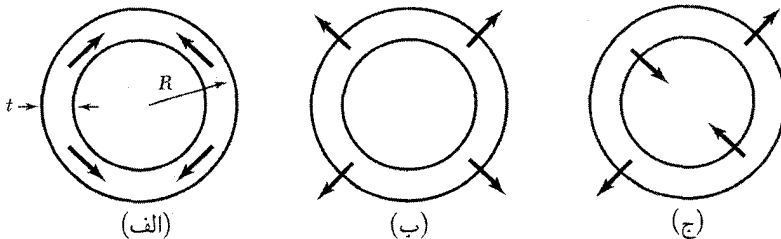
مدهای ارتعاشی کوانتیده

در جامد ۱D یا 0° ، درست همان‌گونه که درجه‌های آزادی الکترونی کوانتیده‌اند، بسامدهای ارتعاشی گسسته می‌شوند. مدهای کم بسامد پیوسته وابسته به مدهای اکوستیکی، $\omega = v_s K$ ، در عوض به رشته‌ای از بسامدهای گسسته ω تبدیل می‌شوند. جزئیات دقیق بسامد و بردار موجها به شکل و شرایط مرزی جامد بستگی دارد. مثالی بیانگر این مطلب ارتعاشهای حول محیط استوانه نازکی به شعاع R و ضخامت $h \ll R$ است، که در شکل ۲۶ نشان داده شده است. در شکل ۲۶(الف) مد اکوستیکی طولی کوانتیده نمایش داده شده است. بسامدهای مجاز را می‌توان با اعمال شرایط مرزی دوره‌ای حول محیط استوانه به دست آورد:

$$K_j = j/R; \quad \omega_{Lj} = (v_L/R)_j; \quad j = 1, 2, \dots \quad (69)$$

مد دیگر که مد تنفسی شعاعی (RBM) نام دارد، در شکل ۲۶(ب) نشان داده شده است. شعاع استوانه به طور یکنواخت منبسط و منقبض می‌شود، و کشش و تراکم محیطی به وجود می‌آورد. با استفاده از نظریه کشسانی، انرژی کشسان وابسته به کرنش e در محیط همسانگرد از رابطه زیر به دست می‌آید

$$U_{JK} = \frac{1}{2} \int_V Y e^2 dV \quad (70)$$



شکل ۲۶. مدهای ارتعاشی بنیادی استوانه‌ای با دیوار نازک. تصویر (الف) مد انقباضی طولی است، (ب) مد تنفسی شعاعی (RBM)، و (ج) مد عرضی است.

که در آن Y مدول کشسانی (یانگ) است. کرنش استوانه به ازای تغییر شعاع dr برابر است با $\epsilon = dr/R$ که در نتیجه داریم

$$U_{کل} = \frac{YV}{2R^2}(dr)^2 \quad (71)$$

که در آن V حجم استوانه است. معادله (۷۱) به صورت انرژی فنر قانون هوک است که در آن ثابت فنر با YV/R^2 داده می‌شود. در نتیجه بسامد ارتعاشی برابر است با

$$\omega_{RBM} = (YV/MR^2)^{1/2} = (Y/\rho)^{1/2}/R = v_L/R \quad (72)$$

که در گام آخر سرعت صوت طولی $v_L = \sqrt{Y/\rho}$ را تعریف کرده‌ایم. رده آخر مدهای کوانتیده در اطراف محیط، متناظر با مدهای اکوستیکی عرضی در شکل ۲۶ (ج) نشان داده شده است. بردارهای موج و بسامدهای این مدها را رابطه‌های زیر داده می‌شوند

$$K_j = j/R; \quad \omega_{Tj} \cong \frac{v_L K_j^2}{\sqrt{12}R^2}; \quad j = 1, 2, \dots \quad (73)$$

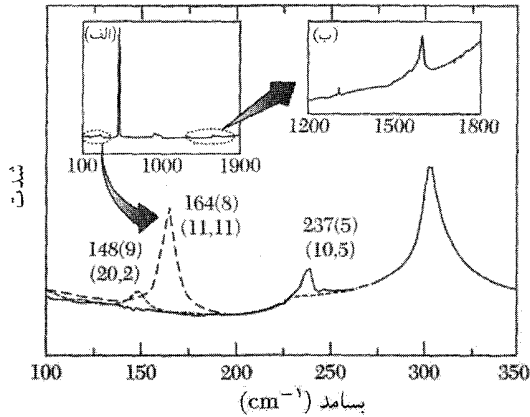
توجه کنید که بسامد به گونه K_j^2 مقیاس بندی می‌شود. منشأ این رفتار در ادامه بررسی خواهد شد. مدهای ارتعاشی کوانتیده را می‌توان به روشهای گوناگون اندازه‌گیری کرد. روشی که به‌طور گسترده برای گمانه‌زنی ساختار ارتعاشی تک‌تک اشیاء نانومقیاس مورد استفاده قرار می‌گیرد، طیف‌نمایی رامان است (فصل ۱۵ را ببینید). طیف‌نمایی رامان تک‌نانولوله‌ها در شکل ۲۷ نشان داده شده است. در نانولوله، $v_L = 21 \text{ km/s}$ ، و انرژی مد تنفسی شعاعی با استفاده از رابطه (۷۲) برابر است با

$$\hbar\omega_{RBM} = 14 \text{ meV}/R[\text{nm}]$$

مقدارهای اندازه‌گیری شده سازگاری خوبی با این عبارت دارند. در نتیجه از اندازه‌گیریهای RBM می‌توان به صورت ابزار تشخیصی برای یافتن شعاع نانولوله استفاده کرد.

ارتعاشهای عرضی

اکنون به فونونهایی می‌پردازیم که در جهت محور یک شیء باریک دراز، نظیر استوانه‌ای که در بخش قبل مطرح شد، یا میله جامد نازک (شکل ۲۸) منتشر می‌شوند. فونونهای طولی مشابه مورد ^3D با پاشیدگی $\omega = v_L K$ دارند، که در آن K بردار موج پیوسته است. ولی برای فونونهای عرضی با طول‌موجهای بزرگتر از ضخامت h میله یک اصلاح بنیادی وجود دارد. جامد به جای آنکه، همانند مورد فونونهای عرضی حجمی، برش داده شود، به‌گونه‌ای که در شکل ۲۸ (الف) نشان داده شده است، خم می‌شود. این وضعیت



شکل ۲۷. طیفهای رامان تک تک نانولوله های کربنی. بسامدهای مد تنفسی شعاعی در بخش اصلی شکل، با عنوانهای ساختاری (n, m) ، شاخص گذاری شده اند. گوشزد: $۲۰ \text{ meV} \cong ۱۶۰ \text{ cm}^{-۱}$.

همانند مسئله کلاسیکی امواج خمشی عرضی در میله است. انرژی خمش از تراکم/کشش طولی جامد در راستای انحناهای داخلی/خارجی خم می آید. در ادامه نشان خواهیم داد که وابستگی خطی به بردار موج $\omega_T = v_T K$ ، که مشخصه جامد حجیم است، به پاشیدگی درجه دو بر حسب K تغییر می کند. یک موج ساکن عرضی روی یک میله مستطیلی جامد به ضخامت h ، عرض w ، و طول L در نظر بگیرید، که جابه جایی آن با رابطه $y(z, t) = y_0 \cos(Kz - \omega t)$ داده شود. کرنش (نقطه مفروضی در داخل میله از انحنای موضعی و فاصله t از خط مرکزی میله (شکل ۲۸ الف) داده می شود:

$$e = -(\partial^2 y / \partial z^2) t = K^2 y t \quad (۷۴)$$

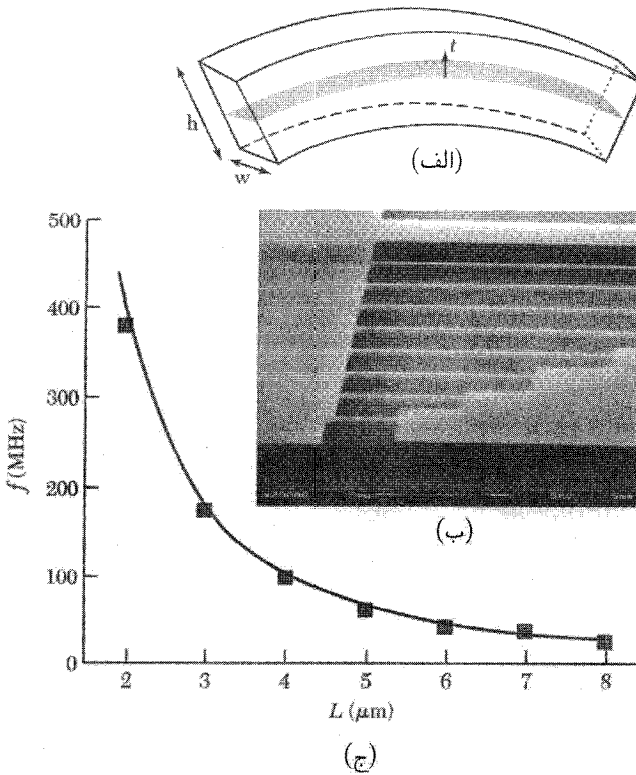
باز هم انرژی کل وابسته به این کرنش از رابطه (۷۰) به دست می آید:

$$U_{کل} = \frac{YV}{2} \int_0^L \int_{-h/2}^{h/2} (K^2 y t)^2 dt dz = YVK^2 h^2 \langle y^2 \rangle / 24 \quad (۷۵)$$

که در آن $\langle y^2 \rangle$ روی یک دوره نوسان متوسط گیری می شود. باز این رابطه ثابت مؤثر فنر را به دست می دهد، و پس از طی گامهایی مانند روابط (۷۰) تا (۷۲)، بسامد نوسان زیر به دست می آید:

$$\omega_T = v_L h K^2 / \sqrt{12} \quad (۷۶)$$

توجه کنید که بسامد به سرعت صوت طولی بستگی دارد، نه به سرعت صوت عرضی، زیرا در اینجا، مد ماهیتی اساساً تراکمی دارد. این بسامد دیگر تابعی خطی از K نیست، زیرا با افزایش انحنا، یعنی افزایش



شکل ۲۸. (الف) تنشهای موجود در میله خم شده که بخش داخلی تحت تراکم و بخش خارجی تحت کشش را نشان می دهد. (ب) میکرونگاشت SEM رشته های از میله های Si آویخته با طولهای متغیر L ، و بسامد شدید اندازه گیری شده به صورت تابعی از L . (ج) خط برازشی است با شکل تابعی $f = B/L^2$ ، که در آن B ثابت است.

K ، نیروی بازگرداننده مؤثر قویتر می شود. در مقابل، مد پیچشی که متناظر با پیچیدگی در راستای طول میله است، مشخصه برشی خود را حفظ می کند، و $K \propto$ پیش w .

مدهای ارتعاشی عرضی ای که توسط رابطه (۷۶) توصیف شدند، به دفعات در میله های میکرومقیاس و نانومقیاس مشاهده می شوند. مجموعه ای از میله های نانومقیاس، که با به کار بردن لیتوگرافی باریکه الکترونی و حکاکی در Si ساخته شده اند، در شکل ۲۸ (ب) نشان داده شده اند. بسامدهای وابسته به تشدید اصلی $K_1 = 2\pi/L$ این میله ها، همان گونه که از رابطه (۷۶) انتظار می رود، به صورت $1/L^2$ مقیاس بندی می شوند (شکل ۲۸ ج).

توجه کنید که اصلاح رابطه پاشیدگی رابطه (۷۶) برای مدهای عرضی با طول موج بلند منحصر به دستگاه های نانومقیاس نیست. تنها در بایست آن است که هندسه دستگاه به صورت میله نازک یا تیغه باشد

که در آن بعد عرضی h کوچکتر از طول موج است، یعنی $Kh \ll 1$. برای مثال، تیغه‌های یک سردرگیر AFM که در مد غیرتماسی کار می‌کنند، همان‌گونه که پیش از این مطرح شد، به خوبی با این رابطه توصیف می‌شوند. رابطه پاشیدگی (۷۶) به وابستگی $K^2 \sim \omega$ نیز مربوط می‌شود. این وابستگی در رابطه (۷۳)، برای رده‌های مدهایی به دست آمد، که در شکل ۲۶ (ج) نشان داده شده‌اند. هر دوی این رابطه‌ها ارتعاشهای خمشی عرضی را توصیف می‌کنند، یکی برای میله و دیگری برای پوسته نازک.

با استفاده از روشهای برگرفته از پردازش میکروالکترونیکی، انقلابی در ساخت ساختارهای مکانیکی پیچیده کوچک در راه است. باریکه‌هایی که در شکل ۲۸ (ب) نشان داده شده‌اند، نمونه ساده‌ای از این ساختارهایند. این ساختارها را می‌توان با قطعات الکترونی تلفیق کرد، و دستگاههای میکروالکترومکانیکی (MEMS)^۱ و نانوالکترومکانیکی (NEMS)^۲ به وجود آورد. کاربردهای گوناگونی شامل حسگری، انبارش داده، و پردازش علامت، برای این دستگاهها، در حال بررسی است.

ظرفیت گرمایی و ترابرد گرما

رابطه‌های بالا نشان می‌دهند که انرژیهای مد ارتعاشی کوانتیده در دمای اتاق نوعاً کوچکتر از $k_B T$ است، مگر در کوچکترین ساختارها. بنابراین، در دمای اتاق مدهایی که در جهت‌های محبوس‌اند، برانگیخته می‌شوند. در نتیجه ویژگیهای گرمایی شبکه‌ای نانو ساختارها مشابه همتهای حجمی آنهاست. به‌ویژه ظرفیت گرمایی و رسانندگی گرمایی آنها، همانند جامد ۳D (فصل ۵) با T^3 متناسب خواهد بود.

ولی، در دمای پایین برانگیختگیهای ارتعاشی با بسامد ω وقتی $\hbar\omega/k_B < T$ ، در جهت‌های محبوس، یخ می‌زنند. در ساختار نازک بلند، دستگاه در دماهای به قدر کافی پایین مانند دستگاه گرمایی ۱D رفتار خواهد کرد، با مجموعه‌ای از زیرنوارهای فونونی ۱D و همانند زیرنوارهای الکترونی ۱D که در شکل ۹ نشان داده شد. با محاسبه‌ای همانند آنچه در فصل ۵ در جامد ۳D انجام شد، درمی‌یابیم که ظرفیت گرمایی به‌ازای هر زیرنوار فونون اکوستیکی ۱D با پاشیدگی $\omega = vk$ ، از رابطه زیر به دست می‌آید (مسئله ۶)

$$C_V^{(1D)} = 2\pi^2 L k_B^2 T / 3\hbar v \quad (77)$$

رسانندگی گرمایی G_{th} سیم به صورت نسبت انرژی خالصی که در سیم شارش می‌کند، تقسیم بر اختلاف دمای ΔT بین دو سر آن تعریف می‌شود. رسانندگی گرمایی به‌ازای هر زیرنوار فونونی ۱D، $G_{th}^{(1D)}$ ، برابر است با

$$G_{th}^{(1D)} = (\pi^2 k_B^2 T / 3\hbar) \tilde{\gamma} \quad (78)$$

این نتیجه در مسئله ۶ با استفاده از رهیافتی مانند آنچه برای استخراج فرمول لاندائر برای رسانندگی یک کانال ۱D اتخاذ شد، استخراج می‌شود. توجه کنید که $\tilde{\gamma}$ ، اینک، احتمال تراکسیل فونونها از ساختار است.

برای یک مد خمشی عرضی، که در آن $\omega \propto K^2$ ، نتیجه (۷۷) تصحیح می‌شود، ولی رابطه (۷۸) به همین صورت باقی می‌ماند.

هر دو رابطه (۷۷) و (۷۸)، برخلاف نتیجه T^3 برای ۳D، بر حسب دما خطی‌اند. این اختلاف، منعکس‌کننده تعداد مدهایی است که انرژیهای $\hbar\omega < k_B T$ با، هم‌ارز آنها، بردار موجهای $K < k_B T / \hbar v$ دارند. تعداد مدها به گونه K^D مقیاس‌بندی می‌شود، که در آن D تعداد بُعد است؛ این عبارت در حالت سه‌بعدی به نتیجه T^3 و در حالت یک‌بعدی به نتیجه T منجر می‌شود.

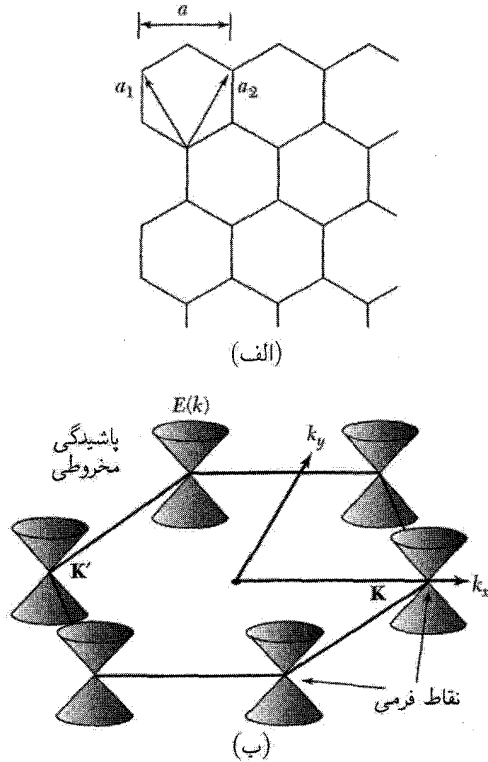
توجه کنید که در فونونهایی که به‌طور کامل در کانال تراکسیل می‌شوند، رسانندگی گرمایی رابطه (۷۸) تنها با ثابتهای بنیادی و دمای مطلق تعیین می‌شود. این نتیجه همانند رسانندگی الکترونی کوانتیده رابطه (۲۱) مربوط به کانال ۱D است، که مستقل از سرعت الکترون در کانال بود. در آزمایشهایی که در دمای بسیار پایین روی سیمهای نازک انجام شده، هم رسانندگی گرمایی بالیستیکی (۷۸)، و هم شکل ۱D ظرفیت گرمایی رابطه (۷۷)، هر دو مشاهده شده‌اند.

چکیده

- به کمک گمانه‌های فضای واقعی می‌توان تصویرهایی در مقیاس اتمی از نانو ساختارها به‌دست آورد.
- چگالی حالت‌های زیرنوار ۱D، $D(E) = \sqrt{L/\hbar v}$ ، در آستانه‌های زیرنواری واگرا می‌شود. این واگراییها را تکینگیهای وان‌هوف می‌نامند.
- رسانندگی الکتریکی دستگاه ۱D با فرمول لاندائز، $G = (2e^2/h)$ ، داده می‌شود که در آن \hbar ضریب تراکسیل از نمونه است.
- رسانندگی دستگاه شبه ۱D ممکن است قویاً تحت تأثیر تداخل کوانتومی بین مسیره‌های الکترونی‌ای که نمونه را می‌پیمایند قرار گیرد و به تونل‌زنی تشدید، جایگزیدگی، و اثر آهارانوف-بوم منجر شود.
- ویژگیهای ایتیکی نقطه کوانتومی را می‌توان با تغییر اندازه آن، و در نتیجه ترازهای انرژی کوانتیده آن تنظیم کرد.
- افزایش بار اضافی e به یک نقطه کوانتومی مستلزم یک پتانسیل الکتروشیمیایی اضافی به اندازه $U + \Delta\epsilon$ است، که در آن U انرژی بارگیری و $\Delta\epsilon$ فاصله بین تراز است.
- مدهای ارتعاشی یک شیء با مقیاس نانومتری کوانتیده‌اند.

مسائل

۱. ساختار نواری نانولوله کربنی. شبکه گرافین با بردارهای انتقال بسیط شبکه به طول $a = 0.246 \text{ nm}$ ، همراه با منطقه اول بریلوئن در شکل ۲۹ نشان داده شده است. (الف) مجموعه بردارهای شبکه وارون G وابسته



شکل ۲۹. (الف) شبکه گرافین و (ب) منطقه اول بریلوئن شبکه گرافین که پاشیدگی مخروطی انرژی را در نزدیکی نقطه‌های K و K' نشان می‌دهد.

به این شبکه را بیابید. (ب) طول بردارهای K و K' را که در شکل ۲۹ نشان داده شده‌اند، برحسب a پیدا کنید. برای انرژیهای نزدیک به انرژی فرمی و بردار موجهای نزدیک به نقطه K ، ساختار نواری ۲D را می‌توان به صورت زیر تقریب زد

$$\epsilon = \pm \hbar v_F |\Delta k| \quad \Delta k = k - K$$

که در آن $v_F = 8 \times 10^5 \text{ m/s}$. تقریب مشابهی در نزدیکی نقطه K' برقرار است. لوله‌ای را در نظر بگیرید که به موازات محور x با محیطی برابر na پیچیده شده است. با اعمال شرایط مرزی دوره‌ای در راستای پیچش، می‌توان رابطه پاشیدگی زیرنوار ۱D را در نزدیکی نقطه K یافت. (ج) نشان دهید که اگر n بر ۳ بخش پذیر باشد، یک زیرنوار "بی جرم" وجود دارد که انرژی آن برحسب Δk_y خطی است. این زیرنوار را ترسیم کنید. این نانولوله‌ها فلزهای ۱D هستند. (د) اگر n بر ۳ بخش پذیر نباشد، ساختار زیرنواری

ساختاری است که در شکل ۱۰ نشان داده شده است. برای مورد $m = 10$ ، بزرگی گاف نواری نیمرسانا ϵ_{11} را برحسب eV به دست آورید، و نشان دهید که $2 = \epsilon_{22}/\epsilon_{11}$. (ه) بار دیگر برای حالت $m = 10$ ، نشان دهید که رابطه پاشیدگی پایینترین زیرنوار الکترونی به شکل ذره نسبی، $\epsilon^2 = (m^*c^2)^2 + (pc)^2$ است که در آن v_F نقش سرعت نور را دارد، و نسبت جرم مؤثر m^* به جرم الکترون آزاد m را به دست آورید.

۲. پرشدن زیرنوارها. برای الکترونهاى موجود در سیم مربعی GaAs به عرض 20 nm ، چگالی خطی الکترونی ای را محاسبه کنید که برای آن زیرنوار $n_x = 2$ و $n_y = 1$ اولین زیرنوار است که در تعادل در دمای $T = 0$ اشغال می شود. فرض کنید که یک پتانسیل محدودکننده نامتناهی در مرز سیم اعمال شده باشد.

۳. شکل برایت-ویگنر برای تشدید تراگسیلی. هدف این مسئله، استخراج رابطه (۳۳) از (۲۹) است. (الف) با بسط کسینوس به ازای اختلاف فازهای کوچک در فاز و تغییرات کوچک در انرژی برقرار است: $\delta\epsilon/\Delta\epsilon = \delta\varphi/2\pi$ ، شکل ساده شده ای برای رابطه (۲۹) به دست آورید که تنها شامل $|t_1|^2$ ، $|t_2|^2$ ، و $\delta\varphi$ باشد. (ب) نشان دهید که برای حالت های درون جعبه ۱D، این رابطه بین تغییرات کوچک در فاز و تغییرات کوچک در انرژی برقرار است: $\delta\epsilon/\Delta\epsilon = \delta\varphi/2\pi$ که در آن $\Delta\epsilon$ فاصله بین تراز است. (ج) با ترکیب (الف) و (ب) رابطه (۳۳) را به دست آورید.

۴. سدهای متوالی و قانون اهم. (الف) رابطه (۳۶) را از (۳۵) استخراج کنید. (ب) نشان دهید که رسانندگی ۱D σ_{1D} درود، $\sigma_{1D} = n_{1D}e^2\tau/m$ ، را می توان به صورت $\sigma_{1D} = (2e^2/h)\ell_B$ نوشت. (تذکر: آهنگ واهلش تکانه و آهنگهای پس پراکندگی طبق رابطه $1/\tau = 2/T_B$ به یکدیگر مربوط می شوند، زیرا اولی متناظر است با واهلش از \mathbf{p} به صفر، در حالی که دومی متناظر است با واهلش از \mathbf{p} به $-\mathbf{p}$).

۵. انرژیهای نقطه کوانتومی کروی. (الف) فرمول (۶۳) را برای انرژی بارگیری استخراج کنید. (ب) نشان دهید که این نتیجه، برای $d \ll R$ ، با نتیجه ای که با استفاده از نتیجه مربوط به خازن با تیغه های موازی، $C = \epsilon\epsilon_0 A/d$ ، به دست می آید، یکی است. (ج) برای مورد نقطه منزوی، $d \rightarrow \infty$ ، نسبت انرژی بارگیری به پایینترین تراز انرژی کوانتیده را به دست آورید. پاسخ خود را برحسب شعاع R نقطه و شعاع مؤثر بور a_B^* بیان کنید.

۶. ویژگیهای گرمایی در ۱D. (الف) فرمول (۷۷) را برای ظرفیت گرمایی در دمای پایین یک تک مد فونونی ۱D در تقریب دبی به دست آورید. (ب) رابطه (۷۸) را برای رسانندگی گرمایی مد فونونی ۱D بین دو منبع از طریق محاسبه شارش خروجی انرژی از یک منبع در دمای T_1 ، و کاستن شارش انرژی از منبع دیگر در دمای T_2 ، از آن استخراج کنید. رهیافتی را همانند رهیافت به کار برده شده برای به دست آوردن روابط (۲۰) و (۲۴) برای رسانندگی الکتریکی به کار برید.

جامدهای نانوبلورین

واژه‌های جامد بی‌شکل، جامد نابلورین، جامد بی‌نظم، شیشه، یا مایع دارای هیچ مفهوم ساختاری دقیقی افزون بر این توصیف نیستند که «ساختار در هیچ مقیاس معنی‌داری بلورین نیست.» نظم ساختاری اصلی موجود را فاصله تقریباً ثابت اتمها یا مولکولهای همسایه اول برقرار می‌کند. در این بحث، آلیاژهای بلورین بی‌نظم (فصل ۲۲) را که در آنها اتمهای مختلف به‌طور کاتوره‌ای جایگاههای شبکه بلوری منظم را اشغال می‌کنند، در نظر نمی‌گیریم.

نقش پراش

نقش پراش پرتو x یا نوترون از ماده بی‌شکلی مانند مایع یا شیشه وقتی بر صفحه‌ای عمود بر باریکه پرتو x فرودی مشاهده شود، شامل یک یا چند حلقه پخشی پهن است. این نقش با نقش پراش ماده بلورین یودر شده، که تعداد زیادی حلقه‌های نسبتاً تیز، مانند شکل ۱۷ از فصل ۲، را نشان می‌دهد، تفاوت دارد. از این نتیجه متوجه می‌شویم که مایع دارای واحدی ساختاری، که خود را به‌طور یکسان به فواصل دوره‌ای در سه بعد تکرار می‌کند، نیست.

مکان اتمها در مایع تک‌اتمی ساده، نسبت به هراتمی که مبدأ در نظر گرفته شود فقط ساختار کوتاه‌بردی را نشان می‌دهد. هرگز مرکز اتم دیگر را نزدیکتر از فاصله‌ای معادل با قطر اتمی نمی‌یابیم، ولی تقریباً در این فاصله انتظار داریم حدوداً تعداد اتمهای همسایه اول را بیابیم، که در شکل بلورین این ماده وجود دارند. با وجودی که نقش پرتو x ماده بی‌شکل نوعی کاملاً با نقش ماده بلورین نوعی تفاوت دارد، هیچ حد فاصل تیزی بین آنها وجود ندارد. در نمونه‌های پودری بلورین با اندازه ذره کوچک و کوچکتر، خطوط نقش پراش به‌طور پیوسته پهن می‌شوند، و در ذرات بلورین به اندازه کافی کوچک، این نقش شبیه به نقش بی‌شکل مایع یا شیشه می‌شود.

از نقش پراش شیشه یا مایع نوعی، که شامل سه یا چهار حلقه پخشی است، تنها کمیتی که مستقیماً می‌تواند تعیین شود، تابع توزیع شعاعی است. این کمیت با استفاده از تحلیل فوریه منحنی پراکندگی پرتو x تجربی به‌دست می‌آید. روش تحلیل فوریه به‌طور یکسان در مورد مایع، شیشه، یا ماده بلورین پودر شده به‌کار می‌رود. مناسب است که تحلیل نقش پراش را با معادله ۴۳ از فصل ۲ شروع کنیم. به‌جای نوشتن عامل ساختار پایه، مجموع همه اتمهای موجود در نمونه را می‌نویسیم. علاوه بر این، به‌جای اینکه به‌طور ویژه به پراکندگی مربوط به بردارهای شبکه وارون، G ، مشخصه بلور بپردازیم، بردارهای پراکندگی دلخواه $\Delta k = k' - k$ را، مانند شکل ۶ از فصل ۲، در نظر می‌گیریم. چنین می‌کنیم، زیرا پراکندگی از مواد بی‌شکل به بردارهای شبکه وارون، که در هیچ رویدادی نمی‌تواند تعریف شود، محدود نمی‌شود. بنابراین دامنه پراکنده‌شده از یک ماده بی‌شکل چنین توصیف می‌شود

$$S(\Delta k) = \sum_m f_m \exp(-i\Delta k \cdot r_m) \quad (1)$$

که f_m ، همانند معادله ۵۰ از فصل ۲، عامل شکل اتمی اتم است. این مجموع روی تمامی اتمهای موجود در نمونه است.

شدت پراکنده‌شده در بردار پراکنده Δk برحسب واحدهای مربوط به پراکندگی از یک تک‌الکترون با رابطه زیر بیان می‌شود:

$$I(\Delta k) = S^* S = \sum_m \sum_n f_m f_n \exp[i\Delta k \cdot (r_m - r_n)] \quad (2)$$

اگر α زاویه بین Δk و $r_m - r_n$ باشد، داریم

$$I(K, \alpha) = \sum_m \sum_n f_m f_n \exp(iK r_{mn} \cos \alpha) \quad (3)$$

که در آن K بزرگی Δk و r_{mn} بزرگی $r_m - r_n$ است.

در نمونه بی شکل بردار $r_m - r_n$ می تواند در هر جهتی باشد، در نتیجه از عامل فاز روی کره متوسط می گیریم:

$$\begin{aligned} \langle \exp(iKr \cos \alpha) \rangle &= \frac{1}{4\pi} \int_{-1}^1 d(\cos \alpha) \exp(iKr_{mn} \cos \alpha) \\ &= \frac{\sin Kr_{mn}}{Kr_{mn}} \end{aligned} \quad (4)$$

بنابراین نتیجه دبی را برای شدت پراکنده شده در Δk داریم:

$$I(K) = \sum_m \sum_n (f_m f_n \sin Kr_{mn}) / Kr_{mn} \quad (5)$$

مواد بی شکل تک اتمی

برای اتمهایی فقط از یک نوع، فرض می کنیم $f_m = f_n = f$ و جملات با $n = m$ را از جمع بندی (۵) جدا می کنیم. برای نمونه ای با N اتم داریم

$$I(K) = N f^2 \left[1 + \sum_m' (\sin Kr_{mn}) / Kr_{mn} \right] \quad (6)$$

این جمع بندی روی همه اتمهای m به جز اتم مبدأ $m = n$ است.

اگر $\rho(r)$ غلظت اتمها در فاصله r از اتم مرجع باشد، می توان رابطه (۶) را به گونه زیر نوشت

$$I(K) = N f^2 \left[1 + \int_0^R dr 4\pi r^2 \rho(r) (\sin Kr) / Kr \right] \quad (7)$$

که در آن R شعاع (بسیار بزرگ) نمونه است. فرض می کنیم ρ_0 غلظت متوسط باشد؛ در این صورت رابطه (۷) را می توان چنین نوشت

$$I(K) = N f^2 \left\{ 1 + \int_0^R dr 4\pi r^2 [\rho(r) - \rho_0] (\sin Kr) / Kr + (\rho_0 / K) \int_0^R dr 4\pi r \sin Kr \right\} \quad (8)$$

انتگرال دوم در رابطه (۸) پراکندگی را از یک غلظت یکنواخت ارائه می دهد و بجز در ناحیه رویه جلوی زوایای بسیار کوچک می توان از آن چشم پوشید؛ وقتی $R \rightarrow \infty$ ، این انتگرال در $K = 0$ به تابع دلتا تبدیل می شود.

تابع توزیع شعاعی

مناسب است که عامل ساختار مایع را با رابطه زیر تعریف کنیم

$$S(K) = I/Nf^2 \quad (9)$$

توجه کنید که این رابطه به هیچ وجه با $S(\Delta k)$ در رابطه (۱) یکسان نیست. پس از حذف سهم تابع دلتا، از رابطه (۸) داریم

$$S(K) = 1 + \int_0^\infty dr 4\pi r^2 [\rho(r) - \rho_0] (\sin Kr) / Kr \quad (10)$$

تابع توزیع شعاعی $g(r)$ را به گونه‌ای تعریف می‌کنیم که

$$\rho(r) = g(r)\rho_0 \quad (11)$$

در نتیجه، چون $(\sin Kr)/Kr$ جمله‌ای به گونه‌ی کروی متقارن (یا جمله s) در بسط $\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})$ است، رابطه (۱۰) به صورت زیر در می‌آید

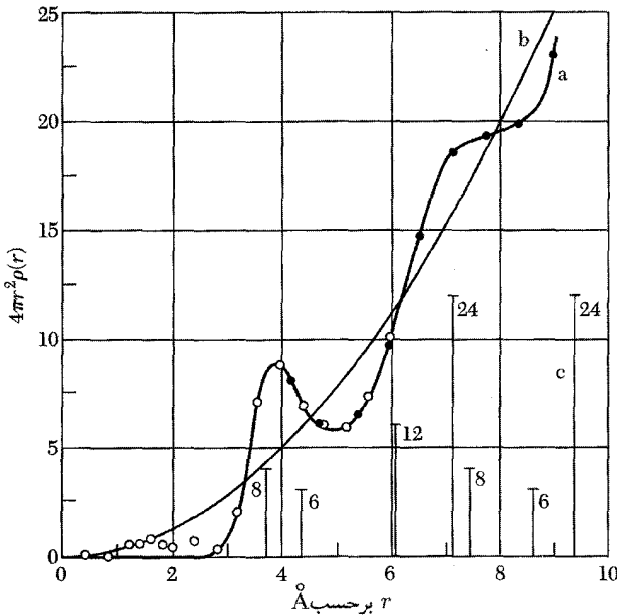
$$\begin{aligned} S(K) &= 1 + 4\pi\rho_0 \int_0^\infty dr [g(r) - 1] r^2 (\sin Kr) / Kr \\ &= 1 + \rho_0 \int d\mathbf{r} [g(r) - 1] \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (12)$$

با استفاده از قضیه انتگرال فوریه در سه بعد،

$$\begin{aligned} g(r) - 1 &= \frac{1}{4\pi^2\rho_0} \int d\mathbf{K} [S(K) - 1] \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{4\pi^2\rho_0 r} \int dK [S(K) - 1] K \sin Kr \end{aligned} \quad (13)$$

این نتیجه باعث می‌شود که تابع توزیع شعاعی $g(r)$ (که تابع همبستگی دوامی نیز نامیده می‌شود) را با استفاده از عامل ساختار اندازه‌گیری شده $S(K)$ محاسبه کنیم.

یکی از ساده‌ترین مایعاتی که به خوبی با بررسی پراش پروتو x توافقی دارد سدیم مایع است. نمودار توزیع شعاعی $4\pi r^2 \rho(r)$ بر حسب r همراه با توزیع همسایه‌ها در سدیم بلورین در شکل ۱ ارائه شده است.



شکل ۱. (الف) منحنی توزیع شعاعی $4\pi r^2 \rho(r)$ برای سدیم مایع. (ب) منحنی چگالی متوسط $4\pi r^2 \rho_0$. (ج) توزیع همسایه‌ها در سدیم بلورین.

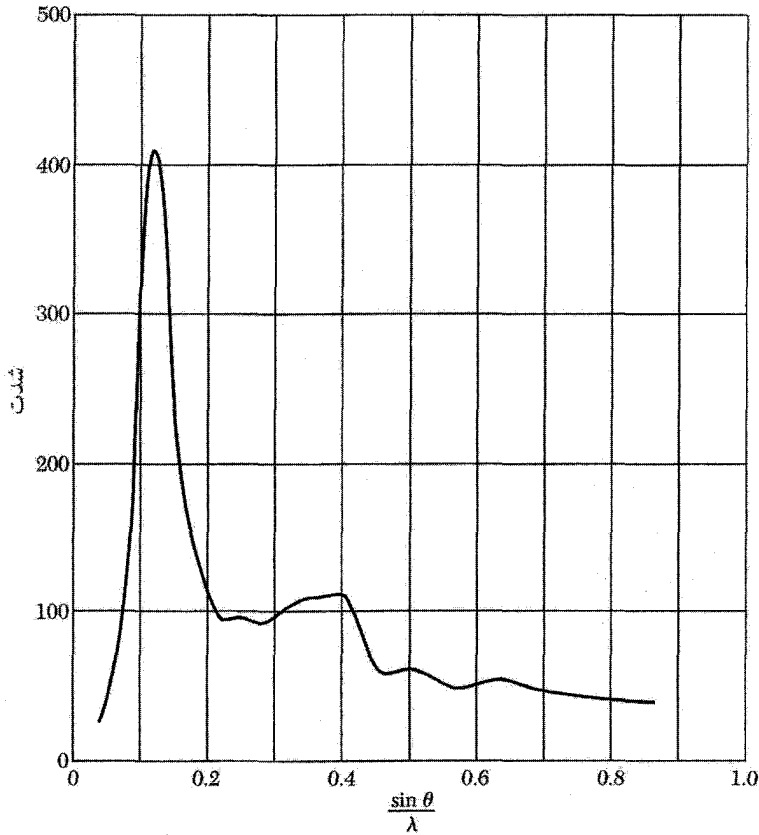
ساختار سیلیس شیشه‌ای، SiO_2

سیلیس شیشه‌ای (کوارتز همجوش) یک شیشه ساده است. منحنی پراکندگی پرتو x در شکل ۲ و منحنی توزیع شعاعی $4\pi r^2 \rho(r)$ در شکل ۳ اراقه شده است. چون دو نوع اتم وجود دارند، در حقیقت عبارت از برهم‌نهی دو منحنی غلظت الکترونی است، یکی حول یک اتم سیلیسیم به عنوان مبدأ و یکی حول اتم اکسیژن.

نخستین قله در 1.62 \AA و در نزدیکی فاصله متوسط Si-O است که در سیلیکات بلورین یافت می‌شود. پژوهشگران پرتو x از شدت نخستین قله نتیجه گرفتند که هر اتم سیلیسیم به گونه چهاروجهی با چهار اتم اکسیژن احاطه شده است. مقادیر نسبی Si و O نشان می‌دهند که هر اتم O به دو اتم Si پیوند شده است. با استفاده از هندسه چهاروجهی، فاصله O-O باید برابر با 2.65 \AA باشد، که با فاصله نشان داده شده در شانه شکل ۳ سازگار است.

نتایج پرتو x با مدل استاندارد شیشه‌ای اکسیدی، که مرهون تلاش زاخاریاسن^۱ است، توافق دارد. شکل ۴ ساختار بی‌نظم شیشه و ساختار تکراری منظم بلور با همان ترکیب شیمیایی را در دو بعد نشان

1. Zachariasen

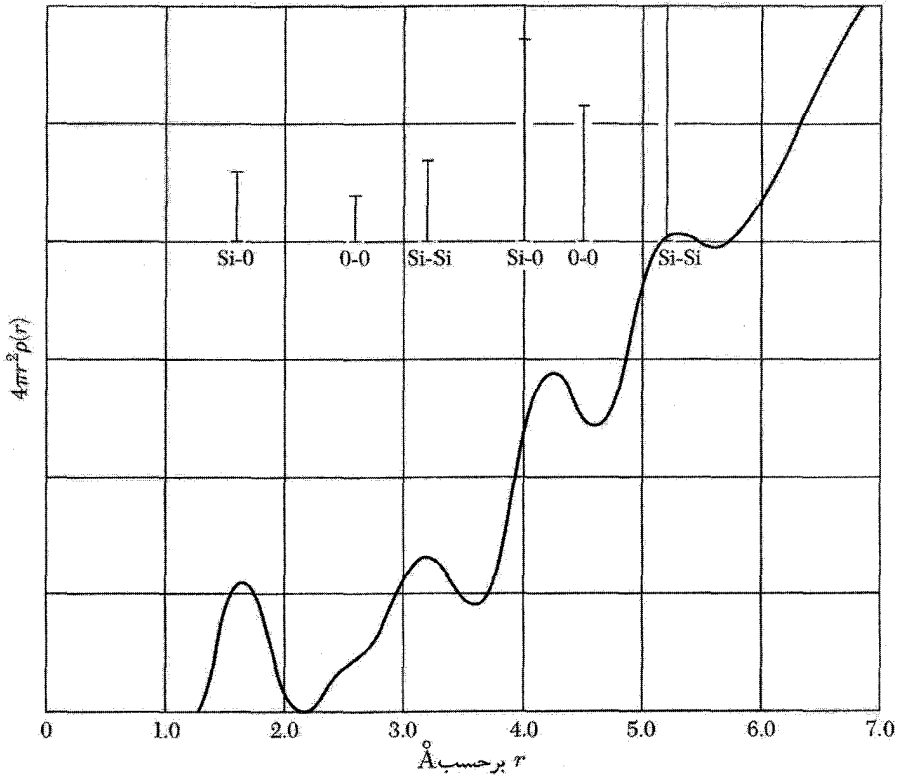


شکل ۲. شدت پرتو x پراکنده شده برحسب زاویه پراکندگی θ ، برای SiO_2 شیشه‌ای.

می‌دهد. نتایج پرتو x کاملاً با ترسیم سیلیس شیشه‌ای به صورت شبکه‌ای کاتوره‌ای بیان می‌شوند، که در آن هر سیلیسیم به‌طور چهاروجهی با چهار اکسیژن احاطه شده، هر اکسیژن به دو سیلیسیم پیوند شده، و این دو پیوند با اکسیژن تقریباً به‌صورت قطری و در مقابل هم قرار دارند. سمتگیری یک گروه چهاروجهی نسبت به گروه مجاور حول پیوند Si-O-Si می‌تواند عملاً کاتوره‌ای باشد. در اینجا طرح ساختاری معینی درگیر است: هر اتم دارای تعداد معلومی همسایه اول در فاصله معینی است، ولی هیچ واحد ساختاری به‌طور یکسان خود را در فواصل منظم در سه بعد تکرار نمی‌کند و بنابراین ماده بلورین نیست.

تشریح نتایج پرتو x با فرض اینکه سیلیس شیشه‌ای شامل بلورهای بسیار کوچک با شکل بلورین کوارتز، مانند کریستوبالیت^۱، است، امکان‌پذیر نیست. پراکندگی زاویه کوچک پرتو x مشاهده نشده است،

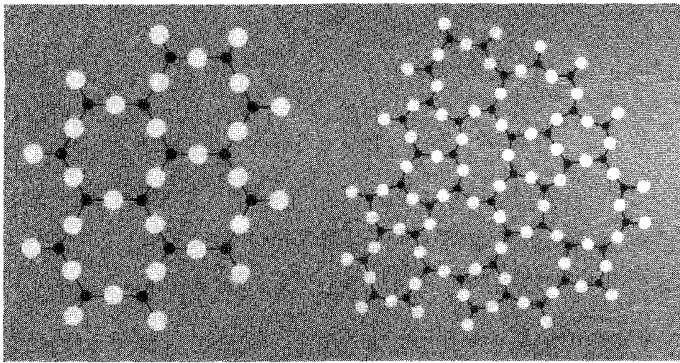
1. Cristoballite



شکل ۳. منحنی توزیع شعاعی برای SiO_2 شیشه‌ای به صورت تبدیل فوریۀ شکل ۲. موقعیت قله‌ها فاصله اتمها را از سیلیسیم یا اکسیژن نشان می‌دهد. با استفاده از مساحت زیر قله‌ها محاسبۀ تعداد همسایه‌ها در آن فاصله امکان‌پذیر است. خطوط قائم نشانگر تعداد نخستین فواصل بین‌اتمی‌اند؛ ارتفاع این خطوط متناسب با مساحت‌های زیر قله‌هاست.

ولی می‌توان آن را از ذراتی گسسته که بین‌شان ترکها و فاصله‌هایی باشد انتظار داشت. حداقل برای بخش عمده‌ای از ماده، طرح پیوند در شیشه باید الزاماً پیوسته باشد، هرچند طرح هم‌آرایی حول هر اتم در سیلیسیم شیشه‌ای و کریستوبالیت بلورین یکسان است. همان‌گونه که در ادامه بحث می‌شود، رسانندگی گرمایی پایین شیشه در دمای اتاق نیز با مدل شبکه کاتوره‌ای پیوسته سازگار است.

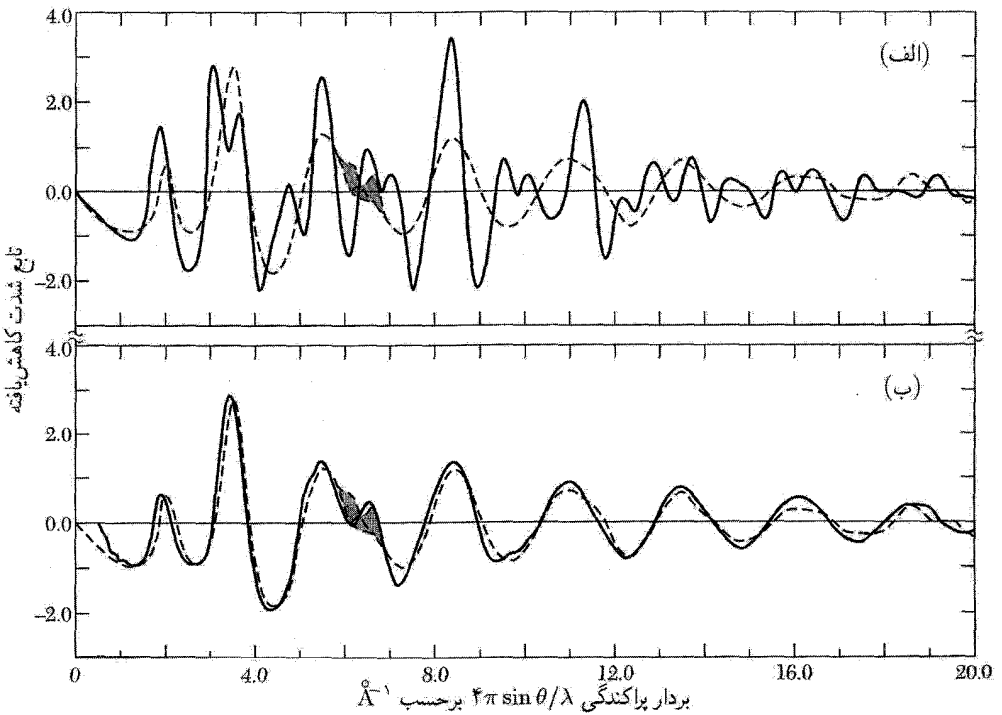
مقایسه نتایج تجربی و محاسبه‌شده شدت پرتو x برای ژرمانیم بی‌شکل در شکل ۵ نشان داده شده است. محاسبات در مورد مدل شبکه کاتوره‌ای و مدل میکروبلورکهاست. مدل دوم سازگاری بسیار ضعیفی ارائه می‌دهد. مدل شبکه کاتوره‌ای برای سیلیسیم بی‌شکل با بررسی‌های کارهای پژوهشی مربوط به گاف نواری و طیف‌سنجی روی پوسته ۲p تأیید می‌شود.



(الف)

(ب)

شکل ۴. مانسته‌های طرحواری دوبعدی که اختلاف‌های بین (الف) ساختار منظم تکراری بلور و (ب) شبکه کاتوره‌ای پیوسته شیشه را نشان می‌دهد.



شکل ۵. مقایسه شدت کاهش یافته تجربی (منحنی خط چین) و محاسبه شده (منحنی توپر) برای ژرمانیم بی شکل. (الف) ژرمانیم بی شکل در مقایسه با مدل میکروبلورک. (ب) ژرمانیم بی شکل در مقایسه با مدل شبکه کاتوره‌ای.

شیشه‌ها

شیشه دارای ساختار کاتوره‌ای مایعی است که از سرد کردن آن در زیر نقطه انجماد بدون تبلور به دست می‌آید. همچنین، شیشه دارای ویژگیهای کشسان جامد همسانگرد است.

بنابر توافق عام، می‌گوییم که مایع با سرد شدن، وقتی گرانروی آن معادل 10^{13} پواز می‌شود، تبدیل به شیشه می‌شود. پواز واحد گرانروی در CGS است.^۱ این امر دمای گذار شیشه، T_g ، را تعریف می‌کند. در دماهای بالاتر از T_g مایع و در پایین T_g شیشه داریم. این گذار یک گذار فاز ترمودینامیکی نیست، فقط گذاری برای «مقاصد عملی» است. مقدار 10^{13} پواز که برای تعریف T_g به‌کار برده شده اختیاری است، ولی غیرمنطقی نیست. اگر یک تیغه شیشه‌ای به ضخامت ۱ cm را به دو سطح قائم تخت موازی پیوند دهیم، تا وقتی گرانروی شیشه به زیر 10^{13} پواز کاهش یابد، طی مدت یک سال تحت اثر وزنش به‌طور محسوس جاری می‌شود (برای مقایسه، گرانروی پوسته خارجی زمین از مرتبه 10^{22} پواز است).

به‌طور نسبی چند مایع را می‌توان با سرعت کافی سرد کرد تا قبل از اینکه تبلور دخالت کند، شیشه تشکیل شود. مولکولهای بیشتر مواد در حالت مایع دارای تحرک پذیری به اندازه کافی‌اند، در نتیجه هنگام سرد کردن مایع-جامد، گذار ذوب مدتها قبل از اینکه گرانروی به 10^{13} پواز (10^{15} cp) برسد، رخ می‌دهد. آب مایع دارای گرانروی ۱ cP در نقطه انجماد است؛ گرانروی با منجمد شدن به شدت افزایش می‌یابد. اغلب می‌توان با نشان دادن باریکه فشرده‌ای از اتمهای بستر که تا دمای پایینی سرد می‌شود، شیشه را ساخت؛ این فرایندی است که گاهی لایه بی‌شکلی با خواص شیشه‌گونه تولید می‌کند. نوارهای بی‌شکل از برخی آلیاژهای فلز را می‌توان در کمیتهای صنعتی به این روش ساخت.

گرانروی و آهنگ جهش

گرانروی مایع به آهنگ بازآرایی گرمایی مولکولها در مقیاس موضعی بازآرایی به صورتی مربوط می‌شود، که مولکول با جهش به جایگاه تهی همسایه می‌رود یا جای خود را با مولکول همسایه عوض می‌کند. فیزیک فرایند ترابرد در اینجا تا حدودی با فیزیک گرانروی در فاز گازی تفاوت دارد، ولی گرانروی فاز گازی به نتایجی منجر می‌شود که به‌طور کیفی در حد پایینتری نسبت به فاز مایع قرار دارد، حدی که به جهش همسایه اول اتمها مربوط است.

نتیجه مربوط به گاز عبارت است از (TP ، ۳۴-۱۴)

$$\eta = \frac{1}{3} \rho \bar{c} l \quad (14)$$

که در آن η گرانروی، ρ چگالی، \bar{c} سرعت گرمایی میانگین، و l مسافت آزاد میانگین است. مسافت l در

۱. در SI واحد گرانروی 1 Nsm^{-2} است، در نتیجه $1 \text{ poise} = 10^{-1} \text{ Nsm}^{-2}$. کاملاً متداول است که گرانروی را برحسب cp یا سانتی‌پواز تعریف کنیم، که برابر 10^{-2} پواز است.

مایع از مرتبهٔ بزرگی فاصلهٔ بین مولکولی a است. با مقادیر «نوعی» $\rho \approx 2 \text{ g cm}^{-3}$ ، $\bar{c} \approx 10^3 \text{ cm s}^{-1}$ و $a \approx 5 \times 10^{-8} \text{ cm}$ داریم

$$\eta(\text{min}) \approx 0.3 \times 10^{-2} \text{ poise} = 0.3 \text{ cp} \quad (15)$$

که به منزلهٔ برآوردی از حد پایینی گرانروی مایع است. (جدولهای موجود در کتابهای مرجع شیمی فقط به ندرت مقادیر کمتر از این مقدار را فهرست می‌کنند.)

اکنون مدل بسیار ساده‌ای از گرانروی مایع را عرضه می‌کنیم. برای اینکه جهشی موفقیت‌آمیز داشته باشیم، مولکول باید بر سد انرژی پتانسیل، که همسایگانش در مایع پدید آوردند، غلبه کند. تخمین پیشین وقتی در مورد گرانروی کمیته به‌کار می‌رود که از این سد چشم‌پوشی شود. اگر ارتفاع این سد E باشد، مولکول برای عبور از روی این سد فقط برای کسری از زمان به‌صورت

$$f \approx \exp(-E/k_B T) \quad (16)$$

انرژی کافی خواهد داشت. در اینجا E انرژی آزاد مناسبی است و برای فرایندی که آهنگ جهش را تعیین می‌کند، انرژی فعال‌سازی نامیده می‌شود. این انرژی به انرژی فعال‌سازی برای خودبخشی مربوط می‌شود. با کاهش احتمال جهش موفقیت‌آمیز، گرانروی افزایش خواهد یافت، بنابراین

$$\eta \approx \eta(\text{min})/f \approx \eta(\text{min}) \exp(E/k_B T) \quad (17)$$

اگر در گذار شیشه‌ای $\eta = 10^{13} \text{ poise}$ ، مرتبهٔ بزرگی f ، با استفاده از رابطهٔ (۱۵)، باید در لحظهٔ گذار به‌صورت زیر باشد

$$f \approx 0.3 \times 10^{-15} \quad (18)$$

انرژی فعال‌سازی مربوطه عبارت است از

$$E/k_B T_g = -\ln f = \ln(3 \times 10^{15}) = 35.6 \quad (19)$$

اگر $T_g \approx 2000 \text{ K}$ ، در نتیجه $k_B T_g = 2.7 \times 10^{-13} \text{ erg}$ و $E = 9.6 \times 10^{-12} \text{ erg} \approx 6 \text{ eV}$ این پتانسیل یک سد انرژی پتانسیل بلند است.

شیشه‌هایی با مقادیر پایتتر T_g مقادیر پایتتری از سد انرژی پتانسیل E را خواهند داشت. (انرژیهای فعال‌سازی که به این طریق به‌دست می‌آیند اغلب به صورت گرانروی E نشان داده می‌شوند.) موادی که تشکیل‌دهندهٔ شیشه‌اند، به‌وسیلهٔ انرژیهای فعال‌سازی از مرتبهٔ 1 eV یا بیشتر مشخص می‌شوند؛ تشکیل‌دهنده‌های غیرشیشه‌ای می‌توانند انرژیهای فعال‌سازی از مرتبهٔ 1 eV داشته باشند.

شیشه، به هنگام فشرده شدن در قالبها یا کشیده شدن در لوله‌ها، در گستره دمایی که در آن گران روی 10^3 تا 10^6 یواز است، به کار می‌رود. گستره کاری برای سیلیس شیشه‌ای متجاوز از 2000°C است، آنقدر بالا که سودمندی عملی ماده به شدت محدود می‌شود. در شیشه عادی، در حدود ۲۵ درصد Na_2O به صورت تعدیل‌کننده شبکه‌ای به SiO_2 افزوده می‌شود تا برای تهیه شیشه‌ای که به اندازه کافی روان باشد، به طوری که بتوان از آن برای شکل دهی حباب لامپ الکتریکی، شیشه پنجره، و بطری استفاده کرد، دمای مورد نیاز را به کمتر از 1000°C کاهش دهند.

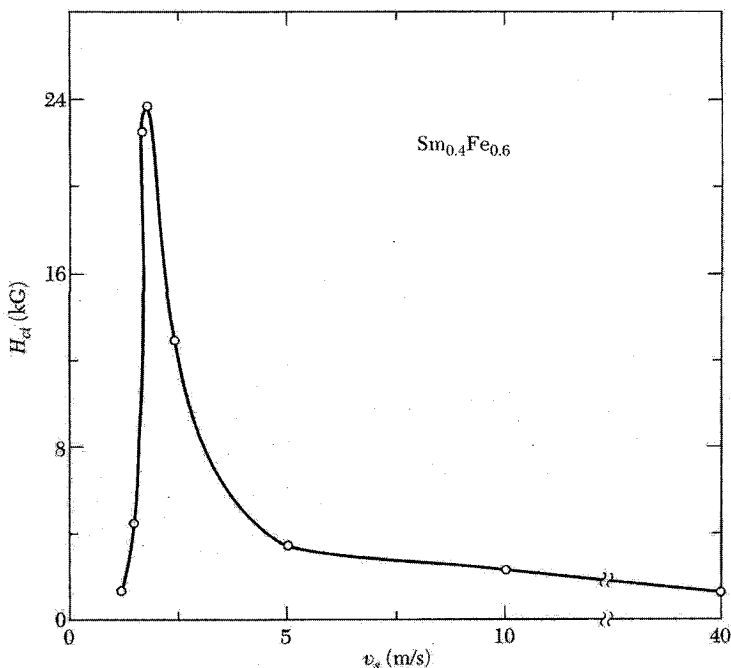
فرومغناطیسهای بی شکل

آلیاژهای فلزی بی شکل با فرونشاندن (سرکردن) بسیار سریع آلیاژ مایع شکل می‌گیرند. این کار به طور متداول با جهت دادن جریان مذاب آلیاژ به طرف سطح استوانه‌ای که سریعاً می‌چرخد، انجام می‌شود. این فرایند آلیاژ بی شکل را در مقیاس صنعتی به صورت نوار «مذاب تابدار» تولید می‌کند.

آلیاژهای بی شکل فرومغناطیسی به این دلیل ساخته شدند که مواد بی شکل دارای ویژگیهای تقریباً همسانگردند، و مواد همسانگرد باید الزاماً دارای انرژی ناهمسانگردی مغناطوبلورین صفر باشند. نبود جهت‌های سخت و آسان مغناطش باید وادارندگیهای پایین، اتلافهای پسماندی، و نفوذپذیریهای بالا را به بار آورد. از آنجا که آلیاژهای بی شکل آلیاژهای کاتوره‌ای نیز هستند، مقاومت ویژه الکتریکی بالاست. تمامی این ویژگیها همانند مواد مغناطیسی نرم دارای ارزش فناوری اند. برخی از این مواد با نام تجاری Metglas به بازار عرضه می‌شوند.

آلیاژهای فلز واسط-شبه فلز (TM-M)^۱ رده مهمی از آلیاژهای بی شکل مغناطیسی اند. مؤلفه فلز واسط معمولاً در حدود ۸۰ درصد Fe، CO، یا Ni همراه با مؤلفه شبه فلزی B، C، Si، P، یا Al است. حضور شبه فلزها نقطه ذوب را پایین می‌آورد، و امکان فرونشاندن آلیاژ را از طریق دمای گذار شیشه‌ای با سرعت کافی برای پایدارسازی فاز بی شکل فراهم می‌سازد. برای مثال، ترکیب $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ (موسوم به Metglas ۲۶۰۵) دارای $T_g = 441^\circ\text{C}$ در مقایسه با دمای ذوب آهن خالص یعنی 1538°C است. دمای کوری این ترکیب در فاز بی شکل ۶۴۷K است و مقدار مغناطیدگی M_s در 300°K برابر است با ۱۲۵۷، در مقایسه با $T_c = 1043^\circ\text{K}$ و $M_s = 1707$ برای آهن خالص. وادارندگی مغناطیس برابر 4°G و مقدار بیشینه نفوذپذیری $10^5 \times 3$ است. وادارندگیهای مغناطیسی به کمی 6°G برای ترکیب دیگری گزارش شده‌اند.

اگر آهنگ چرخش یا آهنگ فرونشانی برای تولید فاز بلورین با دامنه ریز، که می‌تواند از ترکیب نیمه پایدار باشد، کاهش داده شود، مواد با نیروی وادارندگی بالا را می‌توان با همان فرایند تابدار مذاب تولید



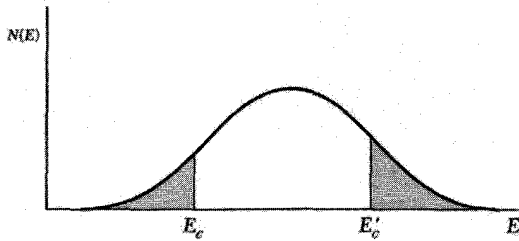
شکل ۶. وادارندگی مغناطیسی در دمای اتاق برحسب سرعت تابدار مذاب برای $Sm_{0.4}Fe_{0.6}$. وادارندگی بیشینه 24 kG است و در 1.5 ms^{-1} رخ می‌دهد، که عقیده بر آن است که مربوط به رفتار تک‌حوزه‌ای در هر بلورک است. در آهنکهای چرخش بالاتر وادارندگی مغناطیسی کاهش می‌یابد. زیرا ماده رسوب‌یافته بی‌شکل می‌شود (بیشتر همسانگرد). بلورکها در آهنکهای چرخش پایینتر تا اندازه‌های بالای رژیم تک‌حوزه‌ای بازپخت می‌شوند؛ مرزهای حوزه وادارندگی مغناطیس پایینتری به بار می‌آورند.

کرد. اگر اندازه دانه چنان باشد که با اندازه بهینه برای تک‌حوزه‌ها جور باشد، وادارندگی می‌تواند کاملاً بالا باشد (شکل ۶). کروئات^۱ گزارش کرده است که برای آلیاژ نیمه‌پایدار $Nd_{0.4}Fe_{0.6}$ در سرعت تابدار مذاب بهینه 5 ms^{-1} داریم $H_{c_i} = 7.5 \text{ kG}$.

نیمرسا‌نا‌های بی‌شکل

نیمرسا‌نا‌های بی‌شکل را می‌توان به‌وسیله تبخیر یا کندوپاش به‌صورت لایه‌های نازک تهیه کرد، یا در برخی مواد مثل شیشه‌های حجیم با ابرسردکردن آنها را آماده کرد.

در جامدی که در آن نظم بلورین بی‌قاعده وجود دارد، چه بر سر مدل نوار انرژی الکترون می‌آید؟ وقتی ساختار دوره‌ای نیست، قضیه بلوخ را نمی‌توان به‌کار برد، در نتیجه حالت‌های الکترونی را نمی‌توان مقادیر



شکل ۷. چگالی حالت‌های الکترونی در جامدهای بی‌شکل، وقتی این حالتها در مرکز نوار جایگزیده نیستند. حالت‌های جایگزیده به صورت سایه‌زده شده نشان داده شده‌اند. لبه‌های نوار تحرک‌پذیری E_c و E'_c گستره‌های انرژی را جدا می‌سازند که در آن حالتها جایگزیده و ناجایگزیده‌اند.

خوش‌تعریف k توصیف کرد. بنابراین قاعده گزینش تکانه در مورد گذارهای اپتیکی سست می‌شود؛ بنابراین همهٔ مدهای فروسرخ و رامان در طیفهای جذب سهم‌اند. لبهٔ جذب اپتیکی نسبتاً بی‌شکل است. نوارهای مجاز و گافهای انرژی هنوز به وجود می‌آیند، زیرا پیکربندیهای پیوند الکترونی موضعی شکل چگالی حالتها برحسب انرژی را به گونهٔ بسیار قویتر تعیین می‌کنند.

هم الکترون‌ها و هم حفره‌ها در نیمرسانای بی‌شکل می‌توانند جریان را حمل کنند. این حاملها می‌توانند به وسیلهٔ ساختار بی‌نظم به شدت پراکنده شوند، در نتیجه مسافت آزاد میانگین گاهی ممکن است از مرتبهٔ مقیاس بی‌نظمی باشد. به نظر اندرسون^۱ حالت‌های نزدیک لبه‌های نوار می‌توانند جایگزیده باشند و در سرتاسر جامد گسترش نیابند (شکل ۷). رسانش در این حالتها می‌تواند، توسط فرایند جهشی رخ دهد، که در آنها اثر هال غیرعادی است و نمی‌توان از آن برای تعیین غلظت حامل استفاده کرد.

دوردهٔ متفاوت از نیمرساناهای بی‌شکل به صورت گسترده بررسی شده‌اند: جامدهای بی‌شکل که به گونهٔ چهاروجهی پیوند شده‌اند مانند سیلیسیم، ژرمانیم، و شیشه‌های کانسنگی^۲. ردهٔ دوم جامدهای چندمؤلفه‌ای‌اند که یکی از اجزاء تشکیل‌دهندهٔ اصلی آنها یک عنصر «کانسنگ»^۳—گوگرد، سلنیم، یا تلوریم— است. موادی که چهار پیوند دارند، به شرطی که کاستیهای پیوند آویزان در آنها با هیدروژن جبران شوند، خواص مشابه با شکلهای بلورین‌شان دارند. این مواد می‌توانند با مقادیر اندکی از ناخالصیهای شیمیایی آلاش یابند و با تزریق حاملهای آزاد از محل تماس فلزی رسانندگی‌شان به شدت تغییر کنند. برعکس، شیشه‌های کانسنگی به طور عمده نسبت به ناخالصیهای شیمیایی و تزریق حامل آزاد حساس نیستند.

سیلیسیم هیدروژنهٔ بی‌شکل برای سلولهای خورشیدی مادهٔ مناسبی است. سیلیسیم بی‌شکل ماده‌ای به مراتب ارزاتر از تک‌بلور سیلیسیم است، ولی به دلیل کاستیهای ساختاری (پیوندهای آویزان) که حذف آنها ممکن نیست، تلاش برای کاربرد سیلیسیم خالص بی‌شکل با شکست روبرو بوده است. به نظر

می‌رسد با وارد کردن هیدروژن در سیلیسیم بی‌شکل، کاستیهای ساختاری ناخواسته برطرف شوند. برای این کار مقادیر نسبتاً بزرگی از هیدروژن از مرتبه ۱۰ درصد یا بیشتر به کار می‌رود.

برانگیختگیهای با انرژی پایین در جامدهای بی شکل

ظرفیت گرمایی دمای پایین جامدهای بلورین دی‌الکتریک خالص از قانون T^3 دبی پیروی می‌کند (فصل ۵) و این دقیقاً همان است که از برانگیختگی فونونهای با طول موج بلند انتظار می‌رود. همین رفتار را از شیشه‌ها و دیگر جامدهای بی‌شکل انتظار داشتیم. ولی تعداد بیشماری از شیشه‌های عایق‌کننده یک جمله خطی غیرمنتظره را در زیر $1K$ نشان می‌دهند. در حقیقت، در $25mK$ ظرفیت گرمایی سیلیس شیشه‌ای (زجاجی) به اندازه ضریب 1000 نسبت به سهم فونونی دبی افزایش می‌یابد. جملات خطی غیرعادی با بزرگی قابل مقایسه در همه، یا تقریباً همه، جامدهای بی‌شکل یافت می‌شوند و عقیده بر آن است که حضور این جملات پیامدی از حالت‌های بی‌شکل ماده است، ولی جزئیات اینکه چرا این چنین است مبهم باقی می‌ماند. شواهد قوی وجود دارد که خواص غیرعادی از دستگاههای دوترازی ناشی می‌شود و نه از دستگاههای نوسانگر چندترازی؛ به‌طور خلاصه، شواهد چنین است که این دستگاهها می‌توانند توسط میدانهای فونونی شدید اشباع شوند، درست مانند یک دستگاه اسپینی دوترازی که با میدان مغناطیسی شدید Tf اشباع می‌شود.

محاسبه ظرفیت گرمایی

یک جامد بی‌شکل با غلظت دستگاه دوترازی N در انرژیهای پایین، یعنی، با شکافتگی Δ بسیار کوچکتر از قطع دبی فونونی $k_B\theta$ را در نظر بگیرید. تابع پارش دستگاه، $\tau = k_B T$ ، عبارت است از

$$Z = \exp(\Delta/2\tau) + \exp(-\Delta/2\tau) = 2 \cosh(\Delta/2\tau) \quad (20)$$

انرژی گرمایی میانگین عبارت است از

$$U = -\frac{1}{Z} \Delta \tanh(\Delta/2\tau) \quad (21)$$

و ظرفیت گرمایی یک تک‌دستگاه چنین است

$$C_V = k_B \left(\frac{\partial U}{\partial \tau} \right) = k_B (\Delta/2\tau)^2 \operatorname{sech}^2(\Delta/2\tau) \quad (22)$$

این نتایج در صفحات ۶۲ تا ۶۳ از کتاب TP به تفصیل ارائه شده‌اند.

اکنون فرض کنید Δ با احتمال یکنواخت در گستره $\Delta = 0$ تا $\Delta = \Delta_0$ توزیع شود. مقدار میانگین C_V عبارت است از

$$C_V = (k_B/4\tau^2) \int_0^{\Delta_0} d\Delta (\Delta^2/\Delta_0) \text{sech}^2(\Delta/2\tau) \\ = \left(\frac{2k_B\tau}{\Delta_0} \right) \int_0^{\Delta_0/2\tau} dx x^2 \text{sech}^2 x \quad (23)$$

این انتگرال را نمی‌توان به شکل بسته محاسبه کرد.

دو حد به‌طور ویژه مورد توجه قرار می‌گیرند. برای $\tau \ll \Delta_0$ جمله $x \text{sech}^2 x$ از $x = 0$ تا $x = 1$ تقریباً برابر یک و برای $x > 1$ تقریباً برابر صفر است. مقدار انتگرال تقریباً برابر $\frac{1}{3}$ است، در نتیجه برای $T < \Delta_0/k_B$

$$C_V \approx 2k_B T / 3\Delta_0 \quad (24)$$

برای $\tau \gg \Delta_0$ مقدار انتگرال تقریباً برابر $\frac{1}{3}(\Delta_0/2k_B T)^3$ است، در نتیجه در این حد داریم

$$C_V \approx \Delta_0^3 / 12k_B T^2 \quad (25)$$

که با افزایش T به صفر می‌گراید.

بنابراین ناحیه جالب توجه در دماهای پایین قرار دارد، زیرا در این ناحیه با استفاده از رابطه (۲۴) دستگاه دوترازی با جمله‌ای خطی برحسب دما در ظرفیت گرمایی سهم می‌شود. این جمله، که در آغاز برای ناخالصیه‌های رقیق مغناطیسی در فلزات معرفی شد، با ظرفیت گرمایی معمولی الکترون رسانشی، که با T نیز متناسب است، هیچ‌گونه ارتباطی ندارد.

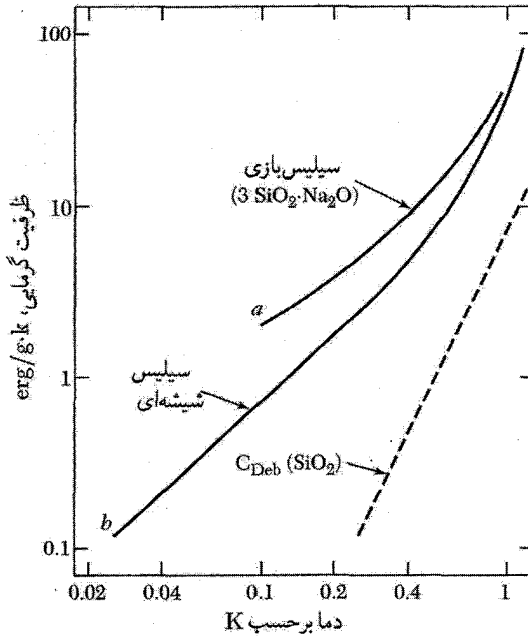
از نتیجه تجربی به نظر می‌رسد که تمامی جامدهای بی‌نظم $N \sim 10^{17} \text{cm}^{-3}$ برانگیختگی انرژی پایین «نوع جدید» دارند که به‌طور یکنواخت در بازه 0 تا 1K توزیع شده‌اند. گرمای ویژه غیرعادی را اکنون می‌توان از رابطه (۲۴) به‌دست آورد. برای $1 \text{K} < T < \Delta_0/k_B$

$$C_V \approx \frac{2}{3} N k_B (0.1) \approx 1 \text{erg cm}^{-3} \text{K}^{-1} \quad (26)$$

برای مقایسه، با استفاده از رابطه ۳۵ از فصل ۵ سهم فونونی در 1K عبارت است از

$$C_V \approx 234 N k_B (T/\theta)^3 \approx (234)(2.3 \times 10^{22})(1.38 \times 10^{-16})(0.1/300)^3 \\ \approx 2.8 \times 10^{-2} \text{erg cm}^{-3} \text{K}^{-1} \quad (27)$$

که به مراتب کوچکتر از رابطه (۲۶) است.



شکل ۸. ظرفیت گرمایی سیلیس شیشه‌ای و شیشه سیلیس بازی بر حسب دما در زیر ۱K. ظرفیت گرمایی بر حسب T تقریباً خطی است. منحنی خط چین نشانگر ظرفیت گرمایی ذبی محاسبه شده برای سیلیس شیشه‌ای است.

نتایج تجربی (شکل ۸) برای شیشه زجاجی SiO_2 با رابطه زیر نشان داده می‌شوند

$$C_V = c_1 T + c_3 T^3 \quad (28)$$

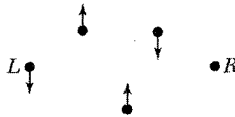
که در آن $c_1 = 12 \text{ erg g}^{-1} \text{ K}^{-2}$ و $c_3 = 18 \text{ erg g}^{-1} \text{ K}^{-4}$.

رسانندگی گرمایی

رسانندگی گرمایی شیشه‌ها بسیار کم است و در دمای اتاق و بالاتر توسط مقیاس بی‌نظمی ساختار محدود می‌شود، زیرا این مقیاس مسافت آزاد میانگین فونونهای گرمایی غالب را تعیین می‌کند. در دماهای پایین، زیر ۱K، رسانندگی توسط فونونهای با طول موج بلند حمل می‌شود و به وسیله پراکندگی فونونی از دستگاههای دوترازی اسرارآمیز یا حالت‌های تونل زنی، که قبلاً برای سهم آنها در ظرفیت گرمایی جامدهای بی‌شکل مورد بحث قرار گرفت، محدود می‌شود.

همان‌گونه که در فصل ۵ دیدیم، رابطه مربوط به رسانندگی گرمایی K به شکل زیر است:

$$K = \frac{1}{3} cvl \quad (29)$$



شکل ۹. مسافت آزاد میانگین کوتاه فونونی در ساختار بی‌نظم همان‌طور که در شکل نشان داده شده است، یک فونون با طول موج کوتاه که L را جابه‌جا می‌کند، اتم R را به اندازه مسافت به مراتب کوچکتر از حذف فازی مسافتهای بالایی و پایینی از L به R جابه‌جا می‌کند. جابه‌جایی R به صورت $\sim \downarrow + \uparrow$ است، در نتیجه موج فرودی از L در R بازتابیده می‌شود.

که در آن c ظرفیت گرمایی در واحد حجم، v سرعت فونونی میانگین، و l مسافت آزاد میانگین فونون است. برای سیلیس شیشه‌ای در دمای اتاق

$$K \cong 1.4 \times 10^{-2} \text{ J cm}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$c \cong 1.6 \text{ J cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$$

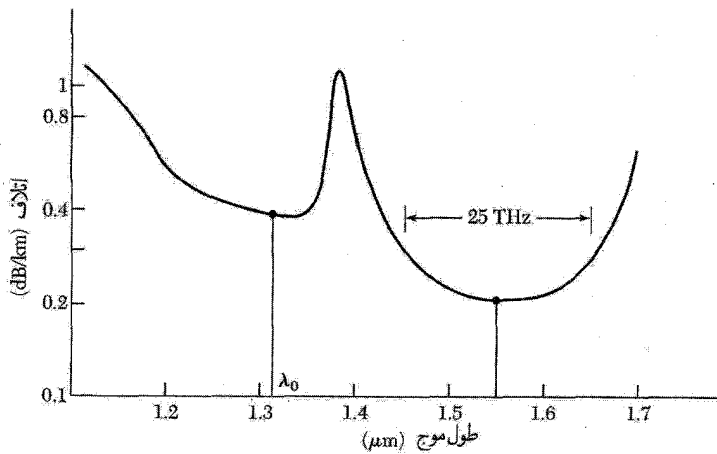
$$\langle v \rangle \cong 4.2 \times 10^5 \text{ cm s}^{-1}$$

بنابراین مسافت آزاد میانگین $l \cong 6 \times 10^{-8} \text{ cm}$ ؛ با مراجعه به شکل ۳ می‌بینیم که این مقدار از مرتبه بزرگی بی‌نظمی ساختار است.

این مقدار مسافت آزاد میانگین فونونی به‌طور قابل‌ملاحظه‌ای کوچک است. در دمای اتاق و بالاتر از آن (یعنی در بالای دمای دبی)، اکثر فونونها دارای طول موجهایی از مرتبه فاصله بین اتمی‌اند. همانند شکل ۹، از طریق فرایندهای حذف فاز است که مسافت آزاد میانگین به اندازه چند فاصله بین اتمی محدود می‌شود. هیچ ساختار دیگری برای کوارترگداخته مسافت آزاد میانگین 6 \AA را به بار نخواهد آورد. مدهای عادی ارتعاش ساختار شیشه کاملاً مانند امواج تخت نیستند، ولی این مدها، همان‌طور که واپیچیده‌اند، باز هم دارای دامنه‌های کوانتیده‌اند و بنابراین می‌توان آنها را فونون نامید.

تارهای نوری

تارهای نوربر سیلیسی بخش عظیمی از داده‌ها و اطلاعات تراگسیل‌یافته روی سطح زمین و زیر دریاها را حمل می‌کنند. این تارهای نوری شامل یک مغز نازک ($\approx 10 \mu\text{m}$) از شیشه با ضریب شکست بالا هستند که به‌وسیله یک پوشش احاطه شده‌اند. نور داده‌های رقمی را با کاهش کمینه نزدیک به 20 db km^{-1} در طول موجهای نزدیک به $1.55 \mu\text{m}$ ، که در ناحیه فرسوخ قرار دارند، (شکل ۱۰) حمل می‌کند. یک گستره 10^6 کیلومتری متناظر با اتلاف 20 db است. توان به‌آسانی توسط تقویت‌کننده لیزری Eu^{3+} تأمین می‌شود.



شکل ۱۰. مشخصه تراگسیلی تارهای نوری با کیفیت ارتباطی، که کاهش را برحسب واحد دسی بل به ازای کیلومتر به صورت تابعی از طول موج نور، برحسب μm نشان می دهد. رژیم پراکندگی ریلی در قسمت چپ منحنی غالب است، بجز برای یک خط جذب قوی ناخالصی وابسته به یونهای OH که با SiO_2 همراه اند؛ این خط مربوط به هماهنگ دوم خطی در $2.7 \mu\text{m}$ معروف به «خط آب» است. طول موج $1.31 \mu\text{m}$ در 1994 خط تراگسیل به کار می رود؛ به جای این طول موج از طول موج $1.55 \mu\text{m}$ استفاده شد، که در تقویت کننده های یونی Eu^{3+} موجود است. در کاربردهای مسافت دور نوعی در هر 10^4 km از یکی از این تقویت کننده ها استفاده می شود. توان مورد نیاز برای دمش تقویت کننده ها توسط سیمهای مسی تأمین می شود.

پنجره نوری شیشه های با خلوص بالا در نزدیکی این طول موج به وسیله نوارهای جذب فونونی به طرف بسامد پایین و در طرف بسامد بالا به وسیله پراکندگی ریلی، و در نهایت توسط جذب الکترونی محدود می شود. در پنجره نوری اتلافها توسط پراکندگی ریلی محاسبه می شوند، که ذاتاً مربوط به افت و خیزهای استاتیکی در ثابت دی الکتریک موضعی محیط غیرهمگن است و کاهش با توان چهارم بسامد تغییر می کند. خوشبختانه یک چشمه عالی برای تابش در $1.55 \mu\text{m}$ در دسترس است. همان گونه که در شکل ۲۴ از فصل ۱۳ نشان داده شد، یونهای Er^{3+} پراکنجسته شده (دمیده شده) می توانند در بخش آلاییده به اربیم تار تقویت کنند.

کاهش ریلی

کاهش امواج نور در شیشه در طول موجهای فرسوخ غالباً از همان فرایند پراکندگی ریلی، که باعث آبی دیده شدن نور آسمان است، ناشی می شود. ضریب خاموشی، یا ضریب کاهش، h ، دارای بعد وارونه طول است و برای پراکندگی نور در گاز، به شیوه ریلی، چنین بیان می شود

$$h = (2\omega^4 / 3\pi c^4 N) \langle (n - 1)^2 \rangle \quad (30)$$

که در آن n ضریب شکست و N تعداد مراکز پراکندگی است. شار انرژی به صورت تابعی از مسافت دارای شکل $\exp(-hx)$ است.

به دست آوردن رابطه (۳۰) را می توان در کتابهای درسی مناسب الکتروپدینامیک یافت؛ ساختار این نتیجه را می توان از طریق یک استدلال عام درک کرد. انرژی تابشی پراکنده شده از یک عنصر دو قطبی p با $(d^2p/dt^2)^2$ متناسب است، و این مسئله ضریب ω^4 را توجیه می کند. قطبش پذیری موضعی α به صورت α^2 وارد می شود؛ اگر N مرکز پراکندگی کاتوره ای در واحد حجم وجود داشته باشد، انرژی پراکنده شده که روی این چشمه های کاتوره ای میانگین گیری می شود به صورت $N \langle (\Delta\alpha)^2 \rangle$ یا $N \langle (\Delta n)^2 \rangle$ خواهد بود. بنابراین ضریبهای اساسی را، که در رابطه (۳۰) ظاهر می شوند، در اختیار داریم. همان گونه که در مورد شیشه به کار رفت، Δn باید به تغییرات قطبش حول هر گروه پیوند Si-O مربوط باشد و برآوردهای عددی رضایت بخش کاهش را می توان از این راه به دست آورد.

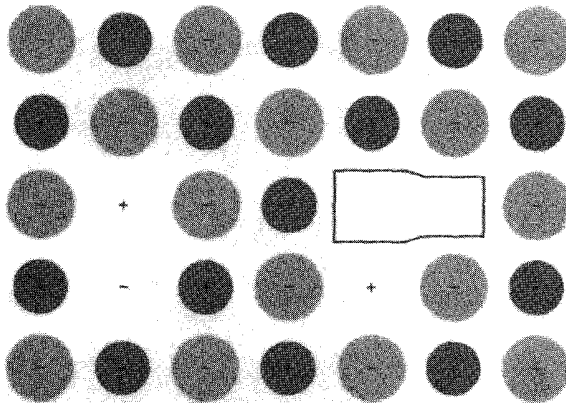
مسئله

تارهای نوری فلزی؟ از لحاظ نظری تحقیق شده است که سیمهای فلزی می توانند به منزله تارهای نوری عمل کنند، و نور را با تأخیر طولانی مناسب با مشخصه ضریب شکست بالای فلزات می فرستند. متأسفانه، ضریب شکست فلز نوعی تحت غلبه یک جمله الکترون آزاد بر حسب $\omega^{1/2}$ قرار می گیرد، در نتیجه در واقع انتشار موج نوری در فلز به شدت میرا می شود. نشان دهید که در سدیم در دمای اتاق موجی که طول موجش در خلا $10 \mu\text{m}$ است، طول میرایی برابر با $1 \mu\text{m}$ دارد. این نتیجه می تواند با طول میرایی 10^6 km که برای نور در تارهای شیشه ای با کیفیت بالا به دست آمده است، در تقابل باشد.

ناراستیهای نقطه‌ای

ناکاملیهای نقطه‌ای متداول در بلورها عبارت‌اند از ناخالصیهای شیمیایی، جایگاههای شبکه‌ای تهی، و اتمهای اضافی که در مکانهای منظم شبکه قرار ندارند. ناکاملیهای خطی در فصل ۲۱ تحت عنوان دررفتگیها مورد بررسی قرار می‌گیرد. سطح بلور، به دلیل وجود حالت‌های سطحی الکترونی، فونونی، و مگنونی، یک ناکاملی صفحه‌ای به‌شمار می‌آید.

در کنترل برخی از ویژگیهای مهم بلور ناکاملیها به همان اندازه ترکیب بلور میزبان، که تنها می‌تواند به منزله حلال، چارچوب اصلی، یا ناقل برای ناکاملیها عمل کند، نقش دارند. رسانندگی بعضی از نیمرساناها تماماً از مقادیر ناچیز ناخالصیهای شیمیایی‌شان ناشی می‌شود. رنگ و نورتایی بسیاری از بلورها از ناخالصیها یا ناکاملیها ناشی می‌شود. ناخالصیها یا ناکاملیها می‌توانند عمل پخش اتمی را به مقدار فوق‌العاده زیادی شتاب بخشند. ویژگیهای مکانیکی و پلاستیکی معمولاً به‌وسیله ناکاملیها کنترل می‌شوند.



شکل ۱. صفحه‌ای از بلور خالص هالید قلیایی، که دو جایگاه تهی یون مثبت، یک جایگاه تهی یون منفی، و یک زوج جفت‌شده از جایگاه‌های تهی با بار مخالف را نشان می‌دهد.

تهیجای شبکه

ساده‌ترین ناکاملی تهیجای شبکه، یعنی فقدان اتم یا یون است، و به ناراستی شوتکی نیز معروف است (شکل ۱). در بلور کامل با انتقال یک اتم از یک جایگاه شبکه در داخل بلور به یک جایگاه روی سطح آن ناراستی شوتکی ایجاد می‌کنیم. در تعادل گرمایی در بلوری که از هر نظر دیگر کامل باشد، همیشه تعداد معینی تهیجای شبکه وجود دارد، زیرا آنتروپی در اثر حضور بی‌نظمی در ساختار بلور افزایش می‌یابد. در فلزاتی که ساختار تنگ‌چین دارند، درست در زیر نقطه ذوب کسری از جایگاه‌ها که تهی‌اند از مرتبه 10^{-3} تا 10^{-4} است. ولی در بعضی آلیاژها، به‌ویژه در کربیدهای فلزات واسط بسیار سخت مانند TiC، کسر جایگاه‌های تهی از یک مؤلفه می‌تواند به زیادی ۵۰ درصد باشد.

احتمال اینکه در تعادل گرمایی یک جایگاه شبکه معلوم تهی باشد، با عامل بولتزمن، $P = \exp(-E_V/k_B T)$ ، متناسب است، که در آن E_V انرژی لازم برای بردن یک اتم از یک جایگاه شبکه در داخل بلور به یک جایگاه شبکه روی سطح بلور است. اگر N اتم وجود داشته باشد، تعداد تعادلی تهیجاها n ، با عامل بولتزمن داده می‌شود

$$\frac{n}{N - n} = \exp\left(\frac{-E_V}{k_B T}\right) \quad (1)$$

اگر $n \ll N$ ، آنگاه

$$\frac{n}{N} \cong \exp\left(\frac{-E_V}{k_B T}\right) \quad (2)$$

اگر $E_V \approx 1\text{eV}$ و $T = 1000\text{K}$ ، آنگاه $10^{-5} \approx e^{-12} \approx n/N$.

با کاهش دما غلظت تعادلی تهیجاها کم می‌شود. اگر بلور در دمای بالایی رشد داده شود و سپس ناگهان سرد شود و تهیجاها به این وسیله بی‌حرکت شوند، عملاً غلظت واقعی تهیجاها از مقدار تعادلی آن بیشتر خواهد شد (به بحث پخش که در قسمت بعد می‌آید مراجعه کنید).

در بلورهای یونی معمولاً به لحاظ انرژی مساعد است که تقریباً تعدادی مساوی از تهیجاهای یون مثبت و منفی تشکیل شود. تشکیل زوجهای تهیجا، بلور را در مقیاس موضعی از نظر الکتروستاتیکی خنثی نگه می‌دارد. با یک محاسبه آماری رابطه زیر را برای تعداد زوجها به دست می‌آوریم

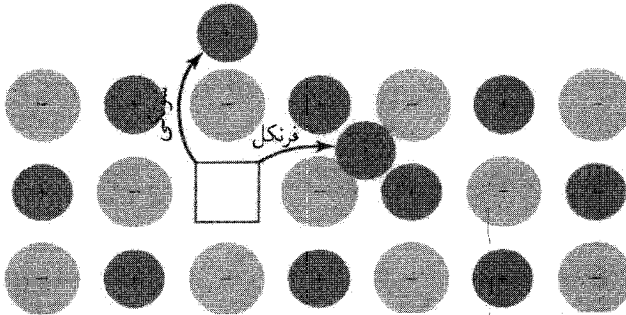
$$n \cong N \exp(-E_p/2k_B T) \quad (3)$$

که در آن E_p انرژی تشکیل زوج است.

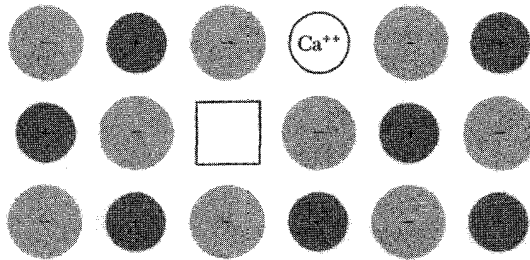
ناراستی فرنکل (شکل ۲) ناراستی تهیجای دیگری است که در آن یک اتم از یک جایگاه شبکه به یک مکان میانین، که معمولاً اتمی آن را اشغال نمی‌کند، منتقل می‌شود. در هالیدهای قلیایی خالص متداولترین تهیجاها شبکه ناراستیهای شوتکی‌اند؛ در هالیدهای نقره خالص متداولترین تهیجاها ناراستیهای فرنکل‌اند. محاسبه تعداد تعادلی ناراستیهای فرنکل بر طبق روش مسئله ۱ انجام می‌شود. اگر n تعداد ناراستی فرنکل به مراتب کوچکتر از تعداد N جایگاه شبکه و تعداد N' جایگاه میانین باشد نتیجه زیر حاصل می‌شود

$$n \cong (NN')^{1/2} \exp(-E_I/2k_B T) \quad (4)$$

که در آن E_I انرژی لازم برای برداشتن یک اتم از یک جایگاه شبکه و برون آن به یک مکان میانین است.



شکل ۲. ناراستیهای شوتکی و فرنکل در بلور یونی. پیکانها تغییر مکان یونها را نشان می‌دهند. در ناراستی شوتکی یون مربوطه سرانجام به سطح بلور می‌رود؛ در ناراستی فرنکل یون مربوطه به مکان میانین برده می‌شود.



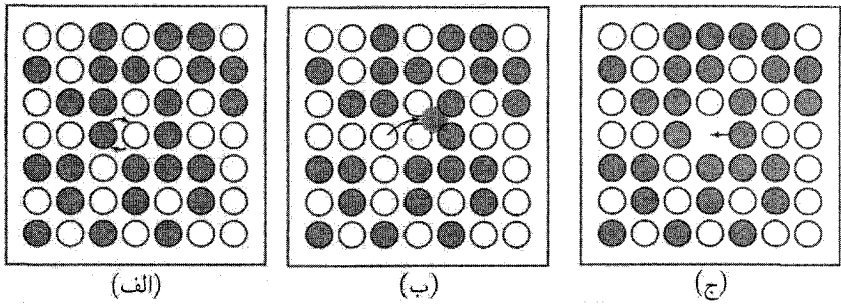
شکل ۳. تولید یک تهیجای شبکه یا حل کردن CaCl_2 در KCl : برای اطمینان از خنثایی الکتریکی، به ازای هر کاتیون دوظرفیتی Ca^{++} یک تهیجای یون مثبت در شبکه ایجاد می‌شود. دو یون Cl^- مربوط به CaCl_2 در جایگاههای عادی یون منفی وارد می‌شوند.

در هالیدهای قلیایی که شامل عناصر اضافی دوظرفیتی باشند، تهیجاهای شبکه حضور دارند. اگر بلور KCl با مقادیر کنترل‌شده CaCl_2 رشد داده شود، چگالی آنچنان تغییر می‌کند که گویی در بلور به ازای هر یون Ca^{2+} یک تهیجای شبکه K^+ تشکیل می‌شود. Ca^{2+} به یک جایگاه عادی K^+ در شبکه وارد می‌شود و دو یون Cl^- به دو جایگاه Cl^- در بلور KCl وارد می‌شوند (شکل ۳). لازمه خنثایی بار ایجاب می‌کند که یک جایگاه تهی یون فلزی ایجاد شود. نتایج تجربی نشان می‌دهند که افزودن CaCl_2 به KCl چگالی بلور را پایین می‌آورد. اگر هیچ تهیجایی تولید نمی‌شد، چگالی بلور افزایش می‌یافت. زیرا یون Ca^{2+} از یون K^+ سنگینتر و کوچکتر است.

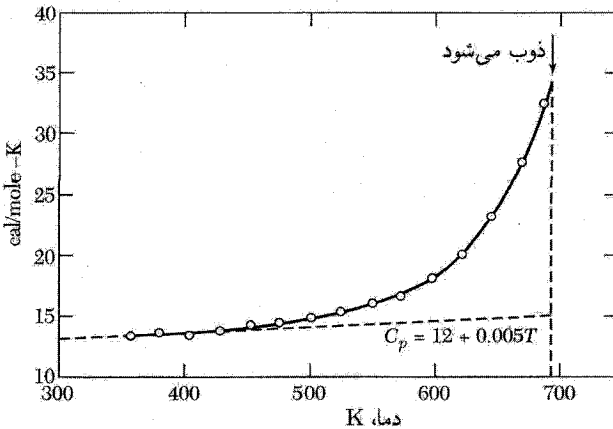
سازوکار رسانندگی الکتریکی در بلورهای هالید قلیایی و هالید نقره معمولاً از حرکت یونها ناشی می‌شود، نه حرکت الکترونها. این نکته با مقایسه بین تریبرد بار و تریبرد جرم محقق شده است. تریبرد جرم با اندازه‌گیری ماده‌ای تعیین می‌شود که روی الکترودهایی می‌نشیند که با بلور در تماس‌اند.

مطالعه رسانندگی یونی ابزار مهمی برای بررسی ناراستیهای شبکه است. کار روی هالیدهای قلیایی و نقره که شامل مقادیر معلومی از یونهای فلزی دوظرفیتی اضافی باشند، نشان می‌دهد که در دماهای نه‌چندان زیاد رسانندگی یونی مستقیماً با مقدار اضافی اتم دوظرفیتی متناسب است. دلیل این امر این نیست که یونهای دوظرفیتی ذاتاً بسیار متحرک‌اند، زیرا یونهای فلزی یک‌طرفیتی‌اند که عمدتاً روی کاند می‌نشینند. تهیجاهای شبکه‌ای که با وارد کردن یونهای دوظرفیتی حاصل می‌شوند باعث افزایش پخش‌اند (شکل ۴ ج). پخش تهیجا در یک جهت با پخش اتم در جهت مخالف آن معادل است. هنگامی که ناراستیهای شبکه‌ای به گونه گرمایی تولید شوند، انرژی تشکیل آنها همان‌گونه که در شکل ۵ نشان داده شده است، ظرفیت گرمایی بلور به وجود می‌آورد.

زوج وابسته از تهیجاهای با علامت مخالف یک گشتاور دوقطبی الکتریکی را نشان می‌دهد که به دلیل



شکل ۴. سه سازوکار اساسی پخش: (الف) تعویض از طریق دوران حول یک نقطهٔ میانی. ممکن است بیش از دو اتم با هم دوران کنند. (ب) کوچ کردن از طریق جایگاههای میانین. (ج) اتمها جای خود را با جایگاههای تهی شبکه تعویض می‌کنند.



شکل ۵. ظرفیت گرمایی برمید نقره که فزونی ظرفیت گرمایی را در اثر تشکیل ناراستهای شبکه نمایش می‌دهد.

حرکت زوجهای تهیجا، در ثابت دی‌الکتریک و اتلاف دی‌الکتریک سهیم‌اند. زمان واهلش دی‌الکتریکی مقیاسی است از زمان لازم برای اینکه یکی از جایگاههای تهی نسبت به جایگاه دیگر به اندازهٔ یک مکان اتمی جهش کند. تغییر گشتاور دوقطبی می‌تواند در بسامدهای پایین روی دهد و نه در بسامدهای بالا. بسامد واهلش در سدیم کلرید در 85°C برابر است با 10^{10}s^{-1} .

پخش

وقتی در جامد گزادیان غلظت اتمهای ناخالصی یا تهیجاها وجود داشته باشد، شاری از آنها در بلور به وجود می‌آید. در حالت تعادل، ناخالصیها یا تهیجاها به‌طور یکنواخت توزیع خواهند شد. شارکل J_N یک نوع

از آنها در جامد با یک رابطه پدیده‌شناختی، که به قانون فیک معروف است، به گرادیان غلظت N همین نوع مربوط می‌شود

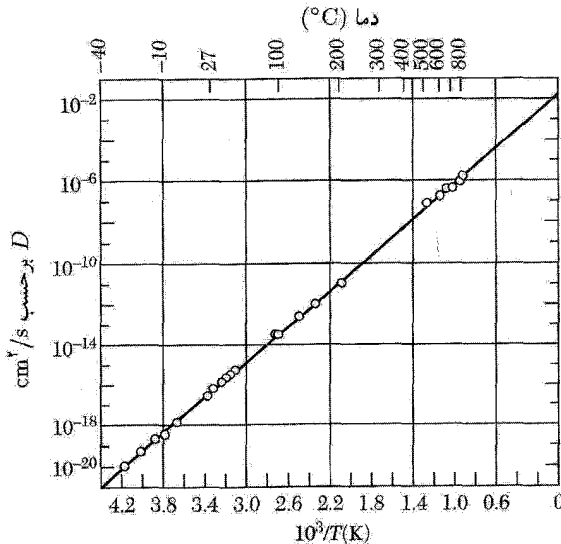
$$J_N = -D \text{ grad } N \quad (5)$$

در اینجا J_N تعداد اتمهایی است که در واحد زمان از واحد سطح عبور می‌کنند؛ ثابت D ثابت پخش یا ضریب پخش است و واحد آن cm^2s^{-1} یا m^2s^{-1} است. علامت منفی به این معنی است که پخش به طرف خارج از نواحی با غلظت زیاد رخ می‌دهد. رابطه (۵) برای قانون پخش اغلب بسنده است، ولی به طور دقیق این گرادیان پتانسیل شیمیایی است که نیروی محرکه پخش است و نه گرادیان غلظت به تنهایی (TP، صفحه ۴۰۶).

معلوم شده است که ثابت پخش اغلب به این صورت با دما تغییر می‌کند

$$D = D_0 \exp(-E/k_B T) \quad (6)$$

در اینجا E انرژی فعال‌سازی این فرایند است. نتایج تجربی مربوط به پخش کربن در آهن آلفا در شکل ۶ نشان داده شده‌اند. این داده‌ها را می‌توان با $E = 0.87 \text{ eV}$ ، $D_0 = 0.2 \text{ cm}^2/\text{s}$ نمایش داد. مقادیر نوعی D و E در جدول ۱ ارائه شده‌اند.



شکل ۶. ضریب پخش کربن در آهن. لگاریتم D مستقیماً با $1/T$ متناسب است.

جدول ۱. ثابتهای پخش و انرژیهای فعال سازی

گروه		D_0	E	گروه		D_0	E
بلور	اتم	cm^2s^{-1}	eV	بلور	اتم	cm^2s^{-1}	eV
Cu	Cu	7.0×10^{-3}	۲۰۴	Si	Al	8.0×10^{-3}	۳۴۷
Cu	Zn	3.4×10^{-3}	۱۹۸	Si	Ga	3.6×10^{-3}	۳۵۱
Ag	Ag	4.0×10^{-3}	۱۹۱	Si	In	1.6×10^{-3}	۳۹۰
Ag	Cu	1.2×10^{-3}	۲۰۰	Si	As	3.2×10^{-3}	۳۵۶
Ag	Au	2.6×10^{-3}	۱۹۸	Si	Sb	5.6×10^{-3}	۳۹۴
Ag	Pb	2.2×10^{-3}	۱۶۵	Si	Li	2.0×10^{-3}	۳۶۶
Na	Na	2.4×10^{-3}	۲۴۵	Si	Au	1.0×10^{-3}	۱۱۳
U	U	2.0×10^{-3}	۱۲۰	Ge	Ge	1.0×10^{-3}	۳۱

برای اینکه اتم پخش شود، باید بر سد انرژی پتانسیلی که همسایه‌هایش ایجاد می‌کنند، غلبه کند. پخش اتمهای ناخالصی در جایگاههای میانین را مورد بررسی قرار می‌دهیم. استدلال مشابهی نیز در مورد پخش تیهجاها به‌کار می‌رود. اگر ارتفاع سد E باشد، اتم فقط برای کسر $\exp(-E/kBT)$ از زمان، انرژی گرمایی کافی برای عبور از این سد را خواهد داشت. تونل زنی کوانتومی فرایند ممکن دیگری است که معمولاً فقط برای سبکترین هسته‌ها به‌ویژه هیدروژن اهمیت پیدا می‌کند.

اگر ν بسامد ارتعاشی اتمی مشخصه باشد، احتمال p برای اینکه اتم در مدت زمان یک ثانیه دارای انرژی گرمایی کافی برای عبور از سد باشد، چنین است:

$$p \approx \nu \exp(-E/kBT) \quad (7)$$

این اتم، در واحد زمان، ν مرتبه از سد عبور می‌کند و احتمال غالب آمدن بر سد در هر مرتبه $\exp(-E/kBT)$ است. کمیت p را بسامد جهش می‌نامند.

دو صفحه موازی از اتمهای ناخالصی را که در جایگاههای میانین قرار دارند، در نظر می‌گیریم. این دو صفحه به اندازه ثابت شیکه a از یکدیگر فاصله دارند. S اتم ناخالصی روی یک صفحه و $(S + A dS/dx)$ اتم ناخالصی روی صفحه دیگر وجود دارند. تعداد کل اتمهایی که در یک ثانیه از بین این دو صفحه عبور می‌کنند تقریباً مساوی با $-pa dS/dx$ است. اگر N غلظت کل اتمهای ناخالصی باشد، در این صورت برای واحد سطح یک صفحه داریم $S = aN$.

اکنون شار پخش را می‌توان به شکل زیر نوشت

$$J_N \approx -pa^2 (dN/dx) \quad (۸)$$

از مقایسه با رابطه (۵) نتیجه زیر حاصل می‌شود

$$D = \nu a^2 \exp(-E/k_B T) \quad (۹)$$

که با $D_0 = \nu a^2$ به شکل (۶) است.

اگر ناخالصیها باردار باشند، می‌توان با استفاده از ضریب پخش و رابطه اینشتین $k_B T \bar{\mu} = qD$ ، از TP ، صفحه ۴۰۶، تحرک یونی $\bar{\mu}$ و رسانندگی σ را به دست آورد

$$\bar{\mu} = (q\nu a^2 / k_B T) \exp(-E/k_B T) \quad (۱۰)$$

$$\sigma = Nq\bar{\mu} = \left(\frac{Nq^2 \nu a^2}{k_B T} \right) \exp(-E/k_B T) \quad (۱۱)$$

که در آن N غلظت یونهای ناخالصی با بار q است.

نسبت تهیجاها در گستره‌ای که یونهای فلز دوظرفیتی تعداد تهیجاها را تعیین می‌کنند، مستقل از دماست. در این صورت، شیب منحنی $\ln \sigma$ برحسب $1/k_B T$ انرژی فعال‌سازی سد E_+ را برای جهش تهیجاهای یون مثبت به دست می‌دهد (جدول ۲). پخش در دماهای پایین بسیار کند صورت می‌گیرد. بسامد جهش در دمای اتاق از مرتبه $1s^{-1}$ و در $10^\circ K$ از مرتبه $10^{-25} s^{-1}$ است.

کسر تهیجاها در گستره‌دمايي که در آن غلظت ناراستیها توسط تولید گرمایی تعیین می‌شود، با رابطه زیر داده می‌شود

$$f \cong \exp(-E_f / 2k_B T) \quad (۱۲)$$

که در آن E_f ، بنابر نظریه ناراستیهای شونکی یا فرنکل، انرژی تشکیل یک زوج تهیجاست. در اینجا بنابر روابط (۱۰) و (۱۲) شیب منحنی $\ln \sigma$ برحسب $1/k_B T$ برابر با $E_f + \frac{1}{2}E_+$ خواهد بود. انرژی تشکیل یک زوج تهیجا، E_f ، و انرژی فعال‌سازی جهش، E_+ را می‌توان با اندازه‌گیری در گستره‌های مختلف دما تعیین کرد. ثابت پخش را می‌توان با فنون ردیابی پرتوایی اندازه‌گیری کرد. پخش یک توزیع اولیه معلوم از یونهای پرتوزا به صورت تابعی از زمان یا فاصله دنبال می‌شود. مقادیر ثابت پخش را که به این ترتیب تعیین می‌شوند، می‌توان با مقادیر حاصل از رسانندگیهای یونی مقایسه کرد. معمولاً این دو دسته از مقادیر، با در نظر گرفتن دقت تجربی، با یکدیگر سازگار نیستند، در نتیجه ممکن است سازوکار پخش دیگری که متضمن تراپرد بار نباشد، حضور داشته باشد. برای مثال، پخش زوجهای تهیجای یونهای مثبت و منفی متضمن تراپرد بار نیست.

جدول ۲. انرژی فعال‌سازی E_+ برای حرکت تهیجای یون مثبت

انرژی تشکیل یک زوج تهیجا، E_f ، نیز داده شده است. اعدادی که برای نمکهای نقره در پرانتز داده شده‌اند مربوط به یونهای نقره میانین‌اند.

پژوهشگران	E_f (eV)	E_+ (eV)	بلور
ایتسل و ماؤرر	۲۰۲	۰٫۸۶	NaCl
هیون	۲۶۸	۰٫۶۵	LiF
هیون	۲۱۲	۰٫۴۱	LiCl
هیون	۱٫۸۰	۰٫۳۱	LiBr
هیون	۱٫۳۴	۰٫۳۸	LiI
واگنر؛ کِلِتینگ و ویت	۲٫۱-۲٫۴	۰٫۸۹	KCl
تِلتاؤ	۱٫۴*	۰٫۳۹ (۰٫۱۰)	AgCl
کامپتون	۱٫۱*	۰٫۲۵ (۰٫۱۱)	AgBr

* برای ناراستی فرنکل.

فلزات

خودپخشی در فلزات تک‌اتمی اغلب از طریق تهیجای شبکه انجام می‌شود. خودپخشی به معنای پخش امتهای خود فلز است، نه ناخالصیها. انتظار می‌رود که انرژی فعال‌سازی در مس برای خودپخشی از طریق تهیجاها در گستره ۲٫۴eV تا ۲٫۷eV و برای پخش از طریق جایگاههای میانین در گستره ۵٫۱eV تا ۶٫۴eV باشد. مقادیر مشاهده‌شده انرژی فعال‌سازی از ۱٫۷ تا ۲٫۱eV است.

انرژیهای فعال‌سازی را برای پخش در Li و Na می‌توان با استفاده از اندازه‌گیریهای وابستگی دمایی پهنای خط تشدید هسته‌ای تعیین کرد. همان‌گونه که در تشدید مغناطیسی بحث شد، وقتی بسامد جهش یک اتم بین جایگاهها در مقایسه با بسامد مربوط به پهنای خط استاتیکی سریع شود، پهنای خط تشدید باریک می‌شود. با استفاده از NMR، مقادیر ۰٫۵۷eV و ۰٫۴۵eV برای Li و Na تعیین شدند. اندازه‌گیریهای خودپخشی برای سدیم نیز ۰٫۴eV را به دست می‌دهد.

مراکز رنگ

بلورهای هالید قلیایی خالص در براسر ناحیه مرئی طیف شفاف‌اند. مرکز رنگ یک ناراستی شبکه‌ای است که نور مرئی را جذب می‌کند. یک تهیجای شبکه عادی با اینکه بر جذب در فرابنفش اثر می‌گذارد، بلورهای هالید قلیایی را رنگی نمی‌کند. این بلورها را می‌توان با روشهای زیر رنگی کرد:

- با وارد کردن ناخالصیهای شیمیایی؛
- با وارد کردن یک مقدار اضافی از یون فلزی (بلور را می‌توان در بخار فلز قلبیایی گرما داد و سپس آن را به تندی سرد کرد— بلور NaCl که در حضور بخار سدیم حرارت داده شود، زرد می‌شود؛ بلور KCl که در بخار سدیم حرارت داده شود به رنگ اناری در می‌آید)؛
- از طریق بمباران بلور با پرتو x، پرتو γ ، نوترون، و الکترون؛ و
- به وسیله الکترولیز.

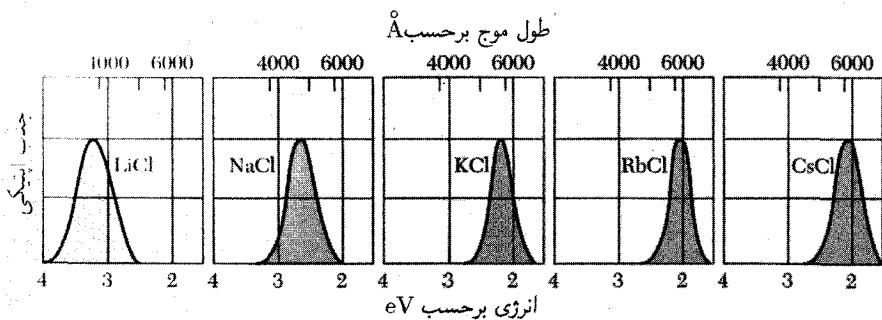
مراکز F

نام مرکز F از کلمه آلمانی *Farbe* به معنای رنگ می‌آید. مراکز F را معمولاً با گرما دادن بلور در فزونی بخار قلبیایی و یا با قرار دادن بلور در معرض تابش پرتو x تولید می‌کنیم. نوار جذب اصلی (نوار F) مربوط به مرکز F در چند هالید قلبیایی در شکل ۷ نشان داده شده است، و انرژیهای کوانتومی در جدول ۳ داده شده‌اند. ویژگیهای تجربی مراکز F ، در ابتدا به وسیله پول^۱، به تفصیل بررسی شده‌اند.

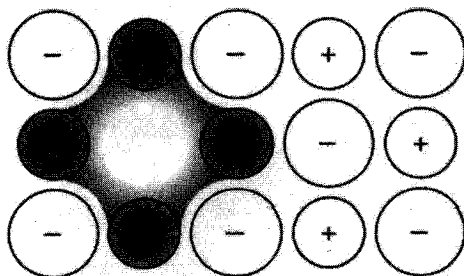
تشدید اسپینی الکترون، مرکز F را به صورت الکترونی که در یک تهیجای یون منفی مقید است (شکل ۸)، مشخص می‌کند، که با مدل پیشنهادی دو بور^۲ توافق دارد. وقتی اتمهای قلبیایی اضافی به بلور هالید قلبیایی افزوده شوند، تعداد متناظری تهیجای یون منفی ایجاد می‌شود و الکترون ظرفیتی اتم قلبیایی به اتم مقید نیست؛ این الکترون در بلور کوچک می‌کند و به یک جایگاه تهی یون منفی مقید می‌شود. تهیجای یون منفی در شبکه دوره‌ای کامل دارای همان اثر بار مثبت منزوی است: این تهیجا الکترون را جذب و مقید می‌کند. با افزودن بار مثبت q به بار عادی $-q$ در جایگاه اشغال شده یون منفی، می‌توان اثر الکتروستاتیکی تهیجای یون منفی را شبیه‌سازی کرد.

جدول ۳. انرژیهای جذب مراکز F که به‌طور تجربی برحسب eV به‌دست آمده‌اند

۲٫۳	NaBr	۳٫۱	LiCl
۲٫۰	KBr	۲٫۷	NaCl
۱٫۸	RbBr	۲٫۲	KCl
۵٫۰	LiF	۲٫۰	RbCl
۳٫۶	NaF	۲٫۰	CsCl
۲٫۷	KF	۲٫۷	LiBr



شکل ۷. نوارهای F برای چند هالید قلیایی: جذب اپتیکی برحسب طول موج برای بلورهایی که مراکز F را در بر دارند.



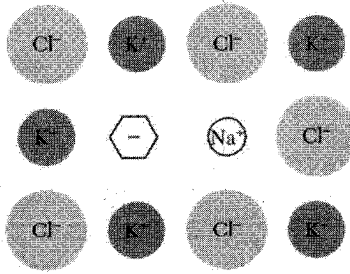
شکل ۸. مرکز F یک تهیجای یون منفی همراه با یک الکترون اضافی مقید به آن تهیجاست. توزیع این الکترون اضافی عمدتاً روی یونهای فلزی مثبت مجاور به جایگاه شبکه تهی است.

مرکز F ساده‌ترین مرکز الکترون به‌دام افتاده در بلورهای هالید قلیایی است. جذب اپتیکی مرکز F از گذار دوقطبی الکترونیکی به یک حالت برانگیخته مقید این مرکز ناشی می‌شود.

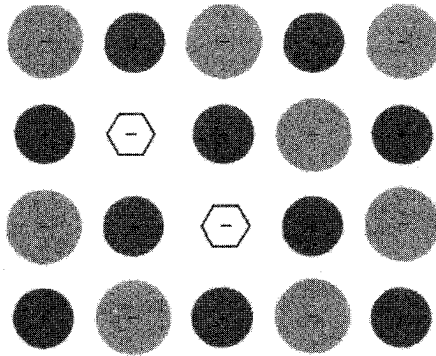
مراکز دیگر در هالیدهای قلیایی

همان‌گونه که در شکل ۹ نشان داده شده، در مرکز FA به‌جای یکی از شش همسایه اول مرکز F یک یون قلیایی متفاوت قرار گرفته است. همان‌طور که در شکل‌های ۱۰ و ۱۱ نشان داده شده است، مراکز الکترون به‌دام افتاده پیچیده دیگری توسط گروههایی از مرکز F تشکیل می‌شوند. بدین ترتیب دو مرکز F مجاور، یک مرکز M را تشکیل می‌دهند. سه مرکز F یک مرکز R را تشکیل می‌دهند. این مراکز معمولاً به‌وسیلهٔ بسامد جذب اپتیکی شان شناسایی می‌شوند.

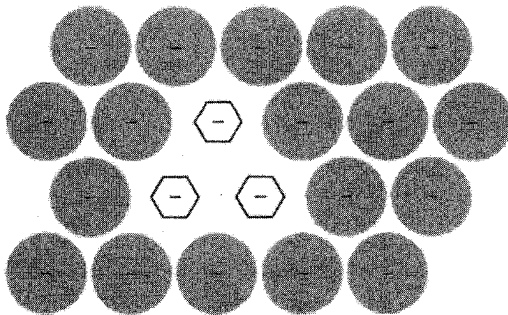
از به‌دام‌اندازی حفره‌ها نیز می‌توان مراکز رنگ ساخت. ولی مراکز حفره‌ای معمولاً به‌سادگی مراکز الکترونی



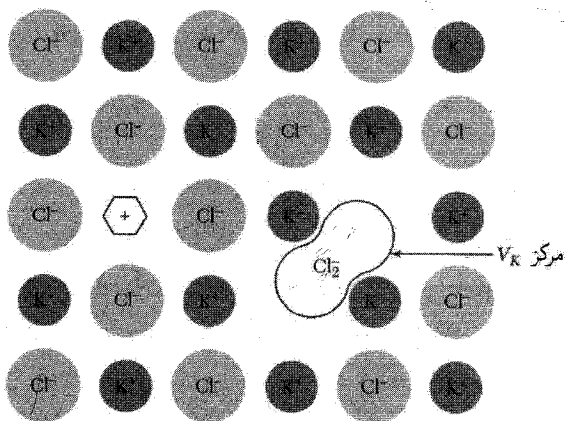
شکل ۹. یک مرکز F_A در KCl : به جای یکی از شش یون K^+ که یک مرکز F را مقید می‌کنند، یک یون قلیایی دیگر، در اینجا Na^+ ، قرار می‌گیرد.



شکل ۱۰. مرکز M از دو مرکز F مجاور تشکیل می‌شود.



شکل ۱۱. مرکز R از سه مرکز F مجاور تشکیل می‌شود: یعنی، شامل گروهی متشکل از سه تهیجای یون منفی در صفحه [۱۱۱] ساختار $NaCl$ همراه به سه الکترون وابسته است.



شکل ۱۲. مرکز V_K هنگامی تشکیل می‌شود که یک زوج یون منفی حفره‌ای را به‌دام می‌اندازد. این مرکز به یون منفی مولکول هالوژن، یعنی Cl_2 در KCl ، شبیه است. مرکز V_K متضمن هیچ تهیجای شبکه یا اتمهای اضافی نیست. مرکز واقع در طرف چپ این شکل احتمالاً پایدار نیست: شش ضلعی معرف حفره‌ای است که در نزدیکی تهیجای یون مثبت به‌دام افتاده است. چنین مرکزی پادریخت مرکز F است. حفره‌هایی که در مرکز V_K گرفتار می‌شوند از حفره‌هایی که در مرکز پاد F به‌دام افتاده‌اند، انرژی پایینتری دارند.

نیستند. برای مثال یک حفره در پوسته p^6 یک یون هالوژن این یون را در پیکربندی p^5 بر جای می‌گذارد، در حالی که یک الکترون که به پوسته p^6 یک قلیایی افزوده شود، این یون را در پیکربندی $s p^6$ بر جای می‌گذارد. شیمی این دو مرکز متفاوت است: $s p^6$ به‌صورت یون متقارن کروی، ولی p^6 به‌صورت یون نامتقارن عمل می‌کند و به سبب اثر یان-تلر محیط مجاور خود را در بلور آشفته می‌کند.

پادریخت مرکز F حفره‌ای است که در تهیجای یون مثبت به‌دام افتاده، ولی چنین مرکزی به‌طور تجربی در هالیدهای قلیایی شناسایی نشده است؛ در اکسیدهای عایق ناراستی O^- (به نام \bar{V}) شناسایی شده است. مرکز V_K معروفترین مرکز حفره به‌دام افتاده است (شکل ۱۲). برای تشکیل مرکز V_K در بلور کامل هالید قلیایی، حفره را می‌توان به‌وسیله یون هالوژن به‌دام انداخت. تشدید اسپینی نشان می‌دهد که ساختار مرکز V_K شبیه به یون مولکول هالوژن است: در KCl مرکز V_K مانند یون Cl_2^- است. به‌دام افتادن یان-تلر حفره‌های آزاد، مؤثرترین شکل خود به‌دام افتادگی حامله‌های بار در بلورهای کامل است.

مسائل

۱. ناراستیهای فرنکل. نشان دهید در بلوری که دارای N نقطه شبکه و N' مکان میانین ممکن باشد،

تعداد n اتم میانین که با n تهیجای شبکه در تعادل اند با معادله زیر داده می‌شود:

$$E_I = k_B T \ln[(N - n)(N' - n)/n^2]$$

که از آنجا، برای $n \ll N, N'$ داریم $n \cong (NN')^{1/2} \exp(-E_I/2k_B T)$. در اینجا E_I انرژی لازم برای بردن یک اتم از یک جایگاه شبکه به مکان میانین است.

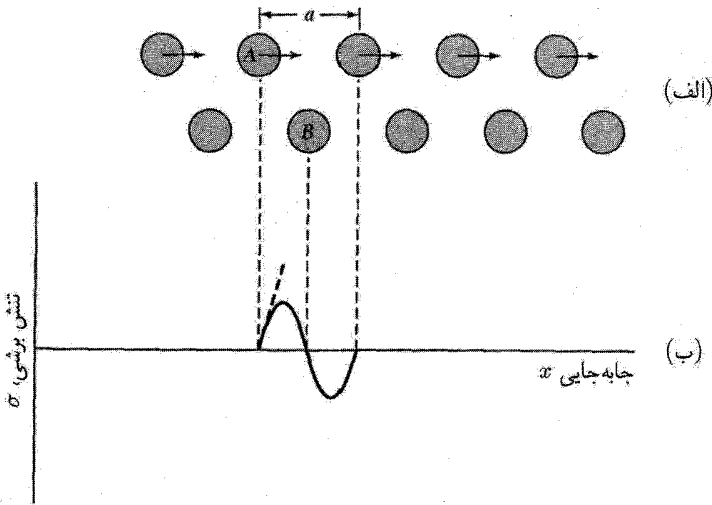
۲. تهیج‌های شوتکی. فرض کنید که انرژی لازم برای بردن یک اتم سدیم از درون بلور سدیم به مرز بلور برابر با 1eV باشد. غلظت تهیج‌های شوتکی را در دمای 300K حساب کنید.

۳. مرکز F . (الف) مرکز F را به منزله الکترون آزادی به جرم m در نظر بگیرید که در میدان بار نقطه‌ای e در محیطی با ثابت دی‌الکتریک $\epsilon = n^2$ حرکت می‌کند؛ اختلاف انرژی $1s-2p$ مراکز F در NaCl چقدر است؟ (ب) با استفاده از جدول ۳ انرژی برانگیختگی مرکز F در NaCl را با اختلاف انرژی $3s-3p$ اتم سدیم آزاد مقایسه کنید.

دررفتگیها

این فصل به تعبیر ویژگیهای مکانیکی پلاستیک جامدهای بلورین بر مبنای نظریه دررفتگیها می‌پردازد. ویژگیهای پلاستیکی، تغییر شکلهایی برگشت‌ناپذیرند؛ ویژگیهای کشسانی برگشت‌پذیرند. سهولت تغییر شکل پلاستیکی تک بلورهای خالص غیرمنتظره است. این سستی ذاتی بلورها به روشهای مختلف ظاهر می‌شود. کلرید نقره خالص در 455°C ذوب می‌شود، با وجود این در دمای اتاق دارای استحکام پنیروگونه‌ای است و آن را می‌توان با نورد به شکل ورقه درآورد. بلورهای آلومینیم خالص فقط تا کرنشی در حدود 10^{-5} کشسان‌اند (از قانون هوک پیروی می‌کنند)، و پس از آن به‌طور پلاستیکی تغییر شکل پیدا می‌کنند.

برآوردهای نظری کرنش در حد کشسانی بلورهای کامل مقادیری به دست می‌دهند که 10^3 یا 10^4 مرتبه بزرگتر از کوچکترین مقادیر مشاهده شده‌اند، گر چه ضریب 10^2 متداولتر است. این قاعده که بلورهای خالص پلاستیک‌اند نه مقاوم، چند استثنا دارد: بلورهای ژرمانیم و سیلیسیم در دمای اتاق پلاستیک نیستند و تنها از طریق شکستگی تسلیم یا تخریب می‌شوند. شیشه در دمای اتاق فقط از طریق



شکل ۱. (الف) برش نسبی دو صفحه اتمی (که مقطع آنها نشان داده شده است) در بلوری که به طور یکنواخت کرنش یافته است. (ب) تنش برشی به صورت تابعی از جابه جایی نسبی صفحه‌ها از مکان تعادل شان. خط چین پررنگی که در شیب آغازی رسم شده است، مدول برشی G را تعریف می‌کند.

شکستگی تخریب می‌شود، ولی بلورین نیست. شکستگی شیشه از تراکم تنشها در ترکهای ریز ناشی می‌شود.

مقاومت برشی تک بلورها

فرنکل روش ساده‌ای برای برآورد مقاومت برشی نظری بلور کامل ارائه کرد. در شکل ۱، نیروی لازم را برای آنکه دو صفحه اتمی نسبت به یکدیگر جابه جایی برشی داشته باشند، در نظر می‌گیریم. در کرنشهای مشسان کوچک، تنش σ با رابطه زیر به جابه جایی x مربوط می‌شود

$$\sigma = Gx/d \quad (1)$$

در اینجا d فاصله بین صفحه‌های، و G نمایشگر مدول برشی مناسب است. وقتی این جابه جایی بزرگ باشد و تا نقطه‌ای پیش رود که اتم A در شکل مستقیماً بالای اتم B قرار گیرد، دو صفحه اتمی در بیکر بندی تعادل ناپایدار قرار دارند و تنش صفر است. در اولین تقریب رابطه تنش- جابه جایی را به صورت زیر نمایش می‌دهیم

$$\sigma = (Ga/2\pi d) \sin(2\pi x/a) \quad (2)$$

جدول ۱. مقایسهٔ مدول برشی G و حد کشسانی مشاهده‌شدهٔ σ_c

σ_c	حد کشسانی G/σ	مدول برشی G	
		برحسب dyn/cm^2	dyn/cm^2
۱۵,۰۰۰	۱.۳×۱۰^۷	۱.۹×۱۰^{۱۱}	Sn، تک‌بلور
۴۵,۰۰۰	۶×۱۰^۶	۲.۸×۱۰^{۱۱}	Ag، تک‌بلور
۶۰,۰۰۰	۴×۱۰^۶	۲.۵×۱۰^{۱۱}	Al، تک‌بلور
۹۰۰	۲.۶×۱۰^۸	۲.۵×۱۰^{۱۱}	Al، خالص، بسبلور
۲۵۰	۹.۹×۱۰^۸	$\sim ۲.۵ \times ۱۰^{۱۱}$	Al، تجاری
۷۰	۳.۶×۱۰^۹	$\sim ۲.۵ \times ۱۰^{۱۱}$	دورالومین
۵۰۰	۱.۵×۱۰^۹	۷.۷×۱۰^{۱۱}	Fe، نرم، بسبلور
۱۲۰	۶.۵×۱۰^۹	$\sim ۸ \times ۱۰^{۱۱}$	فولاد کربنی که تحت عملیات گرمایی قرار گرفته است
۶۵	۱.۲×۱۰^{۱۰}	$\sim ۸ \times ۱۰^{۱۱}$	فولاد نیکل-کروم

که در آن a فاصلهٔ بین اتمی در جهت برش است. این رابطه چنان بنا شده است که برای مقادیر x/a کم به رابطهٔ (۱) ساده شود. تنش برشی بحرانی σ_c که به‌ازای آن شبکه ناپایدار می‌شود، با مقدار پیشینهٔ σ داده می‌شود، یا

$$\sigma_c = Ga/2\pi d \quad (۳)$$

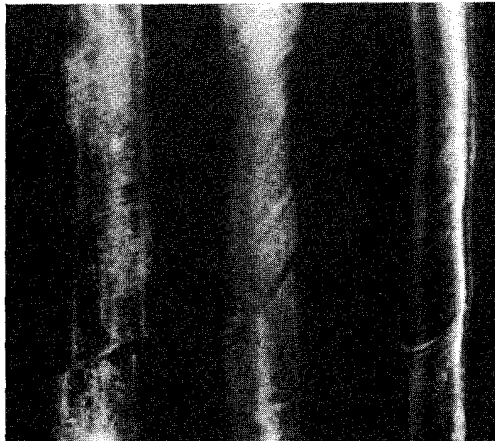
اگر $d \approx a$ ، آنگاه $\sigma_c \approx G/2\pi$: تنش برشی بحرانی ایده‌آل از مرتبهٔ $۱/۶$ مدول برشی است. با مراجعه به جدول ۱ مشاهده می‌شود که مقادیر تجربی حد کشسانی به‌مراتب کوچکتر از آن مقداری است که از رابطهٔ (۳) نتیجه می‌شود: با در نظر گرفتن شکل واقعی نیروهای بین مولکولی و با در نظر گرفتن سایر پیکربندیهای دارای پایداری مکانیکی که به‌هنگام برش در دسترس شبکه‌اند، می‌توان این برآورد نظری را بهتر کرد. مکنزی^۱ نشان داده است که این دو اثر می‌توانند مقاومت برشی ایده‌آل نظری را به حدود $G/30$ کاهش دهند، که این مقدار متناظر است با یک زاویهٔ کرنش برشی در حدود ۲ درجه. مقادیر کوچک مشاهده‌شده برای مقاومت برشی را تنها می‌توان با حضور ناکاملیهایی توضیح داد، که به منزلهٔ منشأ سستی مکانیکی در بلورهای واقعی عمل می‌کنند. حرکت ناکاملیهایی بلوری‌ای که در رفتگی نام دارند، باعث لغزش در تنشهای اعمال‌شدهٔ بسیار کوچک‌اند.

لغزش

تغییر شکل پلاستیکی در بلورها از طریق لغزش رخ می‌دهد، مثالی از آن در شکل ۲ نشان داده شده است. در لغزش، قسمتی از بلور به صورت یک واحد روی قسمت مجاور سر می‌خورد. سطحی که لغزش بر آن روی می‌دهد، صفحه لغزش نامیده می‌شود. جهت حرکت را جهت لغزش می‌نامند. طبیعت بسیار ناهمسانگرد لغزش نشانگر اهمیت زیاد ویژگیهای شبکه در کرنش پلاستیکی است. جابه‌جایی در امتداد صفحه‌هایی رخ می‌دهد که مجموعه شاخه‌های میلر آنها کوچک است، مانند صفحه‌های بلورنگاری $\{111\}$ در فلزات fcc و صفحه‌های بلورنگاری $\{110\}$ ، $\{112\}$ ، و $\{123\}$ در فلزات bcc.

جهت لغزش در امتداد خط با بیشترین تنگ‌چینی اتمی است، یعنی، $\langle 110 \rangle$ در فلزات fcc و $\langle 111 \rangle$ در فلزات bcc (مسئله ۱). برای آنکه ساختار بلوری پس از لغزش برقرار بماند، بردار جابه‌جایی یا لغزش باید با یک بردار انتقال شبکه‌ای برابر باشد. کوتاهترین بردار انتقال شبکه‌ای برحسب ثابت شبکه a در ساختار fcc به صورت $(a/2)(\hat{x} + \hat{y})$ ، و در ساختار bcc به صورت $(a/2)(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$ است. ولی در بلورهای fcc، جابه‌جاییهای جزئی نیز مشاهده شده‌اند، که توالی منظم $ABCABC \dots$ تنگ‌چین‌ترین صفحات را برهم می‌زنند، و نقص روی هم‌چینی مانند $ABCABABC \dots$ ایجاد می‌کنند. آنگاه نتیجه آمیزه‌ای از روی هم‌چینی fcc و hep است.

تغییر شکل حاصل از لغزش ناهمگن است: جابه‌جاییهای برشی بزرگی روی چند صفحه لغزشی رخ می‌دهند که خیلی از هم فاصله دارند، در حالی که بخشهایی از بلور که بین این صفحه‌های لغزشی واقع



شکل ۲. لغزش انتقالی در تک‌بلورهای روی.

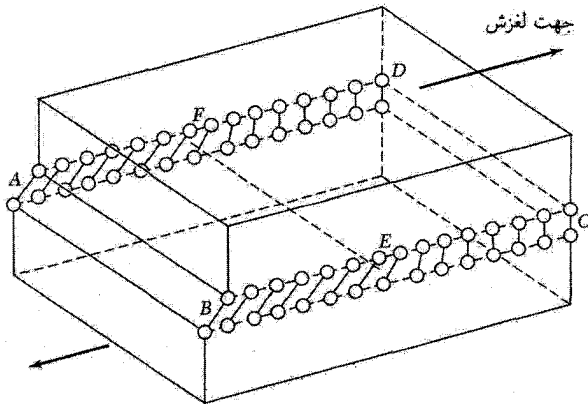
می‌شوند، اساساً بدون تغییر شکل باقی می‌مانند. یک ویژگی لغزش قانون اشمید^۱ دربارهٔ نقش برشی بحرانی است: لغزش در امتداد صفحه و جهت لغزش مفروض هنگامی رخ می‌دهد که مؤلفهٔ تنش برشی متناظر با آن به مقدار بحرانی برسد.

لغزش، یک مُد تغییر شکل پلاستیکی است. مُد دیگر، یعنی دوقلوزایی، به‌ویژه در ساختارهای hcp و bcc مشاهده می‌شود. در حین لغزش، جابه‌جایی قابل ملاحظه‌ای روی صفحه‌هایی لغزشی که خیلی از هم فاصله دارند، رخ می‌دهد. در حین دوقلوزایی، یک جابه‌جایی جزئی، به‌طور متوالی روی تعداد زیادی از صفحه‌های بلورنگاشتی همسایه رخ می‌دهد. پس از دوقلوزایی، بخش تغییر شکل یافتهٔ بلور، تصویر آینه‌ای بخش تغییر شکل نایافته خواهد بود. با اینکه لغزش و دوقلوزایی هر دو در اثر حرکت دررفتگیها به‌وجود می‌آیند، عمدتاً لغزش را مورد توجه قرار می‌دهیم.

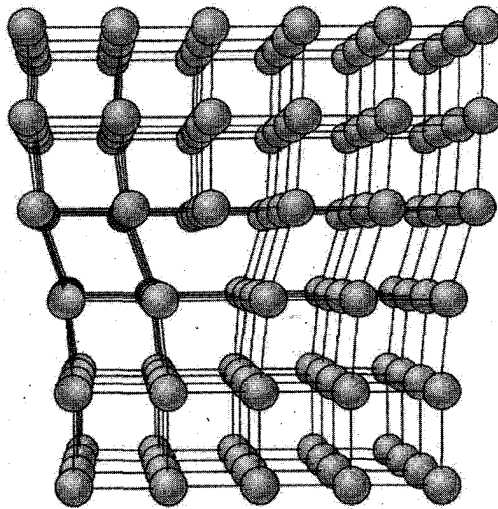
دررفتگیها

مقدارهای کم مشاهده‌شدهٔ تنش برشی بحرانی را می‌توان برحسب حرکت یک ناکاملی خطی، به‌نام دررفتگی، در شبکه توجیه کرد. این باور که لغزش از طریق حرکت دررفتگیها منتشر می‌شود، در سال ۱۹۳۴، تیلور^۲، اورووان^۳، و پولانی^۴ هر کدام جداگانه منتشر کردند؛ کمی قبل از آن پранتل^۵ و دلینگر^۶ مفهوم دررفتگی را مطرح کرده بودند. چند نوع اصلی دررفتگی وجود دارد. نخست دررفتگی لبه‌ای را شرح می‌دهیم. شکل ۳ بلور مکعبی ساده‌ای را نشان می‌دهد که در آن لغزشی برابر با یک فاصلهٔ اتمی روی نیمهٔ چپ صفحهٔ لغزش رخ داده، ولی در نیمهٔ راست لغزشی صورت نگرفته است. مرز بین نواحی لغزیده و نلغزیده را دررفتگی گویند. همان‌گونه که در شکل ۴ نشان داده شده است، مکان این دررفتگی با انتهای یک نیم صفحهٔ عمودی اضافی متشکل از اتمهایی مشخص می‌شود، که در نیمهٔ بالایی بلور قرار دارند. بلور در نزدیکی دررفتگی شدیداً کرنش یافته است. دررفتگی لبه‌ای ساده به‌طور نامعینی در صفحهٔ لغزش، در جهتی عمود بر جهت لغزش گسترش می‌یابد. در شکل ۵، عکس یک دررفتگی در لایهٔ شناور دوبعدی کف صابون، که به روش براگ و نای^۷ تهیه شده، نشان داده شده است.

سازوکاری که باعث جابه‌جایی دررفتگی است، در شکل ۶ نشان داده شده است. حرکت دررفتگی لبه‌ای در بلور شبیه به گذر یک چین یا چروک در طول قالی است: چروک آسانتر از تمامی قالی حرکت می‌کند. اگر اتمهای یک طرف صفحهٔ لغزش نسبت به اتمهای طرف دیگر حرکت داده شوند، اتمهای واقع بر صفحهٔ لغزش، تحت تأثیر نیروهای دفعی بعضی همسایگان، و نیروهای جاذب همسایگان دیگر در عرض صفحهٔ لغزش قرار می‌گیرند. این نیروها در تقرب اول یکدیگر را حذف می‌کنند. تنش خارجی لازم برای حرکت دررفتگی، در شرایطی که نیروهای پیونددهنده در بلور چندان جهتی نباشند، محاسبه شده و



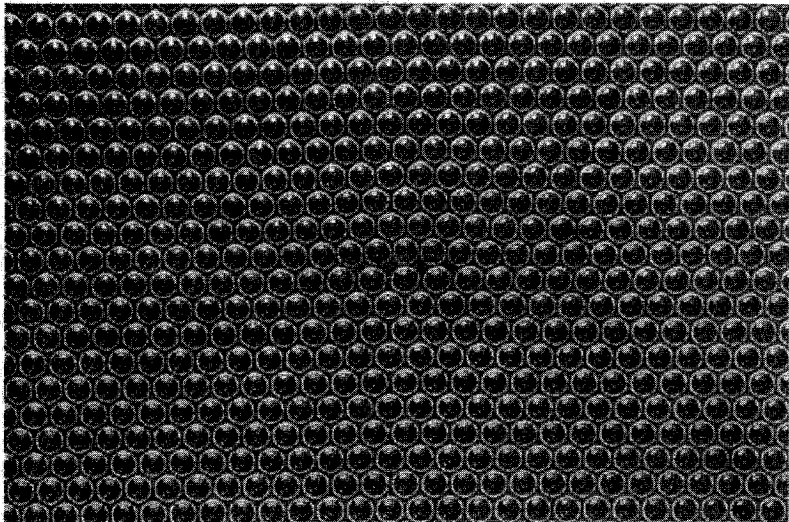
شکل ۳. دررفتگی لبه‌ای EF در صفحه لغزش $ABCD$. این شکل ناحیه لغزیده $ABEF$ را که در آن اتمها بیش از نصف ثابت شبکه جابه‌جا شده‌اند، و ناحیه نلغزیده $FECD$ با جابه‌جایی کمتر از نصف ثابت شبکه را نشان می‌دهد.



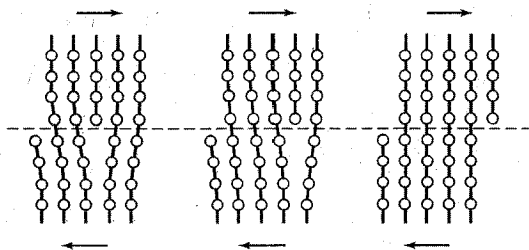
شکل ۴. ساختار دررفتگی لبه‌ای. می‌توان تصور کرد که تغییر شکل در اثر درج یک صفحه اضافی از اتمها در نیمه بالایی محور z به‌وجود آمده است. با درج این صفحه، اتمهای نیمه بالایی بلور متراکم و اتمهای نیمه پایینی گسترده می‌شوند.

بسیار کم است، کمتر از 10^5 dyn/cm^2 . بنابراین دررفتگیها می‌توانند بلور را بسیار پلاستیکی کنند. عبور دررفتگی از بلور، معادل با جابه‌جایی لغزشی بخشی از بلور است.

دررفتگی پیچی، نوع ساده دیگری از دررفتگی است، که در شکل‌های ۷ و ۸ رسم شده است.

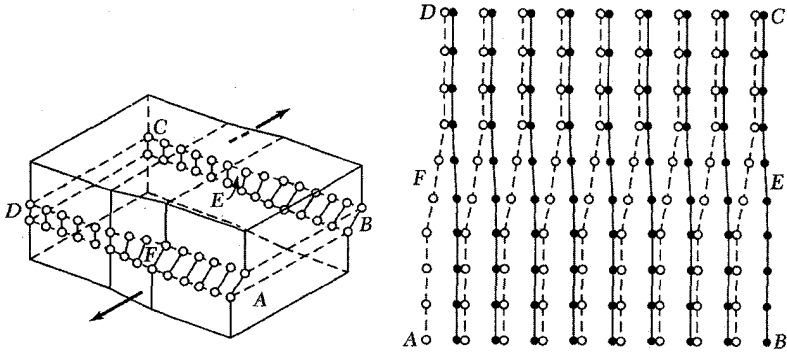


شکل ۵. دررفتگی درکف صابون دوبعدی شناور. با چرخاندن شکل کل به اندازه 30° در صفحه خود، این دررفتگی را می توان تحت یک زاویه دید کم به آسانی مشاهده کرد.

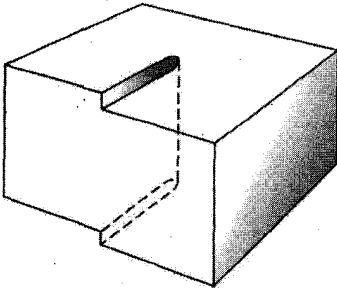


شکل ۶. حرکت دررفتگی تحت تأثیر برشی که می خواهد سطح بالای نمونه را به طرف راست حرکت دهد.

دررفتگی پیچی مرز بین بخشهای لغزیده و نلغزیده بلور را مشخص می کند. این مرز برخلاف دررفتگی لیه ای، که بر جهت لغزش عمود است، با جهت لغزش موازی است. می توان چنین انگاشت که دررفتگی پیچی در اثر بریدن بخشی از بلور با کاربرد، و برش آن به موازات لبه بریدگی به اندازه یک فاصله اتمی ایجاد می شود. دررفتگی پیچی، صفحه های اتمی متوالی را به سطح یک ماریچ تبدیل می کند، این امر نام دررفتگی را توجیه می کند.



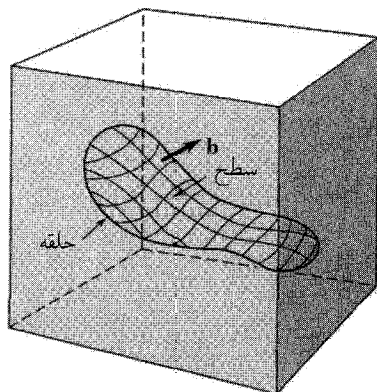
شکل ۷. دررفتگی پیچی. بخش $ABEF$ از صفحه لغزش در جهت موازی با خط دررفتگی EF لغزیده است. دررفتگی پیچی را می‌توان به صورت آرایش مارپیچی صفحات شبکه مجسم کرد، به طوری که با دور زدن کامل حول خط دررفتگی تغییر صفحه می‌دهیم.



شکل ۸. نمای دیگری از دررفتگی پیچی، خط چین عمودی که این دررفتگی را نشان می‌دهد، با ماده کرنش یافته احاطه شده است.

بردارهای برگرز

شکلهای دیگر دررفتگی را می‌توان از قطعه‌هایی از دررفتگیهای لبه‌ای و پیچی بنا کرد. برگرز نشان داده که عموماًترین شکل الگوی دررفتگی خطی را در بلور می‌توان به گونه‌ای توصیف کرد، که در شکل ۹ نشان داده شده است. یک منحنی بسته دلخواه درون بلور، یا منحنی بازی را که دو انتهایش به سطح بلور ختم شود، در نظر بگیرید: (الف) در بلور یک بریدگی به موازات سطح ساده‌ای که توسط این منحنی محصور شده ایجاد کنید. (ب) ماده موجود در یک طرف این سطح را به اندازه بردار b نسبت به طرف دیگر جابه‌جا کنید؛ در اینجا b را بردار برگرز گویند. (ج) در ناحیه‌هایی که b با سطح بریده شده موازی نباشد، این جابه‌جایی نسبی یا گافی ایجاد خواهد کرد یا باعث می‌شود که دو نیمه روی هم بیفتند. در این گونه موارد تصور کنید که یا ماده اضافه می‌کنیم تا گاف را پر کنیم یا از ماده برمی‌داریم تا از روی هم افتادگی جلوگیری کنیم. (د) ماده موجود در دو طرف را دوباره به هم متصل کنید. به هنگام جوش دادن مجدد، جابه‌جایی



شکل ۹. روش عمومی برای تشکیل حلقه دررفتگی در محیط. محیط با یک قطعه مستطیلی نمایش داده شده است. حلقه با یک منحنی بسته در داخل قطعه نشان داده شده است. این منحنی سطحی را که به وسیله پربندها مشخص شده است، محصور می‌کند. یک بریدگی در امتداد این سطح ایجاد کنید. ماده واقع در یک طرف بریدگی را نسبت به ماده واقع در طرف دیگر، به اندازه فاصله برداری b جابه‌جا کنید. این بردار می‌تواند نسبت به سطح هر جهت دلخواهی داشته باشد. برای ایجاد این جابه‌جایی نیروهایی مورد نیاز خواهند بود. برای آنکه محیط پس از جابه‌جایی پیوسته بماند، باید مقداری ماده اضافه یا کم کنید. آنگاه ماده را در حالت جابه‌جاشده وصل کنید و نیروهای اعمال شده را بردارید. در اینجا b بردار برگرز دررفتگی است.

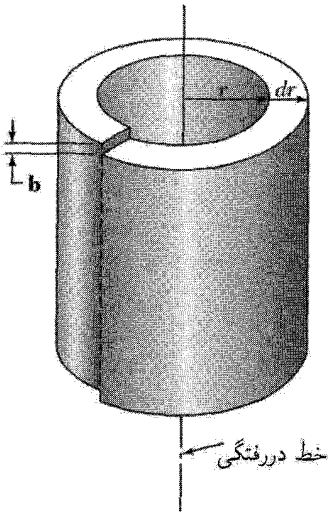
کرنشی را دست‌نخورده رها می‌کنیم، ولی پس از آن اجازه می‌دهیم که محیط به تعادل داخلی برسد. الگوی کرنش حاصل، الگوی دررفتگی است که توأمأً توسط منحنی مرزی و بردار برگرز مشخص می‌شود. برای آنکه فرایند جوش دادن مجدد، بلوری بودن ماده را حفظ کند، بردار برگرز باید برابر با بردار شبکه باشد. بردار برگرز دررفتگی پیچی (شکلهای ۷ و ۸) با خط دررفتگی موازی است؛ بردار برگرز دررفتگی لبه‌ای (شکلهای ۳ و ۴) بر خط دررفتگی عمود است و در صفحه لغزش قرار دارد.

میدانهای تنشی دررفتگیها

میدان تنشی دررفتگی پیچی به‌طور ویژه‌ای ساده است. شکل ۱۰ پوسته‌ای از ماده را نشان می‌دهد که یک دررفتگی پیچی محوری را احاطه کرده است. این پوسته که محیط آن $2\pi r$ است، به‌اندازه b برش یافته است تا کرنش برشی $e = b/2\pi r$ را ایجاد کند. تنش برشی متناظر در یک پیوستار کشسان برابر است با

$$\sigma = Ge = \frac{Gb}{2\pi r} \quad (۴)$$

این عبارت، در ناحیه‌ای که بلافاصله حول خط دررفتگی قرار دارد صادق نیست، زیرا در آنجا کرنشهای بسیار بیشتر از آن‌اند که بتوان نظریه پیوستار یا نظریه کشسانی خطی را به‌کار برد. انرژی کشسان این پوسته



شکل ۱۰. پوسته‌ای از بلور که به‌طور کشسان و ایچیده است و یک دررفتگی پیچی با بردار برگرز b را احاطه کرده است؛ شکل ۱۶ را نیز ببینید.

به‌ازای واحد طول برابر است با $dE_s = \frac{1}{4} G e^2 dV = (Gb^2/4\pi) dr/r$. انرژی کشسانی کل دررفتگی پیچی به‌ازای واحد طول با انتگرال‌گیری به‌صورت زیر به‌دست می‌آید

$$E_s = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0} \quad (5)$$

که در آن R و r_0 حدهای بالایی و پایینی مناسب برای متغیر r اند. یک مقدار منطقی برای r_0 ، با بزرگی بردار برگرز b یا با ثابت شبکه قابل مقایسه است؛ مقدار R نمی‌تواند از ابعاد بلور بزرگتر شود. مقدار نسبت R/r_0 چندان مهم نیست، زیرا به یک جمله لگاریتمی وارد می‌شود.

اکنون شکل انرژی یک دررفتگی را به‌دست می‌آوریم. تنشهای کششی را در جهت‌های شعاعی و محیطی با σ_{rr} و $\sigma_{\theta\theta}$ و تنش برشی را با $\sigma_{r\theta}$ نمایش می‌دهیم. در پیوستار کشسان همسانگرد، σ_{rr} و $\sigma_{\theta\theta}$ با $(\sin \theta)/r$ متناسب‌اند؛ به تابعی نیاز داریم که مانند $1/r$ نزول کند، و به هنگام تعویض y یا $-y$ تغییر علامت دهد. تنش برشی $\sigma_{r\theta}$ با $(\cos \theta)/r$ متناسب است؛ با در نظر گرفتن صفحه $y = 0$ ، از شکل ۴ درمی‌یابیم که تنش برشی تابع فردی از x است. ثابتهای تناسب در تنش با مدول برشی G و با بردار برگرز جابه‌جایی، b ، متناسب‌اند. نتیجه نهایی به‌قرار زیر است

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin \theta}{r}; \sigma_{r\theta} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\cos \theta}{r} \quad (6)$$

که در آن برای اکثر بلورها نسبت پواسون تقریباً برابر است با $\nu \approx 0.3$. انرژی کرنشی واحد طول دررفتگی

لبه‌ای برابر است با

$$E_e = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0} \quad (7)$$

می‌خواهیم برای مؤلفه تنش برشی b_{xy} ، روی صفحه‌های موازی با صفحه لغزش در شکل ۴ رابطه‌ای پیدا کنیم. از مؤلفه‌های تنش σ_{rr} ، $\sigma_{\theta\theta}$ و $\sigma_{r\theta}$ که روی صفحه‌ای به فاصله y در بالای صفحه لغزش محاسبه شده‌اند، درمی‌یابیم که

$$\sigma_{xy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \quad (8)$$

در مسئله ۳ نشان داده می‌شود که نیرویی که از تنش برشی یکنواخت تجزیه شده σ ناشی می‌شود، برای واحد طول دررفتگی برابر است با $F = b\sigma$. نیرویی که دررفتگی لبه‌ای در مبدأ بر دررفتگی مشابهی در مکان (y, θ) وارد می‌کند، به‌ازای واحد طول برابر است با

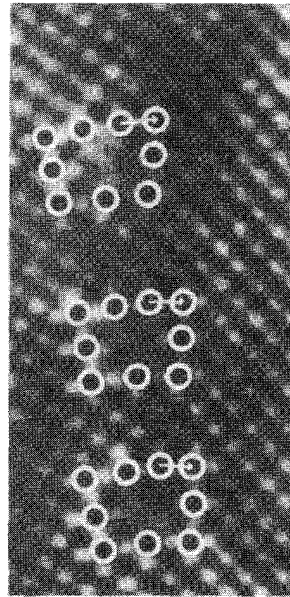
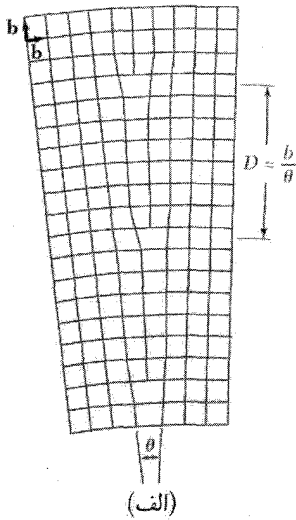
$$F = b\sigma_{xy} = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin 4\theta}{4y} \quad (9)$$

در اینجا F مؤلفه نیرو در جهت لغزش است.

مرزدانه‌های با زاویه کم

برگزر اظهار کرد که مرزهای با زاویه کوچک بین بلورکها، یا دانه‌های بلوری متصل به هم از آرایه‌های دررفتگیها تشکیل می‌شوند. یک مثال ساده از مدل برگرز در مورد مرزدانه‌ها در شکل ۱۱ نشان داده شده است. این مرز صفحه (010°) را در شبکه مکعبی ساده اشغال می‌کند و دو بخش از بلور را که دارای محور مشترک $[001]^\circ$ اند، از هم جدا می‌کند. چنین مرزی را مرز کج خالص گویند: این سمتگیری نامناسب را می‌توان با دوران کوچک θ ی یک بخش از بلور نسبت به بخش دیگر حول محور مشترک $[001]^\circ$ توصیف کرد. مرز کج با آرایه‌ای از دررفتگیهای لبه‌ای به فاصله $D = b/\theta$ از یکدیگر نمایش داده می‌شود، که در آن b بردار برگرز دررفتگیهاست. آزمایشها این مدل را تأیید کرده‌اند. شکل ۱۲ که با استفاده از میکروسکوپ الکترونی برداشته شده است، توزیع دررفتگیها را در راستای مرزدانه‌های با زاویه کم را نشان می‌دهد. علاوه بر این رید^۱ و شاکلی نظریه‌ای برای انرژی فصل مشترک به‌صورت تابعی از زاویه کج‌شدگی به‌دست آوردند که نتایج آن با اندازه‌گیریها سازگاری بسیار خوبی داشت.

فولگل^۲ و همکاران با استفاده از بررسیهای کمی پرتو x و اپتیکی، روی مرزهای با زاویه کم در بلورهای ژرمانیم، مدل برگرز را به‌طور مستقیم مورد تأیید قرار دادند. آنان با شمارش چالهای حک‌شده در راستای تقاطع مرزدانه با زاویه کم با یک سطح حک‌شده ژرمانیم (شکل ۱۳) فاصله بین دررفتگیها، D ، را تعیین

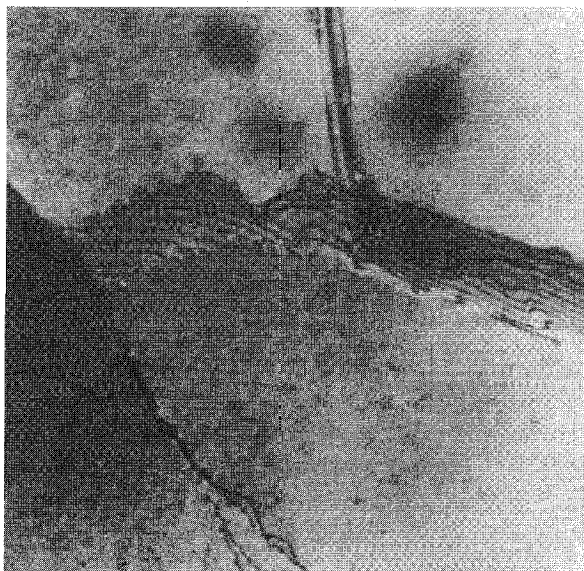


(ب)

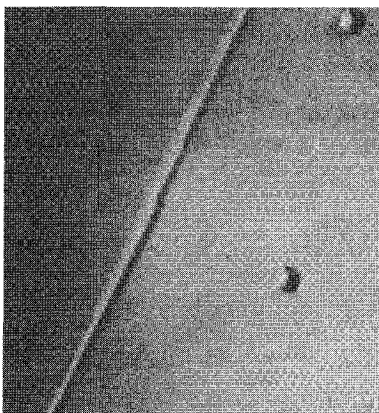
شکل ۱۱. (الف) مرزدانه با زاویه کم. (ب) میکروننگاشت الکترونی یک مرزدانه با زاویه کم در مولیبدن. سه دررفتگی موجود در تصویر، همانگونه که در ترسیم درون شکل ۱۱ (الف) نشان داده شده، دارای بردارهای برگرز یکسانی اند. دایره‌های سفید مکان ستونهای اتمی عمود بر صفحه کاغذ را مشخص می‌کنند. هر آرایه از دایره‌ها، با چهار دایره در بالا و سه دایره در پایین، مکان یک دررفتگی را معلوم می‌کند. کاستی بستاری توسط پیکانهایی که بردارهای برگرز را تعریف می‌کنند، نمایش داده شده است.

کردند. آنان فرض کردند که هر چال حک شده، انتهای یک دررفتگی را مشخص می‌کند. زاویه کج شدگی که از رابطه $\theta = b/D$ محاسبه می‌شود، با زاویه‌ای که مستقیماً با استفاده از پرتو x اندازه‌گیری می‌شود، سازگار است.

تفسیر مرزهای با زاویه کم به صورت آرایه‌ای از دررفتگیها با این واقعیت نیز مورد تأیید قرار گرفت که مرزهای کج صرف، با اعمال تنش مناسب در جهت عمود بر خودشان حرکت می‌کنند. این حرکت در یک آزمایش زیبا نشان داده شد (شکل ۱۴). نمونه، یک دو بلوره روی، حاوی مرز کج 2° با فاصله دررفتگی‌ای در حدود 3° صفحه اتمی است. یک طرف بلور با گیره نگه داشته شد، و نیرویی به نقطه‌ای در طرف مقابل مرز اعمال شد. حرکت مرز با حرکت جمعی دررفتگیهای موجود در آرایه رخ داد، که در آن هر دررفتگی، فاصله یکسانی را در صفحه لغزش خود پیمود. این حرکت در اثر تنشهایی از مرتبه تنش نقطه تسلیم برای بلورهای روی به وجود آمد. این امر گواه محکمی است بر آنکه تغییر شکل عادی از حرکت دررفتگیها ناشی می‌شود.

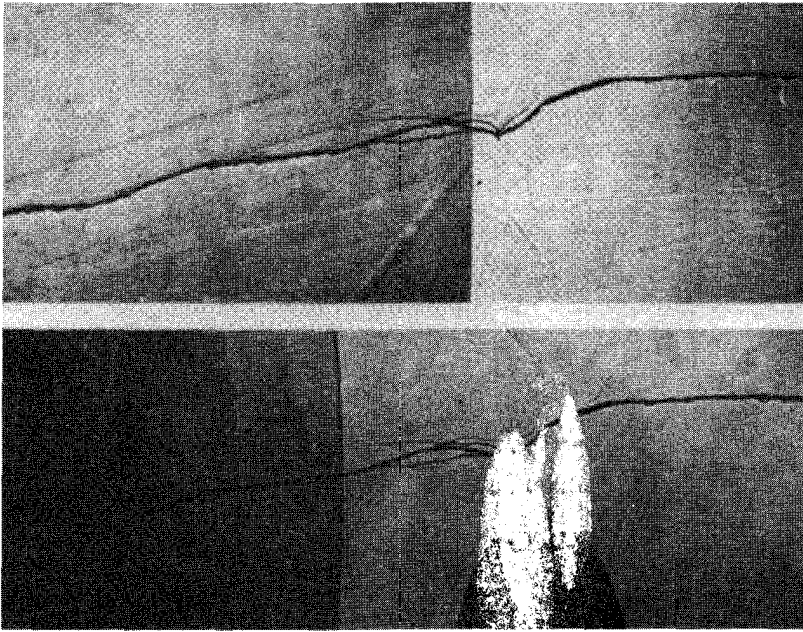


شکل ۱۲. میکرونگاشت الکترونی از ساختارهای دررفتگی در مرزدانه‌های با زاویه کم در محلول جامد Al-۷ درصد Mg. به خطهای متشکل از نقطه‌های ریز در طرف راست توجه کنید. بزرگنمایی ۱۷۰۰۰.



شکل ۱۳. چالهای حک‌شده دررفتگیها در مرز با زاویه کم روی وجه (100) ژرمانیم با زاویه این مرز $27.5''$ است. این مرز در صفحه (011) قرار دارد. خط دررفتگیها $[100]$ است. بردار برگرز برابر است با کوتاهترین بردار انتقال شبکه، یا $|b| = a\sqrt{2} = 4.7 \text{ \AA}$.

مرزدانه‌ها و دررفتگیها، در مقایسه با پخش اتمها در بلورهای کامل، مقاومت نسبتاً کمی در مقابل پخش اتمها از خود نشان می‌دهند. دررفتگی، گذرگاه بازی است برای پخش. پخش در مواردی که به‌گونه پلاستیکی تغییر شکل یافته‌اند، بیش از پخش در بلورهای بازپخته است. پخش در طول مرزدانه‌ها، آهنگ برخی از واکنشهای ته‌نشینی را در جامدها کنترل می‌کند. ته‌نشینی قلع از محلولهای سرب-قلع، در دمای اتاق، در حدود 10^8 بار سریعتر از آنچه از پخش در شبکه ایده‌آل انتظار می‌رود، انجام می‌شود.



شکل ۱۴. حرکت مرزدانه با زاویه کم در اثر تنش. مرز خط قائم مستقیم است، و تحت افروزش قائم عکس برداری شده است، که در نتیجه تغییر زاویه‌ای 2° در مرز روی سطح شکافتگی بلور روی آشکار شده است. خط افقی نامنظم پله کوچکی در سطح شکافتگی است که به منزله علامت مرجع عمل می‌کند. بلور در طرف چپ با گیره نگه داشته شده است؛ در طرف راست تحت تأثیر نیرویی عمود بر صفحه کاغذ قرار دارد. در بالا مکان اولیه مرز نشان داده شده است؛ در پایین مرز 4mm به عقب حرکت کرده است.

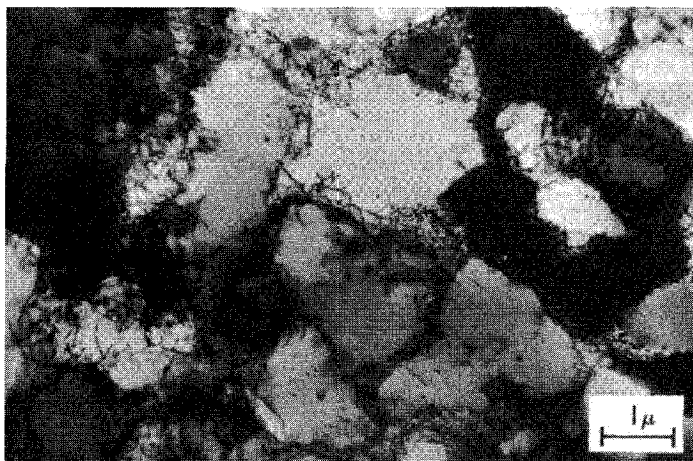
چگالی دررفتگیها

چگالی دررفتگیها برابر است با تعداد خطوط دررفتگی‌ای که واحد سطح بلور را قطع می‌کنند. گستره چگالیها از مقداری کمتر از 10^2 دررفتگی بر سانتیمتر مربع، در بهترین بلورهای ژرمانیم و سیلیسیم، تا 10^{11} یا 10^{12} دررفتگی بر سانتیمتر مربع، در بلورهای فلزی به شدت تغییر شکل یافته، تغییر می‌کند. روشهای موجود برای برآورد چگالیهای دررفتگی در جدول ۲ مقایسه شده‌اند. پیکربندیهای واقعی دررفتگیها در بلورهای ریخته‌ای یا بازپخته (که به آهستگی سرد شده)، متناظرند با گروهی از مرزدانه‌های با زاویه کم، یا همان گونه که در شکل ۱۵ نشان داده شده است، با یک شبکه سه‌بعدی از دررفتگیها که در باخته‌هایی مرتب شده‌اند. تهیج‌های شبکه که در امتداد دررفتگی لیه‌ای موجود ته‌نشین می‌شوند، بخشی از نیم‌صفحه اضافی آنها را می‌خورند، و باعث می‌شوند که دررفتگی صعود کند، یعنی عمود بر جهت لغزش حرکت کند. اگر هیچ دررفتگی‌ای موجود نباشد، بلور از تهیج‌های شبکه اُترشباع خواهد شد؛ ته‌نشینی این تهیج‌ها در

جدول ۲. روشهای برآورد چگالی دررفتگیها

چگالی عملی بیشینه، در cm^2	پهنای تصویر	ضخامت نمونه	روش
$10^{11} - 10^{12}$	در حدود 100 \AA	بزرگتر از 1000 \AA	میکروسکوپی الکترونی
$10^4 - 10^5$	$5 \mu\text{m}$	$0.1 - 1.0 \text{ mm}$	تراکسیل پرتو x
$10^6 - 10^7$	$2 \mu\text{m}$	کوچکتر از $2 \mu\text{m}(\text{min}) - 50 \mu\text{m}(\text{max})$	بازتاب پرتو x
2×10^7	$0.5 \mu\text{m}$	در حدود $10 \mu\text{m}$ (عمق کانون)	تزئین
4×10^8	$1.5 \mu\text{m}$	بدون حد	چالهای حک شده

۱. حد تفکیک چالهای حک شده

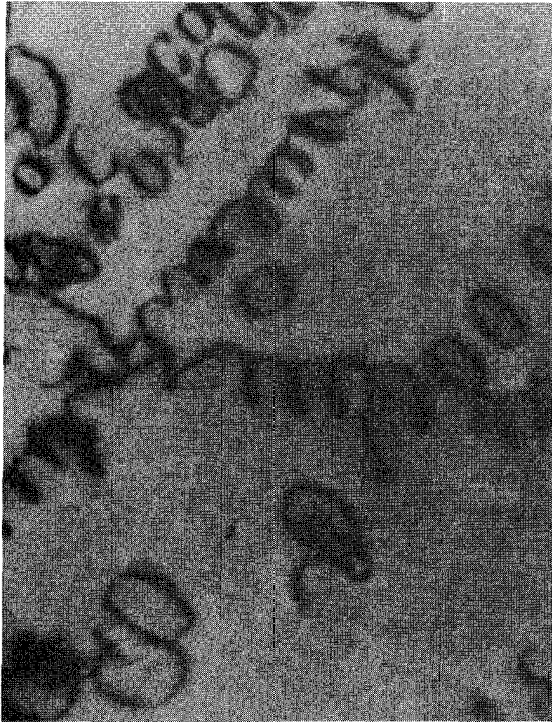


شکل ۱۵. ساختار یاخته‌ای دسته‌های درهم‌پیچیده سه‌بعدی از دررفتگیها در آلومینیم تغییر شکل یافته.

تیغه‌های استوانه‌ای از تهیجاها، همان گونه که در شکل ۱۶ نشان داده شده است، ممکن است رمبش تیغه‌ها و تشکیل حلقه‌های دررفتگی را به دنبال داشته باشد. این حلقه‌ها، با ته‌نشینی بیشتر تهیجاها رشد می‌کنند.

تکثیر دررفتگی و لغزش

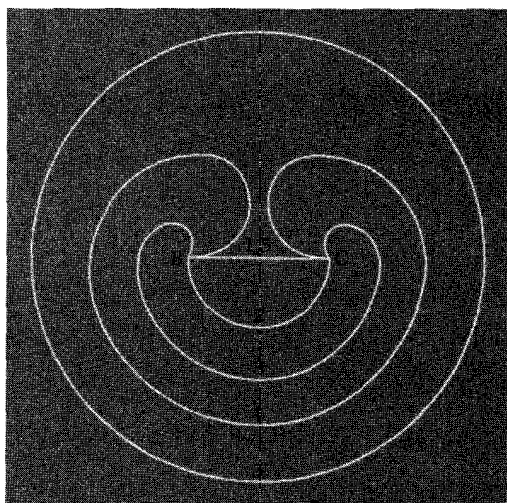
تغییر شکل پلاستیکی موجب افزایش بسیار زیاد چگالی دررفتگیها در حین تغییر شکل، نوعاً از 10^8 تا حدود 10^{11} دررفتگی بر سانتیمتر مربع، می‌شود. اگر دررفتگی سراسر صفحه لغزش خود را ببیماید، تنها یک



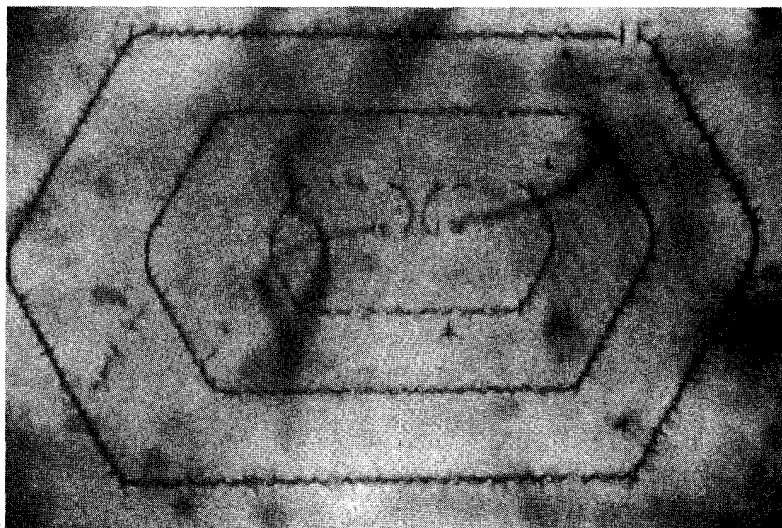
شکل ۱۶. میکرونگاشت الکترونی از حلقه‌های دررفتگی در Al با ۵ درصد Mg که از 550°C فرونشاندن شده است. این حلقه‌ها در نتیجه اجتماع و رمبش تهیجاها تشکیل می‌شوند. دررفتگیهای ماریچی توسط چگالش تهیجاها بر دررفتگیهای پیچی تشکیل می‌شوند. بزرگنمایی آن برابر است با ۴۳۰۰۰.

جابه‌جاسازی به اندازه یک فاصله اتمی ایجاد می‌شود، در حالی که عملاً جابه‌جاسازی به بزرگی 10° تا 1000° فاصله اتمی مشاهده شده‌اند. این بدان معناست که دررفتگیها در خلال تغییر شکل تکثیر می‌شوند. یک حلقه دررفتگی دایره‌ای بسته به شعاع r را در نظر بگیرید که مساحت لغزیده‌ای به همین شعاع را احاطه کرده باشد. سرشت دررفتگی حلقه‌ای، بخشی لبه‌ای، بخشی پیچی، و عمدتاً بینابینی خواهد بود. انرژی کرنشی حلقه متناسب با طول محیط آن افزایش می‌یابد. در نتیجه حلقه در جهت کم کردن اندازه‌اش عمل می‌کند. ولی اگر یک تنش برشی که برای لغزش مطلوب است، وارد شود، حلقه در جهت انبساط عمل خواهد کرد.

ویژگی مشترک همه چشمه‌های دررفتگی، کمانی شدن دررفتگیهاست. قطعه‌ای از دررفتگی را که در دو انتها میخکوب شده‌باشد، چشمه فرانک-رید می‌نامند. این دررفتگی می‌تواند به تولید تعداد زیادی دررفتگی هم‌مرکز (شکل ۱۷) روی تک‌صفحه لغزش منجر شود (شکل ۱۸). سازوکارهای وابسته به



شکل ۱۷. سازوکار فرانک‌رید در تکثیر دررفتگیها. مراحل پی‌درپی تولید حلقه دررفتگی توسط قطعه BC از یک خط دررفتگی نشان داده شده است. این فرایند ممکن است به تعداد نامعین تکرار شود.



شکل ۱۸. چشمه دررفتگی فرانک‌رید در سیلیسیم، که به تنش‌های مس‌تزیین شده و با نورتایی فروسرخ مشاهده شده است. دو حلقه کامل دررفتگی قابل مشاهده‌اند، و حلقه سوم یعنی درونی‌ترین حلقه تقریباً کامل است.

تکثیر دررفتگی، لغزش و افزایش چگالی دررفتگیها را در حین تغییر شکل پلاستیکی به حساب می‌آورند. لغزشهای دوگانه ضربدری متداولترین چشمه‌هایند.

مقاومت آلیاژها

بلورهای خالص بسیار پلاستیکی‌اند، و در تنشهای بسیار کم تسلیم می‌شوند. به نظر می‌رسد که چهار طریق مهم برای افزایش مقاومت تسلیم آلیاژ وجود دارد، تا آلیاژ بتواند در برابر تنشهای برشی‌ای به بزرگی $G-2 \times 10^8$ ایستادگی کند. این طریقهها عبارت‌اند از: ایجاد ممانعت مکانیکی در مقابل حرکت دررفتگیها، میخکوب کردن دررفتگیها با اتمهای حل‌شده، مانع‌شدن از حرکت دررفتگی توسط نظم کوتاه‌برد، و زیاد کردن چگالی دررفتگی تا درهم‌پیچیدگی دررفتگیها حاصل شود. موفقیت هر یک از این چهار سازوکار مقاوم‌ساز به میزان ممانعتشان از حرکت دررفتگیها بستگی دارد. پنجمین سازوکار، یعنی سازوکار از بین بردن تمامی دررفتگیها در بلور، ممکن است در مورد برخی بلورهای نازک به شکل مو (تاره‌ها) که بخش رشد بلور مورد بحث قرار می‌گیرند، عمل کند.

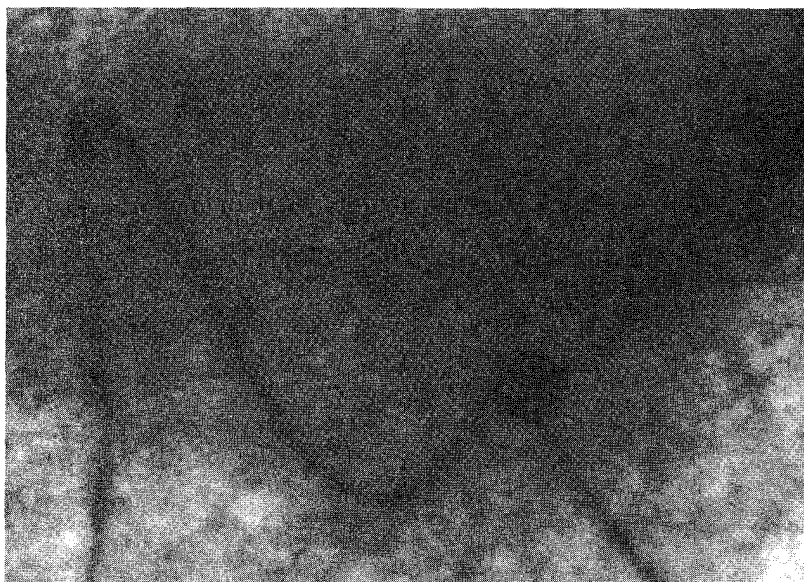
ممانعت مکانیکی را در مقابل حرکت دررفتگیها می‌توان مستقیماً با وارد کردن ذرات بسیار کوچک از فاز دیگر به درون شبکه بلور به‌وجود آورد. این فرایند در سخت کردن فولاد دنیال می‌شود، که در آن کربید آهن در آهن ته‌نشین می‌شود، و در سخت‌کردن آلومینیم، که در آن ذرات Al_2Cu ته‌نشین می‌شوند. میخکوب‌شدن یک دررفتگی به‌وسیله ذرات در شکل ۱۹ نشان داده شده است.

در مقاوم‌سازی از طریق افزودن ذرات کوچک دو مورد را باید در نظر گرفت: یا ذره می‌تواند همراه با میزبان خود تغییر شکل پیدا کند، که این امر ایجاب می‌کند که دررفتگی بتواند از ذره عبور کند، یا آنکه دررفتگی نتواند از ذره عبور کند. از دررفتگی نتواند ذره را قطع کند، تنش لازم برای وارد کردن دررفتگی بین ذره‌هایی که به فاصله L از یکدیگر روی صفحه لغزش قرار دارند، باید تقریباً به‌صورت زیر باشد

$$\sigma/G = b/L \quad (10)$$

هر چه فاصله L کمتر باشد، تنش تسلیم σ بیشتر خواهد بود: پیش از آنکه ذره‌ها ته‌نشین شوند، L زیاد و مقاومت کم است. بلافاصله پس از آنکه ته‌نشینی کامل شد و تعداد زیادی ذره کوچک موجود بود، L کمینه و مقاومت بیشینه می‌شود. اگر پس از آن آلیاژ در دمای بالایی نگه داشته شود، برخی از ذره‌ها با حذف ذره‌های دیگر رشد می‌کنند، در نتیجه L افزایش می‌یابد و مقاومت افت می‌کند. دررفتگیها را نمی‌توان از فازهای بین‌فلزی سخت، نظیر اکسیدهای نسوز عبور داد.

اعتقاد بر آن است که مقاومت محلولهای جامد رقیق در اثر میخکوب شدن دررفتگیها توسط اتمهای حل‌شده حاصل می‌شود. انحلال‌پذیری اتم خارجی در بلور در همسایگی دررفتگی بیش از هر جای دیگر



شکل ۱۹. دررفتگیهایی که در اکسید منیزیم، توسط ذرات میخکوب شده‌اند.

است. اتمی که در جهت انبساط بلور عمل می‌کند، ترجیحاً در ناحیه منبسط‌شده نزدیک به دررفتگی لبه‌ای حل می‌شود. انحلال اتم کوچک ترجیحاً در ناحیه منقبض‌شده نزدیک به دررفتگی اتفاق خواهد افتاد—دررفتگی هم نواحی منبسط‌شده و هم نواحی منقبض‌شده را به وجود می‌آورد.

هر دررفتگی، به دلیل میل اتمهای حاصل‌شده به دررفتگیها، هنگام سرد شدن بلور در زمانی که تحرک اتمهای حل‌شده زیاد است، ابری از اتمهای حل‌شده متناظر را به دور خود جمع می‌کند. در دماهای باز هم پایینتر، پخش اتمهای حل‌شده عملاً متوقف می‌شود، و ابر اتمهای حل‌شده در بلور تثبیت می‌شود. وقتی دررفتگی حرکت می‌کند و ابر حل‌شده‌اش را بر جای می‌گذارد، انرژی بلور باید زیاد شود. این افزایش انرژی را تنها می‌توان با افزایش تنش وارد بر دررفتگی به هنگام دور شدنش از ابر اتمهای حل‌شده فراهم کرد، در نتیجه حضور این ابر بلور را مقاوم می‌سازد.

عبور دررفتگی از میان صفحه لغزش در بلورهای خالص، در این صفحه، پس از رفتن دررفتگی انرژی بستگی را تغییر نمی‌دهد. انرژی داخلی بلور بدون تغییر می‌ماند. این امر در مورد محلولهای جامد کاتوره‌ای نیز صادق است، زیرا این محلولها پس از لغزش همان قدر در سراسر صفحه لغزش کاتوره‌ای باقی می‌مانند. ولی اکثر محلولهای جامد، نظم کوتاه‌برد دارند. گونه‌های متفاوت اتمها در جایگاههای شبکه به‌طور کاتوره‌ای مرتب نمی‌شوند، بلکه ترتیب آنها طوری است که با فزونی یا کاستی زوج اتمهای غیر یکسان

مواجه می‌شویم. بنابراین در آلیاژهای منظم، دررفتگیها زوج زوج حرکت می‌کنند: دررفتگی دوم بی‌نظمی بر جای مانده از دررفتگی اول را دوباره نظم می‌دهد.

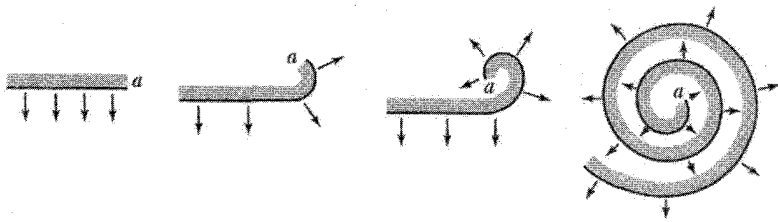
مقاومت ماده بلورین با تغییر شکل پلاستیکی افزایش می‌یابد. این پدیده را سخت‌گردانی کاری یا سخت‌گردانی کرنشی می‌نامند. باور بر آن است که به دلیل افزایش چگالی دررفتگیها و مشکلتر بودن حرکت دررفتگی مفروض روی صفحه لغزشی، که با دررفتگیهای زیاد به بند کشیده شده است، مقاومت زیاد می‌شود. سخت‌گردانی کرنشی به دفعات در مقاوم‌سازی مواد به کار می‌رود، ولی سودمندی آن به دماهای پایین محدود می‌شود؛ دما باید آن قدر پایین باشد که بازپخت رخ ندهد.

یک عامل مهم در سخت‌گردانی کرنشی چگالی کل دررفتگیهاست. دررفتگیها در بیشتر فلزها به سمت تشکیل یاخته‌هایی از نواحی بدون دررفتگی با ابعادی از مرتبه $1 \mu\text{m}$ پیش می‌روند (شکل ۱۵). ولی به دلیل لغزش در نواحی بدون دررفتگی، نمی‌توان فلز را به روش سخت‌گردانی کرنشی تا مقاومت نظری آن مقاوم کرد، مگر آنکه بتوان چگالی یکنواخت بالایی از دررفتگیها به دست آورد. چگالی کل زیاد را از طریق تغییر شکل انفجاری یا توسط عملیات گرمایی-مکانیکی، نظیر عملیات مربوط به مارتنسیت در فولاد، می‌توان به دست آورد.

هر یک از سازوکارهای مقاوم‌ساز بلورها می‌توانند مقاومت تسلیم را به گستره $10^{-3}G$ تا $10^{-2}G$ افزایش دهند. همه این سازوکارها، در دماهایی که پخش بتواند با آهنگ قابل ملاحظه‌ای رخ دهد، شروع به فروریزش می‌کنند. وقتی پخش سریع باشد، ذره‌های ته‌نشین شده حل می‌شوند؛ ابرهای حل شده همراه با دررفتگیهایی که می‌لغزند کشیده می‌شود؛ نظم کوتاه‌برد پشت سر دررفتگیها، که حرکت آهسته دارند، خود را بازسازی می‌کند؛ و صعود دررفتگیها و بازپخت در جهت کاهش چگالی دررفتگی عمل می‌کنند. تغییر شکل وابسته به زمان حاصل را خزش می‌نامند. این حرکت برگشت‌ناپذیر از حد کشسانی فراتر می‌رود. جستجو برای یافتن آلیاژهایی برای استفاده در دماهای بسیار بالا، جستجویی است برای آهنگهای پخش کمتر، به گونه‌ای که چهار سازوکار مقاوم‌سازی کماکان در دماهای بالا باقی بمانند. ولی مسئله اصلی در آلیاژهای قوی مقاومت آنها نیست، بلکه چکش‌خواری آنهاست، زیرا تضعیف در آنها اغلب از طریق شکستگی انجام می‌شود.

دررفتگیها و رشد بلور

در برخی موارد حضور دررفتگیها ممکن است عامل کنترل‌کننده رشد بلور باشد. مشاهده شده است که وقتی بلورها در شرایط فوق‌اشباع رقیق، از مرتبه یک در صد، رشد کنند، آهنگ رشد به مقدار بسیار زیاد سریعتر از آهنگی است که برای بلور ایده‌آل محاسبه شده است. آهنگ واقعی رشد برحسب اثر دررفتگیها روی رشد توجیه می‌شود.

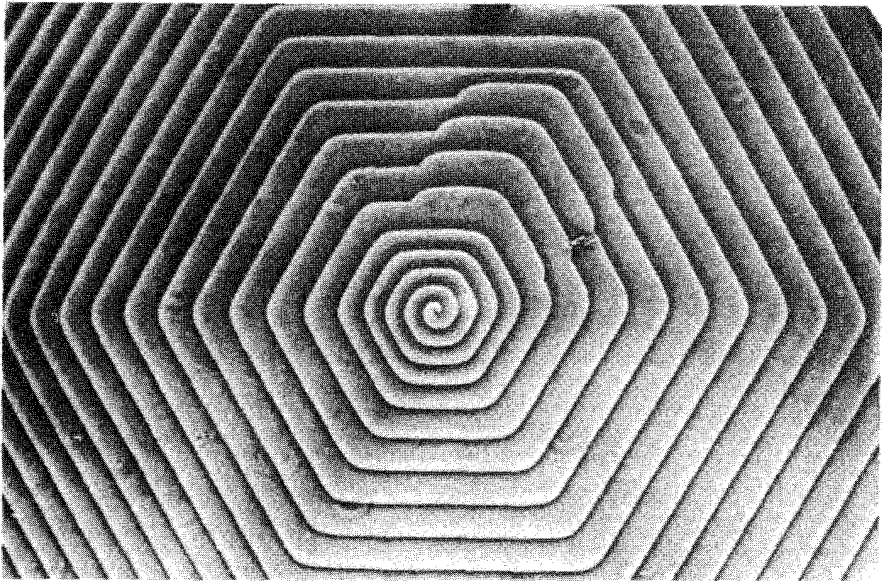


شکل ۲۰. گسترش پله ماریچی، که از تقاطع دررفتگی پیچی با سطح بلور، مانند شکل ۸، ایجاد شده است.

از نظریه رشد بلورهای ایده آل می توان پیش بینی کرد، که در رشد بلور از بخار، یک فوق اشباع (فشار تقسیم بر فشار تعادلی بخار) از مرتبه 10^6 برای هسته بندی بلورهای جدید، از مرتبه 10^5 برای تشکیل قطره های مایع، و از مرتبه 10^{15} برای تشکیل یک تک لایه دوبعدی از مولکولها روی وجه یک بلور کامل لازم است. فولمر^۱ و شولتز^۲ رشد بلورهای ید را در فوق اشباعهای بخار کمتر از یک درصد مشاهده کردند. در این فوق اشباعها آهنگ رشد باید با ضریب $(\exp(-3000))$ کمتر از آهنگی باشد که رشد مشاهده پذیر کمینه تعریف می شود. این ناسازگاری بزرگ، بیانگر دشواری هسته بندی یک تک لایه جدید روی سطح کامل شده بلور ایده آل است. ولی اگر دررفتگی پیچی وجود داشته باشد (شکل ۲۰)، هسته بندی لایه جدید هرگز لازم نیست: بلور در لبه ناپیوستگی نشان داده شده به شیوه ماریچی رشد خواهد کرد. اتم به یک پله قویتر پیوند می خورد تا به یک صفحه. آهنگهای محاسبه شده رشد برای این سازوکار به خوبی با مشاهده سازگارند. انتظار داریم تقریباً همه بلورهای موجود در طبیعت که در فوق اشباع رقیق شده رشد کرده اند، دررفتگی داشته باشند، زیرا در غیر این صورت نمی توانستند رشد کرده باشند. الگوهای رشد ماریچی در شمار زیادی از بلورها مشاهده شده است. مثال زیبایی از الگوی رشد حاصل از تک دررفتگی در شکل ۲۱ ارائه شده است. اگر آهنگ رشد از جهت لبه در صفحه سطح مستقل باشد، الگوی رشد به شکل ماریچ ارشمیدس، $r = a\theta$ خواهد بود که در آن a ثابت است. شعاع انحنای حدی کمینه، در نزدیکی دررفتگی، توسط فوق اشباع تعیین می شود. اگر شعاع انحنای خیلی کوچک باشد، اتمهای واقع بر لبه خمیده تبخیر می شوند تا انحنای تعادلی به دست آید. دور از مبدأ، هر قسمت از پله اتمهای جدید را با آهنگ ثابتی کسب می کند، در نتیجه، ثابت dr/dt .

تارها

مشاهده شده است که بلورهای مویی شکل یا تارها، تحت شرایط فوق اشباع غلیظ، بدون نیاز به بیش از شاید یک دررفتگی رشد می کنند. این امر ممکن است به این دلیل باشد که چنین بلورهایی حاوی یک تک دررفتگی پیچی محوری اند که به رشد اساساً یک بعدی آنها کمک می کند. در نبود دررفتگی، انتظار

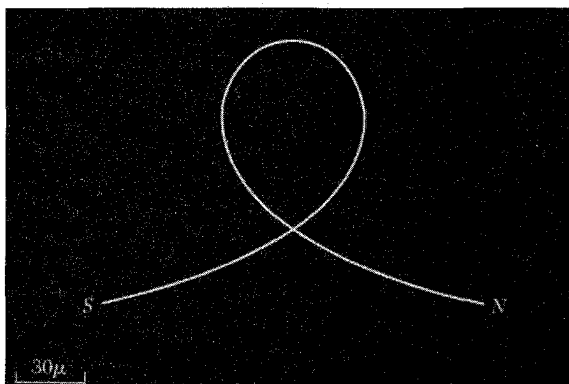


شکل ۲۱. میکرونگاشت تباین فازی از الگوی رشد ماریچی شش‌گوشی روی بلور SiC. ارتفاع پله برابر 165\AA است.

داریم که این تاره‌های بلوری دارای مقاومتهای تسلیم زیادی، از مرتبه مقدار محاسبه شده $G/3^0$ باشند، که قبلاً در این فصل مطرح شد. اگر یک تک دررفتگی پیچی محوری موجود باشد، نمی‌تواند باعث تسلیم شود، زیرا این دررفتگی در اثر خم کردن بلور دستخوش تنش برشی موازی با بردار برگرز خود نمی‌شود. یعنی، این تنش در جهتی نیست که بتواند لغزش ایجاد کند. هرینگ^۱ و گالت^۲ تاره‌هایی از قلع با شعاع تقریبی 10^{-4} cm مشاهده کردند، که ویژگیهای کشسانی‌شان نزدیک به ویژگیهایی بود که از بلورهای کامل نظری انتظار می‌رفت. آنها کرنشهای تسلیمی از مرتبه 10^{-2} متناظر با تنشهای برشی از مرتبه 10^{-2} مشاهده کردند، که حدود 10^6 مرتبه از کرنش تسلیم در قلع حجیم بیشتر است. این امر برآوردهای اولیه را در مورد مقاومت بلورهای کامل تأیید می‌کند. ویژگیهای کشسانی نظری یا ایده‌آل در تعدادی از مواد از جمله نانولوله‌های کربنی مشاهده شده‌اند. یک تاره تک‌حوزه‌ای از نیکل در شکل ۲۲ نشان داده شده است.

سختی مواد

سختی مواد به چند روش اندازه‌گیری می‌شود، ساده‌ترین آزمون برای غیرفلزها آزمون خراش است. اگر ماده A ماده B را بخراشد، ولی B نتواند A را بخراشد، A سخت‌تر از B است. از یک مقیاس استاندارد برای



شکل ۲۲. تاره نیکل به قطر 1000 \AA که به شکل حلقه خم شده است.

کانیهای نمونه استفاده می‌شود، که در آن به الماس که سخت‌ترین است مقدار 10° و به طلق که نرم‌ترین است مقدار یک نسبت داده می‌شود:

۵ آپاتیت $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{F}$	۱۰ الماس C
۴ فلوریت CaF_2	۹ کوروندوم (سنگ سنباده) Al_2O_3
۳ کلسیت CaCO_3	۸ توپاز (یاقوت زرد) $\text{Al}_2\text{SiO}_5\text{F}_2$
۲ ژیس (سنگ گچ) $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	۷ کوارتز SiO_2
۱ تالک (طلق) $3\text{MgO} \cdot 4\text{SiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	۶ اورتوکلاز KAlSi_3O_8

تولیدی موادی با سختی زیاد، برای مثال به صورت فیلمهایی برای استفاده به صورت پوشش مقاوم در برابر خراش عدسیها، در حال حاضر بسیار مورد توجه است. عموماً بر این عقیده‌اند که مقیاس بین الماس و کوروندوم (سنگ سنباده) گمراه‌کننده است، زیرا الماس بسیار سخت‌تر از کوروندوم است. پیشنهاد شده است که به الماس سختی ۱۵ نسبت داده شود و گاف بین ۹ و ۱۵ سرانجام با مواد مصنوعی، نظیر ترکیبهای C و B پر شود.

مقیاسهای نوین سختی، نظیر مقیاس VHN^۱، بر اساس آزمونهای دندانهای زنی تهیه می‌شوند که در آنها یک دندان زنی بر سطح ماده فشرده می‌شود، و اندازه فرورفتگی اندازه‌گیری می‌شود. اعداد سختی ویکرز مربوط به برخی مواد برگزیده در جدول زیر داده شده‌اند. این اعداد را ای. آر. ویر^۲ به واحد $\text{GPa} [\text{GN/m}^2]$ تبدیل کرده است:

۷,۰۱	BeO	۴۵,۳	الماس
۴,۵۹	فولاد (آبدیده)	۲۰,۰	SiC
۰,۲۵	Cu (بازپخته)	۱۸,۵	Si _۳ N _۴
۰,۱۲	Al (بازپخته)	۱۴,۰	Al _۲ O _۳
۰,۳۲	Pb	۱۳,۵	B
		۱۱,۳	WC

مسائل

۱. خطهای با تنگترین چین. نشان دهید که خطهای با تنگترین چین اتمی در ساختارهای fcc و bcc، به ترتیب، عبارت‌اند از $\langle ۱۱۰ \rangle$ و $\langle ۱۱۱ \rangle$.
۲. زوجهای دررفتگی. (الف) زوجی از دررفتگیها بیابید که معادل با یک ردیف تهیجای شبکه باشد. (ب) زوجی از دررفتگیها بیابید که معادل با یک ردیف اتم بین جایگاهی باشد.
۳. نیروی وارد بر دررفتگی. بلوری به شکل مکعب به ضلع L در نظر بگیرید که حاوی یک دررفتگی لبه‌ای با بردار برگرز b باشد. اگر بلور دستخوش تنش برشی σ بر وجوه بالایی و پایینی در جهت لغزش گردد، با در نظر گرفتن موازنه انرژی، نشان دهید که نیروی وارد بر دررفتگی به‌ازای واحد طول برابر است با $F = b\sigma$.

ملاحظات کلی

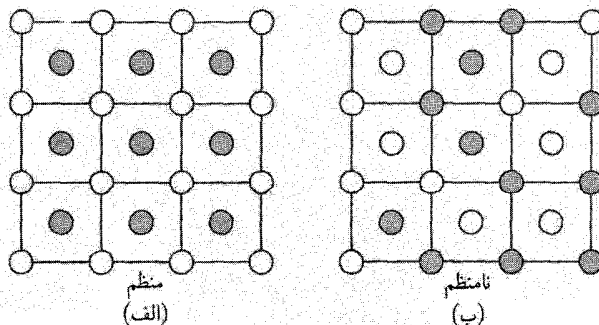
در نظریه ساختار نواری جامدات فرض می‌شود که بلور دارای ناوردایی انتقالی است. ولی فرض کنید بلور از دو عنصر A و B تشکیل شده باشد، که به طور کاتوره‌ای جایگاه‌های شبکه منظم ساختار را به نسبت‌های x و $1-x$ در ترکیب $A_x B_{1-x}$ اشغال کرده‌اند. در اینجا دیگر تقارن انتقالی کامل وجود ندارد. آیا در این صورت پیامدهای نظریه نواری، مثل وجود سطوح فرعی و گافهای انرژی از بین می‌روند؟ آیا عایقها به دلیل اینکه گاف انرژی از بین رفته است رسانا می‌شوند؟ در بحث نیمرساناهای بی‌شکل در فصل ۱۹ اندکی به چنین سؤالی‌هایی پرداختیم. آزمایش و نظریه با هم در این مطلب سازگارند که پیامدهای تخریب تقارن انتقالی کامل (تقریباً همیشه) آنقدرها جدی نیست که در برداشت اول انتظار می‌رود. دیدگاه فصل ۹ در مورد پتانسیل مؤثر استتار شده، در مبحث مورد نظر نیز سودمند است. نخست به این دلیل که پتانسیلهای مؤثر در مقایسه با پتانسیل یون آزاد نسبتاً ضعیفترند، دوم و مهمتر آنکه اختلاف بین پتانسیلهای مؤثر اتم میزبان و اتم افزودنی در مقایسه

با پتانسیل هریک از آنها به تنهایی بسیار ضعیفتر است. آلیاژهای Si و Ge یا مس و نقره نمونه‌های کلاسیک این ویژگی‌اند که می‌توان آن‌را ناکارآمدی نسبی آلیاژسازی نامید.

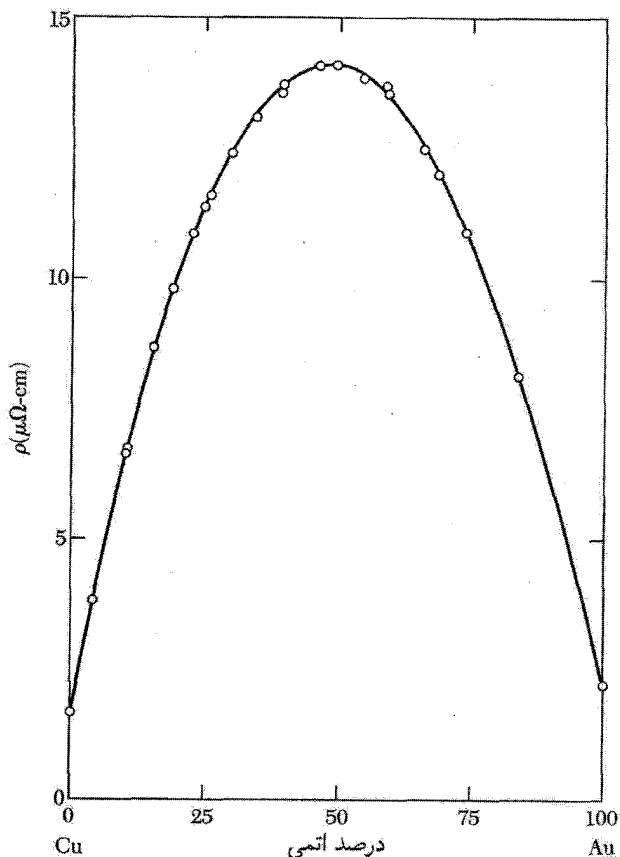
به هر حال، غلظت پایین اتمهای ناخالصی نمی‌تواند بر مؤلفه‌های فوریه، U_G ، پتانسیل مؤثر $U(\mathbf{r})$ که باعث ایجاد گافهای نواری و شکل سطح فرمی است، تأثیر چندانی بگذارد. (این گزاره نشان‌دهنده وجود G هاست، که خود بر وجود یک شبکه منظم دلالت دارد. این فرض مهمی نیست، زیرا می‌دانیم که فونونهای گرمایی آثار عمده‌ای بر ساختار نواری نداشته، طوری که واپیچشهای شبکه‌ای که به نام فونونهای یخ‌زده توصیف شدند، نباید آثار مهمی داشته باشند. اگر واپیچشها، جدیتر باشند، مثل جامدهای بی‌شکل، تغییرات ساختار الکترونیکی مهمتری می‌تواند رخ دهد.)

این درست است که اتم ناخالصی مؤلفه‌های فوریه $U(\mathbf{r})$ در بردار موجهایی ایجاد می‌کند که بردارهای شبکه وارون نیستند، ولی با استفاده از مبحث آماری پتانسیلهای کاتوره‌ای در غلظت ناخالصی کم چین مؤلفه‌هایی در مقایسه با U_G هرگز بزرگ نیستند. مؤلفه‌های فوریه در بردارهای شبکه وارون G کماکان بزرگ‌اند و منجر به گافهای نواری، سطوح فرمی، و خطوط تیز پراش پرتو x مشخصه شبکه منظم خواهند شد. پیامدهای آلیاژسازی به‌ویژه وقتی عنصر ناخالصی و عنصر میزبان که به جایش می‌نشینند هر دو متعلق به یک ستون از جدول دوره‌ای باشند، کوچک خواهند بود، زیرا مغزهای اتمی، سهمهای تقریباً مشابهی در پتانسیلهای مؤثر خواهند داشت.

مقاومت ویژه باقیمانده که حد دمای پایین مقاومت ویژه تعریف می‌شود، مقیاسی از اثر آلیاژسازی است. در اینجا باید آلیاژهای بی‌نظم و بانظم را از یکدیگر تمیز داد. آلیاژی بی‌نظم است که در آن ترتیب اتمهای A و B برای مقدار کلی x در ترکیب $A_x B_{1-x}$ کاتوره‌ای باشد. برای مقادیر خاص x ، مثل $\frac{1}{4}$ ، $\frac{1}{2}$ ، و $\frac{3}{4}$ ، در ساختار مکعبی، امکان تشکیل فازهای منظمی وجود دارد، که در آنها اتمهای A و B در آرایه منظمی تشکیل می‌دهند. تشخیص نظم از بی‌نظمی در شکل ۱ نشان داده شده است. اثر نظم بر



شکل ۱. ترتیب (الف) منظم و (ب) نامنظم یونهای A و B در آلیاژ AB .

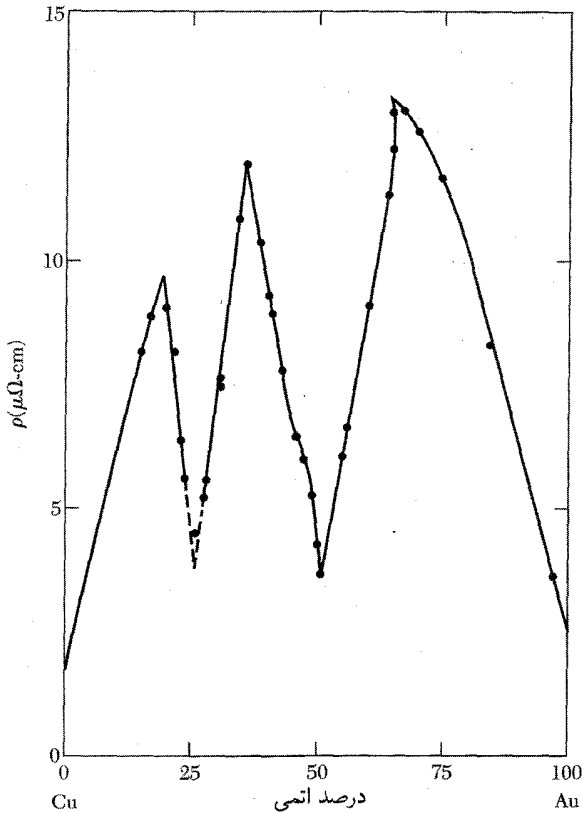


شکل ۲. مقاومت ویژه آلیاژ نامنظم دوتایی مس و طلا. تغییر مقاومت ویژه باقیمانده به ترکیب $\text{Cu}_x\text{Au}_{1-x}$ به صورت $x(1-x)$ بستگی دارد، که به قاعده نورهیم^۱ در آلیاژ نامنظم معروف است. در اینجا $x(1-x)$ مقیاس از درجه بی‌نظمی بیشینه ممکن برای مقدار معین x است.

مقاومت ویژه الکتریکی در شکل‌های ۲ و ۳ نشان داده شده است. مقاومت ویژه باقیمانده همان‌طور که در فصل ۱۹ برای مواد بی‌شکل بحث شد، با بی‌نظمی افزایش می‌یابد. این اثر در شکل ۲ برای دستگاه آلیاژی Cu-Au نشان داده شده است. وقتی نمونه‌ای به آرامی از دمای بالا سرد می‌شود، در Cu_3Au و CuAu ساختارهای منظمی به وجود می‌آید، این ساختارها به خاطر نظمشان از مقاومت ویژه باقیمانده کمتری برخوردارند (شکل ۳).

بدین ترتیب می‌توان از مقاومت الکتریکی باقیمانده به عنوان مقیاسی از اثر آلیاژسازی در ساختار

1. Nordheim's Rule



شکل ۳. اثر فازهای منظم بر مقاومت ویژه الکتریکی آلیاژ دوتایی $\text{Cu}_x\text{Au}_{1-x}$. این آلیاژها بازپخت شده‌اند، درحالی‌که آلیاژهای شکل ۲ فرونشانی (سرد کردن سریع) شده‌اند. ترکیبات با مقاومت ویژه الکتریکی کم به ترکیبات منظم CuAu و Cu_3Au مربوط‌اند.

نامنظم استفاده کرد. افزایش هر یک درصد اتمهای مس حل‌شده در نقره (که هر دو در یک ستون جدول دوره‌ای قرار دارند) باعث افزایش 77°C میکرواهم-سانتیمتر در مقاومت ویژه باقیمانده می‌شود. این مربوط به یک سطح مقطع پراکندگی هندسی است که تنها ۳ درصد از «مساحت تصویری» خام اتم ناخالصی را دربر دارد، در نتیجه اثر پراکندگی بسیار اندک است.

در عایقها شواهد تجربی برای کاهش قابل ملاحظه گاف نواری، که از مؤلفه‌های پتانسیل کاتوره‌ای به‌وجود می‌آید، وجود ندارد. برای مثال، سیلیسیم و ژرمانیم تشکیل محلولهای جامد همگن، به‌نام آلیاژهای جانشرانی، در تمامی گستره درصد ترکیب می‌دهند، ولی انرژیهای لبه نواری پیوسته از ترکیب گاف Si خالص تا گاف Ge خالص تغییر می‌کند.

باور عموم بر آن است که در مواد بی شکل چگالی حالتها، به دلیل نبود آشکار تقارن انتقالی، نزدیک لبه‌های نوار پهن می‌شود. برخی از این حالت‌های جدید که بدین‌سان در داخل گاف تشکیل می‌شوند، الزاماً حالت‌های حامل جریان نیستند، زیرا ممکن است در سرتاسر بلور گسترش نداشته باشند.

محلولهای جامد جانشانی شده - قواعد هیوم-روتري

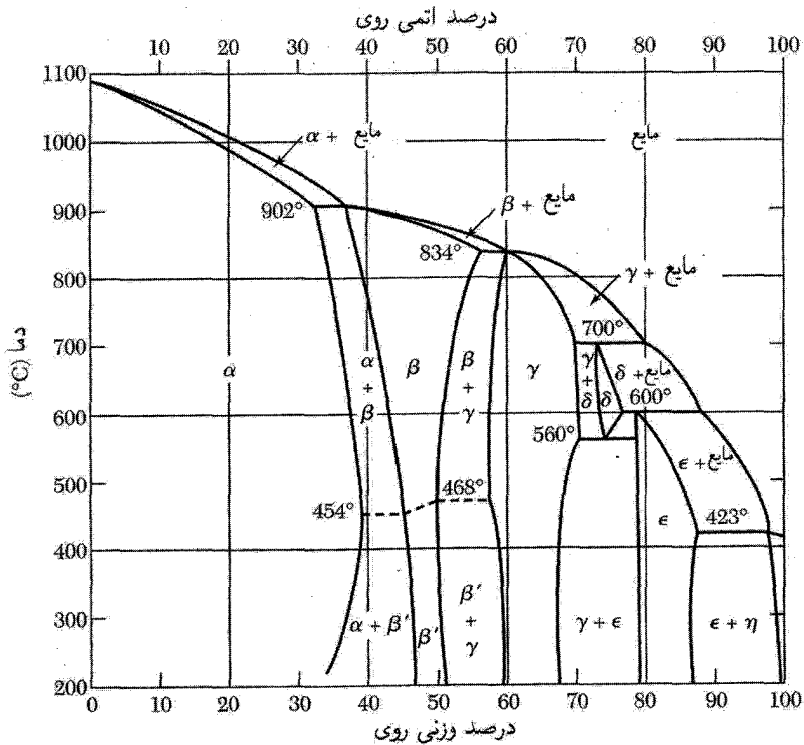
اکنون محلولهای جامد جانشانی شده از فلز A را در فلز دیگر B با ظرفیت مختلف، که در آن A و B جایگاه‌های معادلی را به صورت ذاتوره‌ای در این ساختار اشغال می‌کنند مورد بحث قرار می‌دهیم. هیوم و روتري در بایستهایی نیمه تجربی برای پایداری محلول جامدی از A و B به صورت یک تک دست‌گاه فازی بررسی کردند. یک در بایست آن است که قطره‌های اتمی با یکدیگر سازگار باشند، یعنی اختلاف آنها نباید بیشتر از ۱۵ درصد باشد. برای مثال قطرها در دست‌گاه آلیاژی $(2.65\text{\AA})\text{Zn} - (2.55\text{\AA})\text{Cu}$ مطلوب‌اند: روی در مس به صورت محلول جامد fcc تا ۳۸ درصد اتمی روی حل می‌شود. قطرها در دست‌گاه $(2.97\text{\AA})\text{Cd} - (2.55\text{\AA})\text{Cu}$ کمتر مطلوب‌اند، در اینجا تنها ۱۷ درصد اتمی کادمیم در مس حل‌پذیر است. قطره‌های اتمی نسبت به مس عبارت‌اند از 1.4° برای روی و 1.65° برای کادمیم.

حتی اگر قطره‌های اتمی مطلوب باشند، وقتی تمایل شیمیایی برای A و B در تشکیل «ترکیبات بین فلزی» قوی باشد، محلول جامد تشکیل نمی‌شود. ترکیبات فلزی ترکیباتی با ویژگی‌های خاص‌اند. اگر A قویاً الکترومنفی و B قویاً الکترومثبت باشد، ترکیباتی چون AB و A_2B ممکن است از محلول جامد رسوب کنند. (این وضعیت با تشکیل فاز آلیاژی منظم تنها از این نظر تفاوت دارد که پیوند شیمیایی در ترکیبات بین فلزی قویتر است.) گرچه نسبت قطره‌های اتمی برای As در $(1.2^\circ)\text{Cu}$ مطلوب است، تنها ۶ درصد اتمی As حل‌پذیر است. نسبت قطر نیز برای Sb در $(1.6^\circ)\text{Mg}$ مطلوب است، معذالک حلالیت Sb در Mg بسیار اندک است.

ساختار الکترونی آلیاژها را اغلب می‌توان با تعداد میانگین الکترونهاى رسانش (یا الکترونهاى ظرفیتی) به‌ازای هر اتم، که با n نشان داده می‌شود، توصیف کرد. در آلیاژ CuZn مقدار n برابر با 1.5° در CuAl و 2.0° است. تغییرات در غلظت الکترون تعیین‌کننده تغییرات ساختاری در بسیاری از دست‌گاه‌های آلیاژی است.

نمودار فازی دست‌گاه مس-روی در شکل ۴ نشان داده شده است.^۱ ساختار fcc مس خالص ($n = 1$) با افزودن روی ($n = 2$) همچنان باقی می‌ماند، تا اینکه غلظت الکترونی به 1.38 برسد.

۱. فلزشناسان فازهای مورد نظر را معمولاً با حروف یونانی نشان می‌دهند: در دست‌گاه Cu-Zn ، α (fcc)، β (bcc)، γ (یاخته مکعبی پیچیده با ۵۲ اتم)، ϵ (hcp)، و η (hcp): ϵ و η از نظر نسبت c/a بسیار متفاوت‌اند. مفهوم این حروف در دست‌گاه‌های آلیاژی متفاوت یکسان نیست.



شکل ۴. نمودار تعادلی فازها در دستگاه آلیاژ مس-روی. فاز α ، fcc است؛ فازهای β ، β' و bcc است؛ فاز α ساختار پیچیده‌ای است؛ فازهای ϵ و η هر دو hcp اند، ولی نسبت c/a برای ϵ نزدیک به ۱٫۵۶ است و η (برای روی خالص) دارای $c/a = ۱٫۸۶$ است. فاز β' ، bcc منظم است، به این معنی که اکثر اتمهای Zn جایگاههای واقع بر زیرشبکه Sc را اشغال می‌کنند و اکثر اتمهای Zn جایگاههای واقع بر زیرشبکه Sc دیگر را که در زیرشبکه اول نفوذ می‌کند، اشغال می‌کنند. فاز β ، bcc نامنظم است: احتمال اینکه هر جایگاه با اتم Cu یا Zn اشغال شود یکسان است، این امر تقریباً به اینکه چه اتمهایی در جایگاههای همسایه قرار گرفته‌اند، بستگی ندارد.

ساختار bcc در غلظت الکترونی کمینه‌ای در حدود ۱٫۴۸ رخ می‌دهد. فاز γ در گستره تقریبی n بین ۱٫۵۸ تا ۱٫۶۶ وجود دارد، و فاز hcp ϵ در نزدیکی ۱٫۷۵ رخ می‌دهد.

واژه ترکیب الکترونی نشانگر یک فاز میانی (چون فاز β ی CuZn) است که ساختار بلوری آن با یک نسبت کاملاً معلوم الکترون به اتم تعیین می‌شود. در بسیاری از آلیاژها این نسبت به قواعد هیوم-روتری نزدیک است: $۱٫۵^\circ$ برای فاز β ، $۱٫۶۲$ برای فاز γ ، و $۱٫۷۵$ برای فاز ϵ . مقادیر تجربی نمونه در جدول ۱، بر مبنای ظرفیت معمول شیمیایی ۱ برای Cu و Ag؛ ۲ برای Zn و Cd؛ ۳ برای Al و Ga؛ ۴ برای Si و Ge؛ و Sn جمع‌آوری شده‌اند.

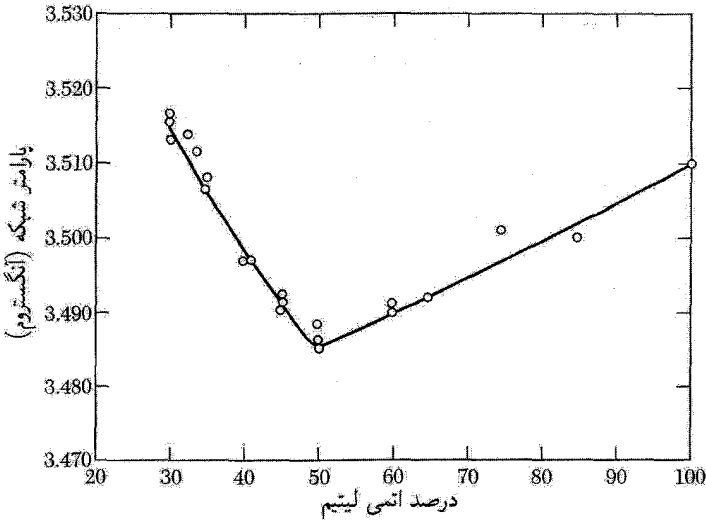
جدول ۱. نسبتهای الکترون به اتم در ترکیبهای الکترونی

مرزهای فاز hcp	مرزهای فاز γ	کمینه مرز فاز bcc	مرز فاز fcc	آلیاژ
۱٫۷۸-۱٫۸۷	۱٫۵۸-۱٫۶۶	۱٫۴۸	۱٫۳۸	Cu-Zn
	۱٫۶۳-۱٫۷۷	۱٫۴۸	۱٫۴۱	Cu-Al
			۱٫۴۱	Cu-Ga
		۱٫۴۹	۱٫۴۲	Cu-Si
			۱٫۳۶	Cu-Ge
۱٫۷۳-۱٫۷۵	۱٫۶۰-۱٫۶۳	۱٫۴۹	۱٫۲۷	Cu-Sn
۱٫۶۷-۱٫۹۰	۱٫۵۸-۱٫۶۳		۱٫۳۸	Ag-Zn
۱٫۶۵-۱٫۸۲	۱٫۵۹-۱٫۶۳	۱٫۵۰	۱٫۴۲	Ag-Cd
۱٫۵۵-۱٫۸۰			۱٫۴۱	Ag-Al

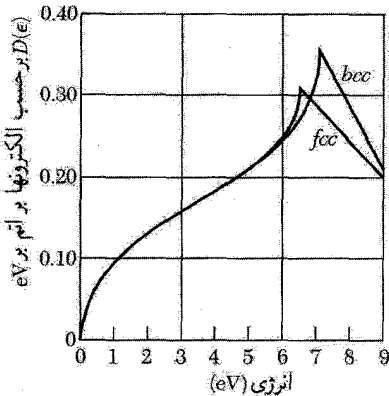
برای قواعد هیوم-روتیری می توان توضیح ساده ای برحسب نظریه نواری الکترون تقریباً آزاد پیدا کرد. حد مشاهده شده فاز fcc در نزدیکی غلظت الکترونی ۱٫۳۶ رخ می دهد که در آن کره فرمی محاطی با مرز منطقه بریلوئن در شبکه fcc تماس برقرار می کند. غلظت الکترونی مشاهده شده فاز bcc نزدیک به ۱٫۴۸ است که در آن کره فرمی محاطی با مرز منطقه در شبکه bcc تماس برقرار می کند. تماس کره فرمی با مرز منطقه برای فاز γ در غلظت ۱٫۵۴ برقرار می شود. تماس برای فاز hcp با نسبت c/a ایده آل در غلظت ۱٫۶۹ برقرار می شود.

چرا بین غلظت الکترونی ای که در آن یک فاز جدید پدیدار می شود و غلظت الکترونی ای که در آن سطح فرمی با مرز منطقه بریلوئن تماس پیدا می کند ارتباط وجود دارد؟ یادآور می شود که نوارهای انرژی در ناحیه تماس بر مرز منطقه (فصل ۹) به دو شاخه تقسیم می شوند. اگر در این مرحله الکترونهای بیشتری به آلیاژ افزوده شود، باید در نوار بالاتر یا در حالتی با انرژی زیاد در نوار پایین نزدیک به گوشه های منطقه جای گیرند. هر دو انتخاب امکان پذیر است، و هر دو متضمن افزایش انرژی اند. بنابراین ممکن است از لحاظ انرژی مطلوب باشد که ساختار بلور به ساختاری تغییر کند، که قبل از تماس، سطح فرمی بزرگتری (الکترونهای بیشتر) را در برگیرد. در این راستا جوتز^۱ توالی ساختار fcc، bcc، γ و hcp را همراه با افزایش غلظت الکترون توجیه کرد.

اندازه گیریهای پارامتر شبکه آلیاژهای Li-Mg در شکل ۵ نشان داده شده است. ساختار در گستره نشان داده شده bcc است. شبکه در مراحل اولیه افزودن Mg به Li منقبض می شود. وقتی مقدار لیتیم به



شکل ۵. پارامترهای شبکه آلیاژهای منیزیم-تیتیم مکعبی میان جسمی.



شکل ۶. تعداد اوربیتالها در واحد گستره انرژی برای اولین منطقه بریلوئن شبکه‌های fcc و bcc برحسب تابعی از انرژی.

زیر ۵۰ درصد اتمی، متناظر با غلظت الکترونی میانگین بالاتر از ۱٫۵ به ازای هر اتم، افت می‌کند، شبکه شروع به انبساط می‌کند. برای آنکه سطح فرمی کروی در شبکه bcc در تماس با مرز منطقه باشد، دیده‌ایم که $n = ۱٫۴۸$ الکترون به ازای هر اتم است. نتیجه می‌شود که انبساط شبکه از شروع همپوشانی در امتداد مرز منطقه ناشی می‌شود.

تبدیل از fcc به bcc در شکل ۶ نمایش داده شده است؛ این شکل تعداد اوربیتالها را در واحد گستره انرژی برحسب تابعی از انرژی در ساختارهای fcc و bcc نشان می‌دهد. وقتی تعداد الکترونها افزایش

می‌یابد، به نقطه‌ای می‌رسیم که در آن جای دادن الکترونهاى اضافی در منطقه بریلوئن شبکه bcc نسبتاً آسانتر از منطقه بریلوئن شبکه fcc است. این شکل برای مس ترسیم شده است.

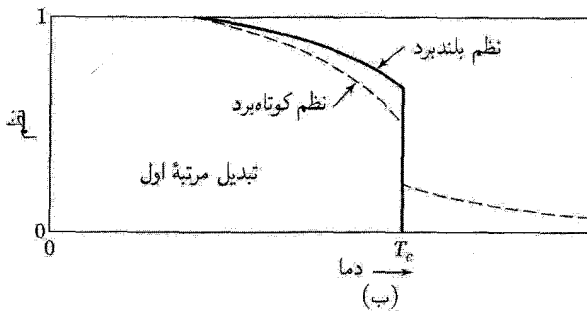
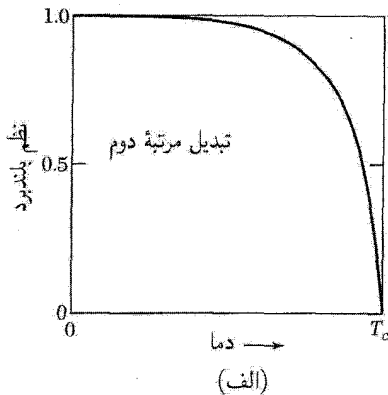
تبدیل بانظم-بی نظم

خط افقی نقطه چین در ناحیه فاز بتا (bcc) در نمودار دستگاه فازی Cu-Zn (شکل ۴) نمایشگر دمای گذار بین حالت‌های منظم (دمای پایین) و نامنظم (دمای بالای) آلیاژ است. در ترتیب منظم متداول یک آلیاژ AB با ساختار bcc، همه اتم‌های همسایه اول اتم B اتم‌های A خواهند بود، و برعکس. این ترتیب هنگامی حاصل می‌شود که برهم‌کنش غالب در میان اتم‌های A و B جاذبه باشد. (اگر برهم‌کنش AB به‌طور ضعیفی جاذبه یا دافعه باشد، یک دستگاه دوفازی تشکیل می‌شود، که در آن برخی از بلورها عمدتاً از نوع A و سایر بلورها عمدتاً از نوع B اند.)

این آلیاژ در صفر مطلق کاملاً منظم است. با افزایش دما دارای نظم کمتری می‌شود، تا اینکه به دمای گذاری می‌رسد که بالاتر از آن ساختار آلیاژ نامنظم می‌شود. دمای گذار از بین رفتن نظم بلندبرد را نشان می‌دهد که این نظم در فواصل بین اتمی بی‌شماری برقرار است. ولی در بالای دمای گذار یک نظم کوتاه‌برد یا همبستگی بین همسایه‌های نزدیک باقی می‌ماند. نظم بلندبرد در آلیاژ AB در شکل ۷ (الف) نشان داده شده است. نظم بلندبرد و کوتاه‌برد در آلیاژی با ترکیب AB₃ در شکل ۷ (ب) نشان داده شده است. درجه نظم بعداً تعریف می‌شود.

اگر آلیاژی از دماهای بالا سریعاً تا دمایی در زیر دمای گذار سرد شود، ممکن است وضع شبه‌پایداری به‌وجود آید که در آن بی‌نظمی غیرتعادلی در ساختار منجمد می‌شود. اثر معکوس هنگامی رخ می‌دهد که در دمای ثابت با تاباندن شدید ذرات هسته‌ای، یک نمونه منظم به‌صورت نامنظم درآید. درجه نظم را می‌توان با استفاده از پراش پرتو x به‌طور تجربی بررسی کرد. از آنجا که توان پراکندگی مؤثر هر صفحه برابر با میانگین توانهای پراکندگی A و B است، ساختار نامنظم در شکل ۸ در همان موقعیتهایی دارای خطوط پراش است که گویی این نقاط همگی فقط با یک نوع اتم اشغال شده باشند. ساختار منظم دارای خطوط پراش اضافی‌ای است که به ساختار نامنظم تعلق ندارد. این خطوط اضافی را خطوط ابرساختاری می‌نامند. استفاده از واژه‌های نظم-بی‌نظم در این فصل همواره مربوط به جایگاه‌های شبکه‌ای مرتب است؛ اشغال به‌طور کاتوره‌ای توسط اتم‌های A یا B صورت می‌گیرد. این کاربرد را با کاربرد مربوط به جامدات نانوبلورین در فصل ۱۹ اشتباه نکنید. زیرا در آنجا جایگاه‌های شبکه‌ای منظم وجود ندارد و خود ساختار کاتوره‌ای است. هر دو امکان در طبیعت رخ می‌دهد.

ساختار آلیاژ منظم CuZn به‌صورت ساختار سزیم کلرید است (فصل ۱). شبکه فضایی آن مکعبی



شکل ۷. (الف) نظم بلندی برحسب دما در آلیاژ AB_2 . این گذار از مرتبه دوم است. (ب) نظم بلندی و کوتاه برد در آلیاژ AB_3 . تبدیل مربوط به این ترکیب از مرتبه اول است.

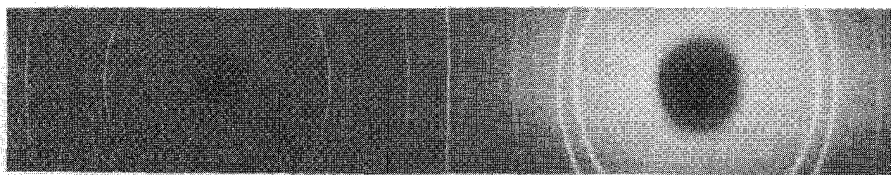
ساده و پایه اش دارای یک اتم Cu در 000° و یک اتم Zn در $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ است. عامل ساختار پراش چنین است

$$S(hkl) = f_{Cu} + f_{Zn} e^{-i\pi(h+k+l)} \quad (1)$$

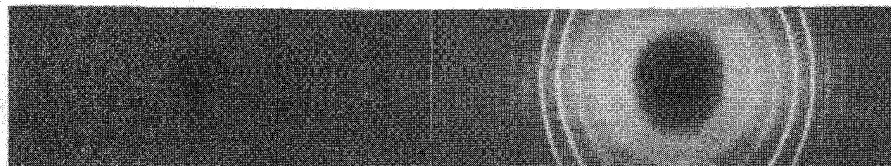
این عامل نمی تواند صفر شود، زیرا $f_{Cu} \neq f_{Zn}$ ؛ بنابراین همه بازتابهای شبکه فضایی مکعبی ساده رخ خواهند داد. در ساختار نامنظم وضعیت متفاوت است. احتمال اینکه پایه در 000° یا Zn یا Cu و نیز در $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ یا Zn داشته باشد یکسان است. در این صورت عامل ساختار متوسط چنین است

$$\langle S(hkl) \rangle = \langle f \rangle + \langle f \rangle e^{-i\pi(h+k+l)} \quad (2)$$

که در آن $\langle f \rangle = \frac{1}{4}(f_{Cu} + f_{Zn})$. معادله (۲) دقیقاً به شکل نتیجه حاصل از شبکه bcc است؛ وقتی $h+k+l$ فرد باشد، بازتابها محو می شوند. می بینیم که شبکه منظم دارای بازتابهایی (خطوط ابرساختاری) است که در شبکه نامنظم موجود نیستند (شکل ۸).



(الف)



(ب)

شکل ۸. عکسهای حاصل از پراش پودری پرتو x در آلیاژ $AuCu_3$ که در (الف) با سرد کردن سریع از $T > T_c$ نامنظم و در (ب) با بازپخت در $T < T_c$ منظم شده است.

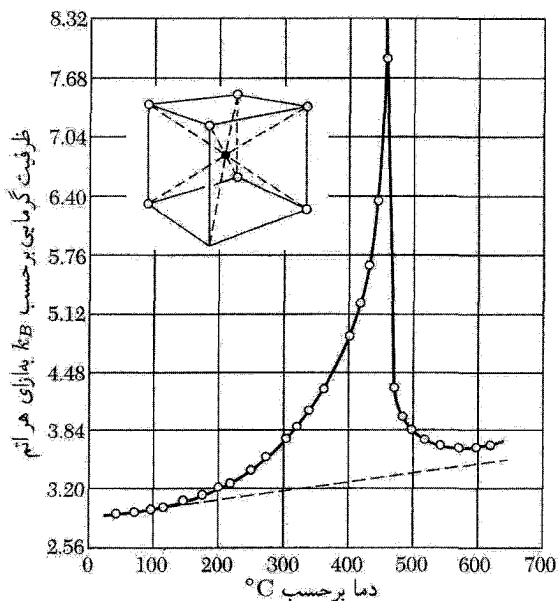
نظریه مقدماتی نظم

روش آماری ساده‌ای را در مورد وابستگی نظم به دما برای آلیاژ AB با ساختار bcc ارائه می‌کنیم. مورد A_3B با AB متفاوت است. A_3B دارای گذار مرتبه اول است که با گرمای نهان مشخص می‌شود و AB دارای گذار مرتبه دوم است که با ناپوستگی در ظرفیت گرمایی مشخص می‌شود (شکل ۹). مقیاسی را برای نظم بلندبرد معرفی می‌کنیم. یک شبکه مکعبی ساده را a و دیگری را b می‌نامیم: ساختار bcc از دو شبکه sc تشکیل می‌شود، که در هم نفوذ می‌کنند، و همسایه‌های اول یک اتم در یکی از این شبکه‌ها روی شبکه دیگر قرار می‌گیرند. اگر در این آلیاژ N اتم A و N اتم B وجود داشته باشند. پارامتر نظم بلندبرد، P ، طوری تعریف می‌شود که تعداد اتمهای A روی شبکه a برابر با $\frac{1}{4}(1+P)N$ باشد. تعداد اتمهای A روی شبکه b برابر با $\frac{1}{4}(1-P)N$ است. وقتی $P = \pm 1$ ، نظم کامل است و هر شبکه فقط یک نوع اتم را دربر دارد. هنگامی که $P = 0$ ، هر شبکه تعدادی مساوی از اتمهای A و B را دربر دارد و هیچ نظم بلندبردی وجود ندارد. آن بخش از انرژی داخلی را در نظر می‌گیریم، که به انرژی پیوندهای AA ، AB ، و BB بین زوجهای همسایه اول مربوط است. انرژی کل پیوندها برابر است با

$$E = N_{AA}U_{AA} + N_{BB}U_{BB} + N_{AB}U_{AB} \quad (3)$$

که در آن N_{ij} تعداد پیوندهای ij بین همسایه‌های اول و U_{ij} انرژی پیوند ij است.

احتمال اینکه اتم A واقع بر شبکه a دارای پیوند AA باشد برابر است با احتمال اینکه A یک جایگاه ویژه همسایه اول واقع بر b را اشغال کند ضربدر تعداد جایگاههای همسایه اول، که در ساختار bcc برابر



شکل ۹. ظرفیت گرمایی برحسب دما در مورد آلیاژ CuZn (برنج β).

است با ۸. فرض می‌کنیم احتمالها مستقل باشند. بنابراین، با استفاده از عبارتهای قبلی در مورد تعداد اتمهای A واقع بر a و b ، داریم

$$N_{AA} = 8 \left[\frac{1}{4} (\nu + P) N \right] \left[\frac{1}{4} (\nu - P) \right] = 2(\nu - P^2) N;$$

$$N_{BB} = 8 \left[\frac{1}{4} (\nu + P) N \right] \left[\frac{1}{4} (\nu - P) \right] = 2(\nu - P^2) N;$$

$$N_{AB} = 8N \left[\frac{1}{4} (\nu + P) \right]^2 + 8N \left[\frac{1}{4} (\nu - P) \right]^2 = 4(\nu + P^2) N \quad (۴)$$

انرژی رابطه (۳) چنین می‌شود

$$E = E_0 + 2NP^2U \quad (۵)$$

که در آن

$$E_0 = 2N(U_{AA} + U_{BB} + 2U_{AB}); \quad U = 2U_{AB} - U_{AA} - U_{BB} \quad (۶)$$

اکنون آنتروپی این توزیع اتمها را محاسبه می‌کنیم. تعداد $\frac{1}{4}(\nu + P)N$ اتم A و تعداد $\frac{1}{4}(\nu - P)N$ اتم B روی شبکه a قرار دارند؛ تعداد $\frac{1}{4}(\nu - P)N$ اتم A و تعداد $\frac{1}{4}(\nu + P)N$ اتم B روی شبکه b

وجود دارند. تعداد ترتیبهای این اتمها، G چنین است

$$G = \left[\frac{N!}{\left[\frac{1}{4}(\lambda + P)N\right]! \left[\frac{1}{4}(\lambda - P)N\right]!} \right]^2 \quad (7)$$

با استفاده از تعریف آنتروپی به صورت $S = k_B \ln G$ ، و با کاربرد تقریب استرلینگ، داریم

$$S = 2Nk_B \ln 2 - Nk_B [(\lambda + P) \ln(\lambda + P) + (\lambda - P) \ln(\lambda - P)] \quad (8)$$

این رابطه آنتروپی آمیختگی را تعریف می‌کند. برای $P = \pm \lambda$ ، $S = 0$ و برای $P = 0$ ، $S = 2Nk_B \ln 2$.

نظم تعادلی با این درباست تعیین می‌شود که انرژی آزاد $F = E - TS$ نسبت به پارامتر نظم P کمینه باشد. با مشتق‌گیری از F نسبت به P ، شرط کمینه بودن را به دست می‌آوریم

$$2NPU + Nk_B T \ln \frac{\lambda + P}{\lambda - P} = 0 \quad (9)$$

این معادله جبری را برای P می‌توان به طور ترسیمی حل کرد؛ منحنی شکل γ (الف) را که به طور یکتا خواست نزول می‌کند به دست می‌آوریم. در نزدیکی گذار می‌توان رابطه (۹) را بسط داد و در نتیجه

$$T_c = -2U/k_B \quad (10)$$

برای اینکه گذار رخ دهد، برهم‌کنش مؤثر U باید منفی باشد.

پارامتر نظم کوتاه‌برد، r ، مقیاسی است از کسری از تعداد متوسط q پیوندهای همسایه اول که پیوندهای AB دارند. هنگامی که آلیاژ AB کاملاً بی‌نظم است، در اطراف هر اتم A به طور متوسط چهار پیوند AB وجود دارد. تعداد کل پیوندهای ممکن برابر هشت است. r را می‌توانیم به صورت زیر تعریف کنیم

$$r = \frac{1}{4}(q - 4) \quad (11)$$

در نتیجه در نظم کامل $r = 1$ و در بی‌نظمی کامل $r = 0$. ملاحظه کنید که r فقط مقیاسی از نظم موضعی در اطراف اتم است، در حالی که پارامتر نظم بلندبرد، P ، به خلوص تمامی جمعیت یک زیرشبکه معلوم مربوط است. در بالای دمای گذار، T_c ، نظم بلندبرد دقیقاً صفر است، ولی نظم کوتاه‌برد صفر نیست.

نمودارهای فازي

اطلاعات زیادی را می‌توان از نمودار فازي حتی برای یک دستگاه دوتایی، همانند شکل ۴، به دست آورد. نواحی احاطه شده با منحنیهای حالت تعادل آن ناحیه را به ترکیب و دما مربوط می‌سازد. منحنیها مشخص‌کننده دوره گذارهای فازي اند که در صفحه $T-x$ ترسیم شده‌اند، و در آن x پارامتر ترکیب است. حالت تعادل حالت کمیته انرژی آزاد دستگاه دوتایی در T و x معینی است. بنابراین تحلیل نمودار فازي یک موضوع ترمودینامیکی است. نتایج فوق‌العاده‌ای از این تحلیلها به دست می‌آید، به ویژه وجود ترکیبات یوتکتیکی با نقطه ذوب پایین. از آنجا که چنین تحلیلهایی در فصل ۱۱ کتاب TP بررسی شده‌اند، در اینجا خلاصه‌ای از نتایج اصلی آورده می‌شود.

دو ماده در صورتی در یکدیگر حل می‌شوند و مخلوط همگنی تشکیل می‌دهند که ترکیب حاصل دارای پایتترین انرژی آزاد دسترس پذیر نسبت به این مؤلفه‌ها باشد. این دو ماده در صورتی مخلوط چندگن تشکیل می‌دهند که انرژی مجموعه مربوط به دو فاز جدا از هم در کنار هم کمتر از انرژی آزاد مخلوط همگن باشد. اکنون می‌توان گفت که مخلوط گاف انحلال پذیری نشان می‌دهد. در شکل ۴ می‌بینیم که ترکیبها در نزدیکی $Cu_{0.60}Zn_{0.40}$ در گاف انحلال پذیری اند و مخلوط فازهای fcc و bcc از ساختار و ترکیبهای مختلف اند. نمودار فازي بستگی دمایی گافهای انحلال پذیری را نشان می‌دهند.

وقتی بخش کوچکی از مایع همگن منجمد می‌شود، ترکیب جامد تشکیل شده تقریباً همواره با بخش مایع متفاوت است. مقطع افقی نزدیک به ترکیب $Cu_{0.80}Zn_{0.20}$ را در شکل ۴ در نظر بگیرید. فرض کنید x درصد وزنی روی باشد. در دمای خاص، سه ناحیه وجود دارد:

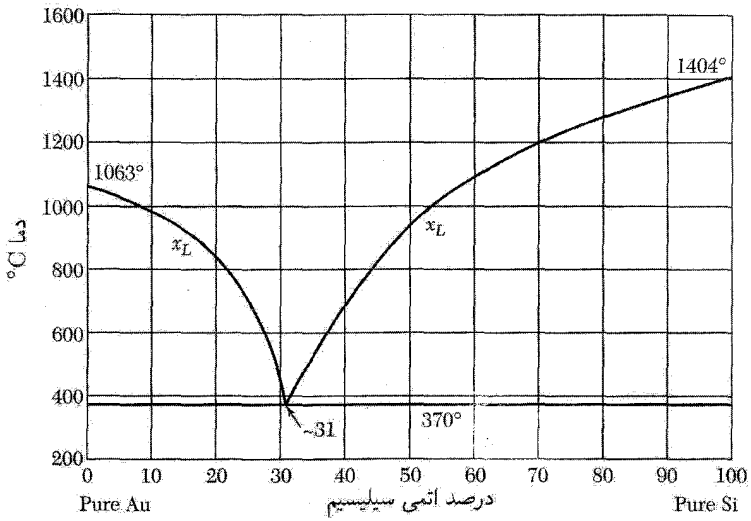
$x > x_L$ ، دستگاه تعادل مایع همگن است.

$x_S < x < x_L$ ، یک فاز جامد با ترکیب x_S و یک فاز مایع با ترکیب x_L وجود دارد.

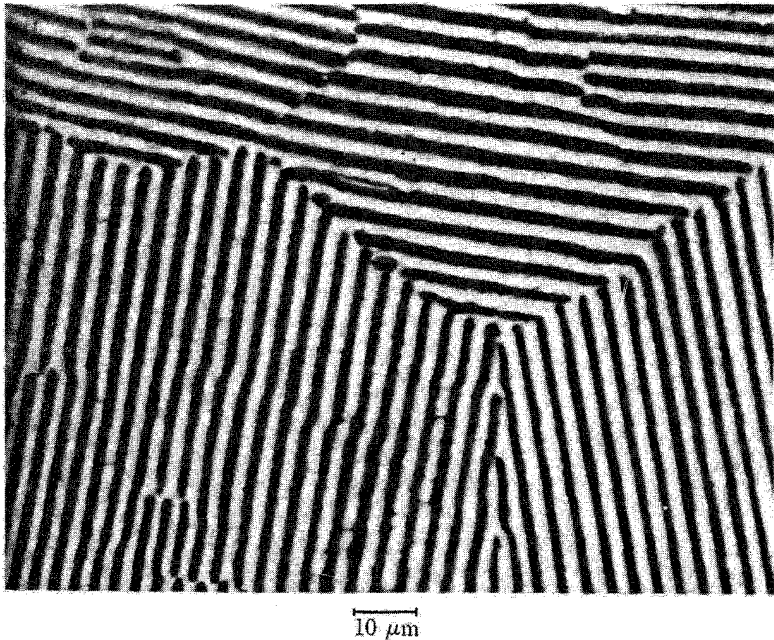
$x < x_S$ ، دستگاه تعادل جامد همگن است.

نقطه x_L منحنی ای را طی می‌کند که به آن منحنی ذوب می‌گویند، و نقطه x_S منحنی انجماد را طی می‌کند.

یوتکتیکها. مخلوطهای با دو شاخه حلالیت را در نمودار فازي، مثل شکل ۱۰ در دستگاه Au-Si، یوتکتیک می‌نامند. کمیته دمای انجماد را دمای یوتکتیک و در اینجا ترکیب را ترکیب یوتکتیک می‌نامند. جامدی با این ترکیب، همان گونه که در عکس میکروسکوپی شکل ۱۱ دیده می‌شود، از دو فاز مجزا تشکیل شده است. دستگاههای دوتایی بسیاری وجود دارند که در آنها فاز مایع تا دماهای کمتر از دمای ذوب عناصر تشکیل دهنده وجود دارد. بدین ترتیب در $Au_{0.69}Si_{0.31}$ در $370^{\circ}C$ به صورت مخلوط چندگن دو فازي منجمد می‌شود، گرچه Au و Si، به ترتیب، در $1063^{\circ}C$ و $1404^{\circ}C$ منجمد می‌شوند. یک فاز یوتکتیک تقریباً طلای خالص و فاز دیگر تقریباً سیلیسیم خالص است.



شکل ۱۰. نمودار فازی یوتکتیکی آلیاژ طلا-سیلیسیم. یوتکتیک شامل دو شاخه است که در $T_c = 370^\circ\text{C}$ و $x_g = 31\%$ درصد اتمی Si به هم می‌رسند.



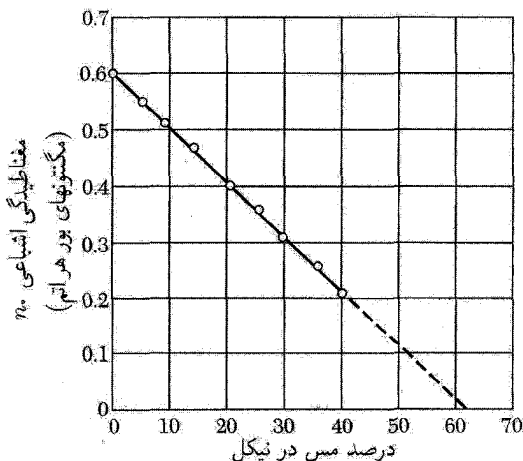
شکل ۱۱. عکس میکروسکوپی یوتکتیک Pb-Sn.

یوتکتیک Au-Si در فناوری نیم‌رسانا مهم است، زیرا این یوتکتیک لحیم‌کاری دمای پایین سیمهای تماس طلا را روی قطعات سیلیسیم میسر ساخته است. آلیاژهای سرب-قلع یوتکتیک مشابهی با $Pb_{0.26}Sn_{0.74}$ در $183^{\circ}C$ دارند. این آلیاژها ترکیبات نزدیک به آن، اگر گستره دمای ذوب آنها در عمل آسان باشد، در لحیم‌کاری به‌کار می‌روند.

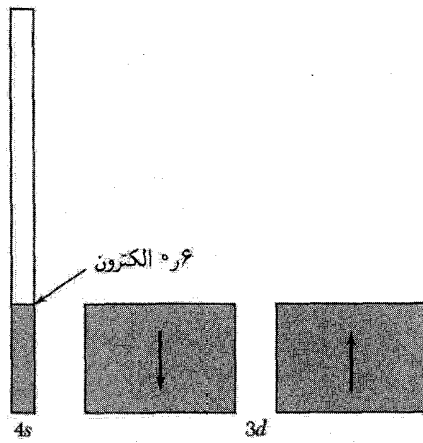
آلیاژهای فلزات واسط

وقتی مس به نیکل افزوده می‌شود، عدد مگنتون مؤثر هر اتم به صورت خطی کاهش یافته، مطابق شکل ۱۲، در نزدیکی $Cu_{0.6}Ni_{0.4}$ به صفر می‌رسد. در این ترکیب الکترون اضافی مس نوار $3d$ ، یا زیرنوارهای اسپین-بالا و اسپین-پایین $3d$ ، را که در شکل ۷ (ب) از فصل ۱۲ نشان داده شده، بر کرده است. این وضعیت به طور طرحوار در شکل ۱۳ نشان داده شده است.

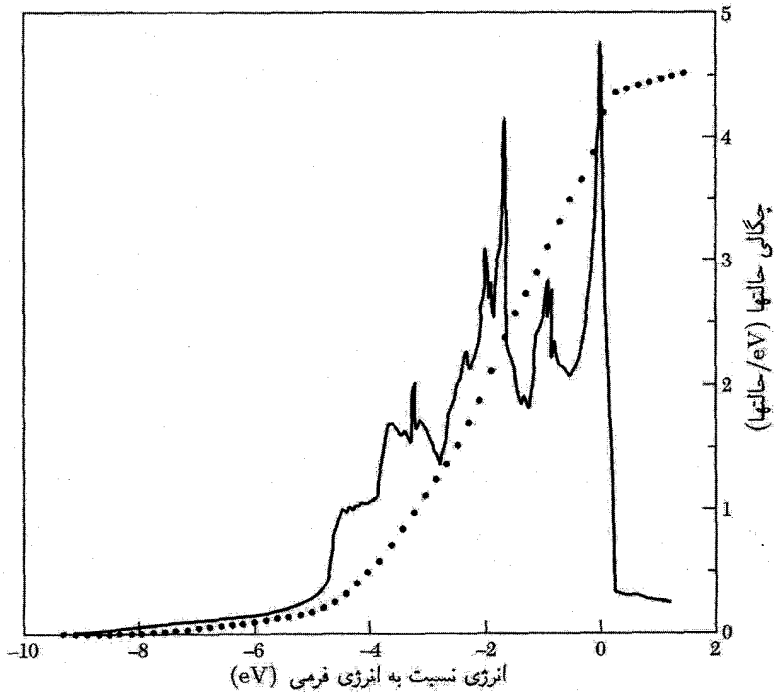
برای سادگی، ترسیمهای بلوکی نمایشگر چگالی حالت‌هایی اند که از نظر انرژی یکنواخت‌اند. معلوم شده است که چگالی حالت‌های واقعی یکنواخت نیست؛ نتیجه یک محاسبه نوین در شکل ۱۴ نشان داده شده است. پهنای نوار $3d$ در حدود $5eV$ است. در بالای شکل که در آن آثار مغناطیسی تعیین می‌شوند، چگالی حالتها به خصوص زیاد است. چگالی میانگین حالتها در نوار $3d$ نسبت به نوار $4s$ به اندازه یک مرتبه بزرگی بالاتر است. این نسبت چگالی حالت‌های افزایش یافته یک نشانه تخمینی از افزایش مورد انتظار ظرفیت گرمایی الکترونی و پذیرفتاری پارامغناطیسی فلزات واسط غیرفرومغناطیسی در مقایسه با فلزات ساده تک ظرفیتی است.



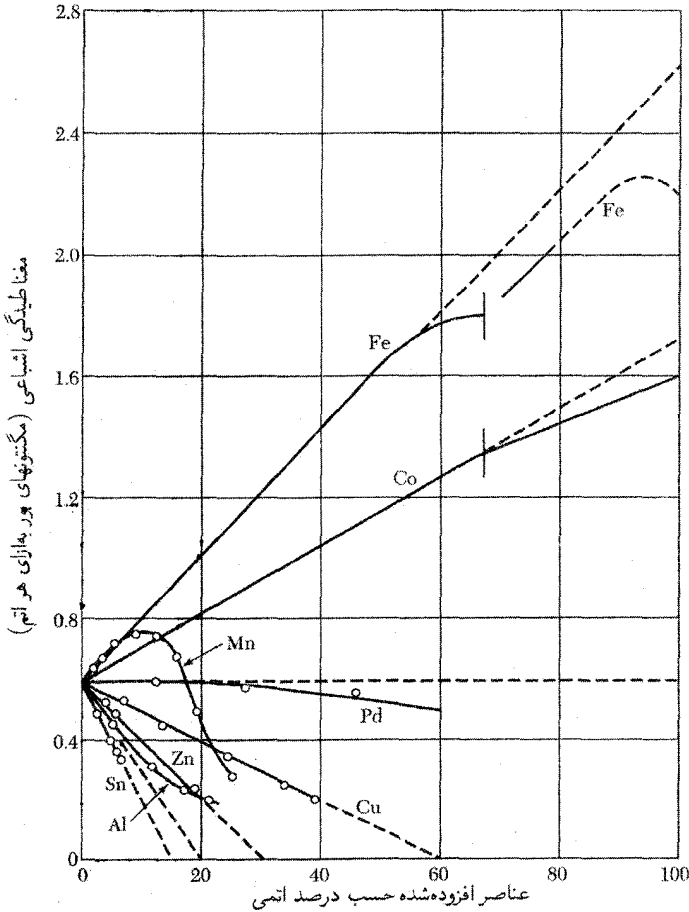
شکل ۱۲. اعداد مگنتون بور برای آلیاژهای نیکل-مس.



شکل ۱۳. توزیع الکترونها در آلیاژ $\text{Ni}^{4+}\text{Cu}^{4+}$. ۶ره الکترون اضافی که توسط مس تأمین شده، نوار d را کاملاً پر کرده است و تعداد الکترونها نوار s را نسبت به شکل ۱۲ (ب) کمی افزایش داده است.



شکل ۱۴. چگالی حالتها در نیکل.

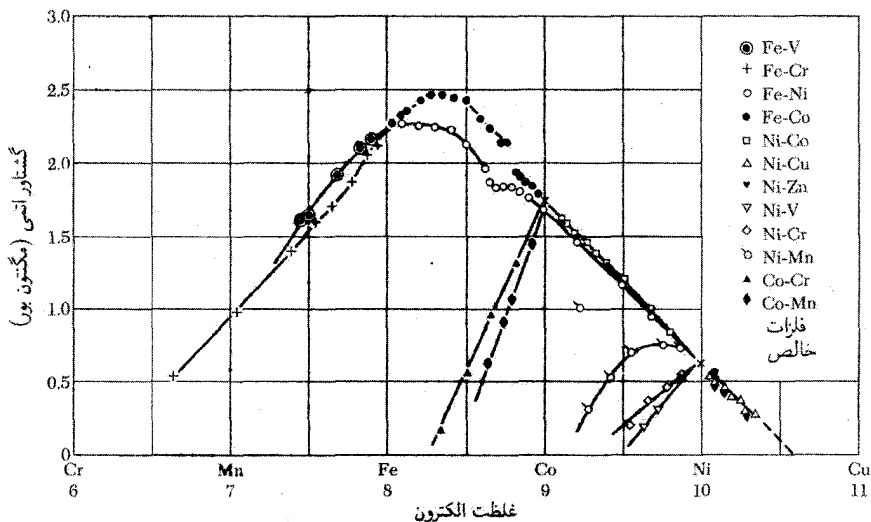


شکل ۱۵. مغناطیسگی اشیاعی آلیاژهای نیکل برحسب مگنتونهای بور به ازای هر اتم به صورت تابعی از درصد اتمی عنصر حل شده.

شکل ۱۵ تأثیر افزودن مقادیر کم عناصر دیگر به نیکل را نشان می‌دهد. بر مبنای مدل نواری، انتظار می‌رود که یک فلز آلیاژی با \approx الکترون ظرفیتی در خارج از پوسته d ، مغناطیسگی نیکل را تقریباً به اندازه \approx مگنتون بور به ازای هر اتم حل شده کاهش دهد. این رابطه ساده برای $\text{Cu}, \text{Zn}, \text{Al}, \text{Sn}$ ، به ترتیب، با \approx برابر ۱، ۲، ۳، ۴ برقرار است. برای Fe, Co ، و Mn مدل گشتاور جایگزیده فریدل، به ترتیب، مقادیر \approx مؤثر ۱-، ۲-، و ۳- را به حساب می‌آورد.

میانگین گشتاورهای مغناطیسی اتمی آلیاژهای دوتایی عناصر گروه آهن در شکل ۱۶ برحسب تابعی از غلظت الکترونها در خارج از پوسته $3p$ ترسیم شده است، که به آن ترسیم اسلیتر-پاولینگ^۱ می‌گویند.

1. Slater-Pauling



شکل ۱۶. میانگین گشتاورهای اتمی آلیاژهای دوتایی عناصر در گروه آهن.

توالی عمده آلیاژها در شاخه سمت راست، از قوانین مورد بحث در شکل ۱۵ تبعیت می‌کند. وقتی غلظت الکترونی کاهش می‌یابد، به نقطه‌ای می‌رسیم که در آن هیچ‌یک از دو زیرنوار $3d$ پر نیست، و در این صورت گشتاور مغناطیسی به سوی سمت چپ ترسیم کاهش می‌یابد.

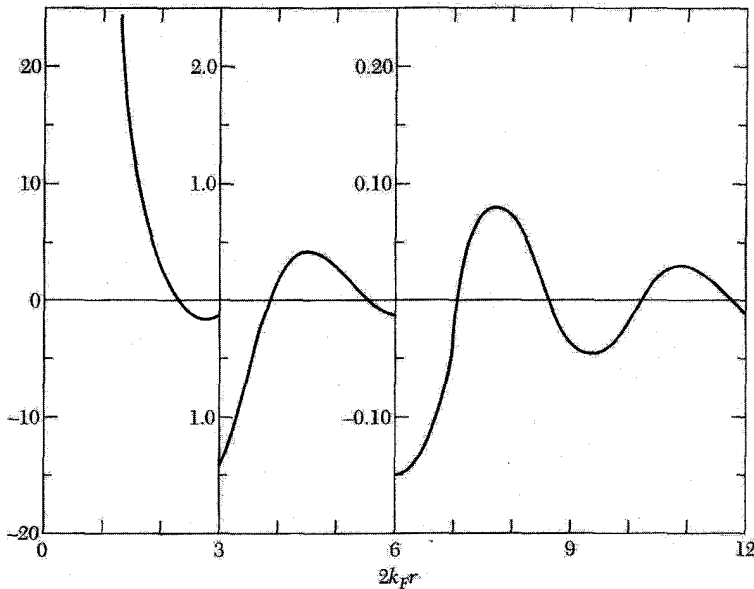
رسانندگی الکتریکی. ممکن است تصور شود که در فلزات واسط وجود نوار $3d$ به عنوان مسیر رسانش همراه با نوار $4s$ رسانندگی را زیاد کند، ولی چنین نیست. مقاومت ویژه مسیر الکترون s در برخوردش با الکترونهای d زیاد می‌شود؛ این یک سازوکار پراکندگی اضافی قوی است که وقتی نوار d پر است، وجود ندارد. مقادیر مقاومت‌های ویژه Ni ، Pd ، و Pt برحسب میکرواهم-سانتیمتر در $18^\circ C$ را با مقاومت ویژه فلزات نجیب Cu ، Ag ، و Au که بلافاصله در جدول دوره‌ای بعد از آنها قرار دارند، مقایسه می‌کنیم:

Ni	Pd	Pt
۷٫۴	۱۰٫۸	۱۰٫۵
Cu	Ag	Au
۱٫۷	۱٫۶	۲٫۲

مقاومت‌های ویژه فلزات نجیب از مقاومت‌های ویژه فلزات واسط با ضریبی از مرتبه ۵ پایینترند. این مطلب نشانگر مؤثر بودن سازوکار پراکندگی $s-d$ است.

اثر کاندو

در محلولهای جامد رقیق یون مغناطیسی در بلور فلز غیرمغناطیسی (مانند Mn در Cu) جفت‌شدگی تبدیلی بین این یون و الکترونهای رسانش دارای پیامدهای مهمی است. گاز الکترون رسانش در مجاورت یون مغناطیسی، با وابستگی فضایی، که در شکل ۱۷ نشان داده شده است، مغناطیسی می‌شود. این مغناطیدگی باعث ایجاد برهم‌کنش تبدیلی غیرمستقیم^۱ بین دو یون مغناطیسی می‌شود، زیرا یون دوم با مغناطیدگی القایی ناشی از یون اول روبه‌رو می‌شود. این برهم‌کنش، که به برهم‌کنش RKKY معروف است، در نظر اسپینی فلزات خاکی کمیاب نیز نقش دارد. در این فلزات اسپین مغزهای یونی $4f$ ، در اثر مغناطیدگی القایی در گاز الکترون رسانش، با همدیگر جفت می‌شوند.



شکل ۱۷. مغناطیدگی گاز فرمی الکترون آزاد در $T = 0^\circ$ در همسایگی گشتاور مغناطیسی نقطه‌ای در مبدأ $r = 0$ ، بنابر نظریه RKKY. محور افقی $2k_F r$ است، که در آن k_F بردار موجی است که به کره فرمی ختم می‌شود.

۱. مروری بر برهم‌کنشهای تبدیلی غیرمستقیم در فلزات در مقاله زیر داده شده است:

C. Kittel, Solid state physics **22**, 1 (1968).

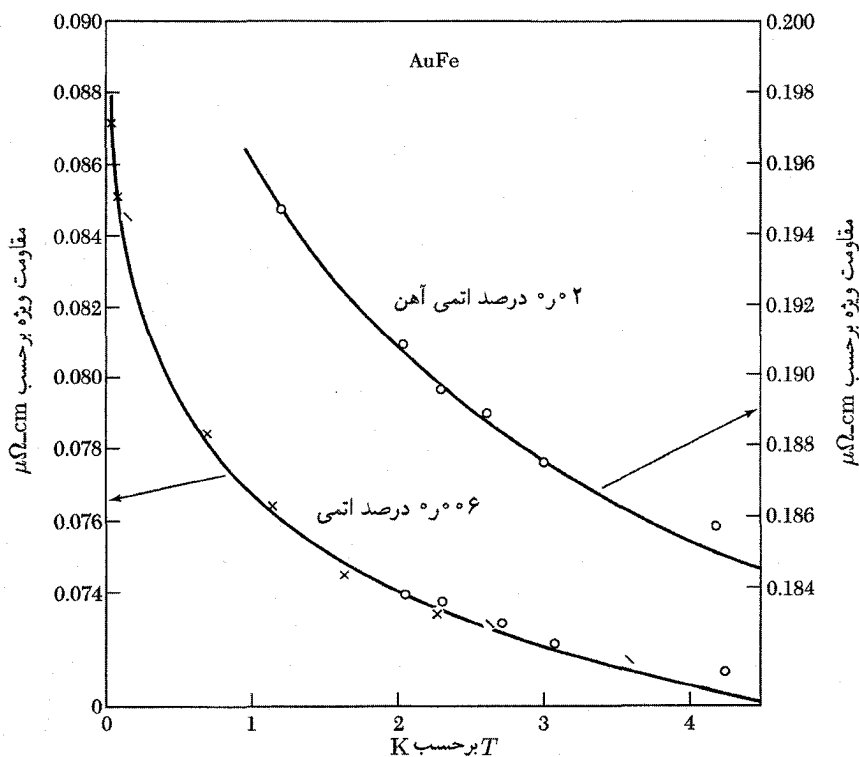
مروری درباره اثر کاندو در مقالات زیر ارائه شده است:

J. Kondo, "Theory of dilute magnetic alloys", Solid state physics **23**, 184 (1969). A. J. Heeger, "Localized moments and nonmoments in metals: The Kondo effect", Solid state physics **23**, 248 (1969).

نمادگذاری RKKY علامت اختصاری رودرمن، کیتل، کاسویا، و یوشیدا است.

پیامد برهم‌کنش یون مغناطیسی-الکترون رسانش اثر کاندو است که در فصل ۱۸ به صورت دیگری بحث شد. در دماهای پایین کمینه‌ای در منحنی مقاومت ویژه آلیاژهای مغناطیسی رقیق برحسب دما در آلیاژهای Cu, Ag, Au, Mg, و Zn با ناخالصیهای Cr, Mn, و Fe مشاهده شده است.

وقوع مقاومت کمینه با حضور گشتاورهای مغناطیسی موضعی روی اتمهای ناخالصی ارتباط دارد. هرچا مقاومت کمینه یافت شود، ناگزیر گشتاور موضعی وجود دارد. کاندو نشان داد که احتمال پراکندگی یونهای مغناطیسی در دماهای پایین، که به‌طور غیرعادی زیاد است، پیامدی از طبیعت دینامیک پراکندگی است، که از جفت‌شدگی تبدالی و تیزی سطح فرمی در دماهای پایین حاصل می‌شود. گستره دمایی که در آن اثر کاندو مهم است، در شکل ۱۸ نشان داده شده است.



شکل ۱۸. مقایسه‌ای بین نتایج تجربی و نظری در مورد افزایش مقاومت ویژه الکتریکی در آلیاژهای رقیق آهن در طلا در دماهای پایین. مقاومت کمینه در طرف راست شکل قرار می‌گیرد، زیرا در دماهای بالا به دلیل پراکندگی الکترونها به وسیله فونونهای گرمایی مقاومت ویژه افزایش می‌یابد.

نتیجه اصلی این است، که سهم وابسته به اسپین در مقاومت ویژه چنین است

$$\rho_{\text{اسپین}} = c\rho_M \left[1 + \frac{3zJ}{\epsilon_F} \ln T \right] = c\rho_0 - c\rho_1 \ln T \quad (12)$$

که در آن J انرژی تبادل، z تعداد همسایه‌های اول، c غلظت، و ρ_M مقیاسی از قدرت پراکندگی تبدلی است. می‌بینیم که اگر J منفی باشد، مقاومت ویژه اسپینی در دماهای پایین افزایش می‌یابد. اگر در گستره دمایی مورد نظر مقاومت ویژه فونونی به صورت T^5 تغییر کند و اگر مقاومت‌های ویژه جمع‌پذیر باشند، آنگاه مقاومت کل دارای چنین شکلی خواهد بود

$$\rho = aT^5 + c\rho_0 - c\rho_1 \ln T \quad (13)$$

که دارای کمینه‌ای در

$$d\rho/dT = 5aT^4 - c\rho_1/T = 0 \quad (14)$$

است که در آنجا

$$T_{\min} = (c\rho_1/5a)^{1/5} \quad (15)$$

دمایی که در آن مقاومت ویژه کمینه است به صورت غلظت ناخالصی مغناطیسی به توان یک‌پنجم تغییر می‌کند، که لااقل برای Fe در Cu با تجربه توافق دارد.

مسائل

۱. خطوط ابرشبکه در Cu_3Au . آلیاژ Cu_3Au (۷۵٪ Cu و ۲۵٪ Au) در کمتر از 400°C دارای حالت منظمی است که در آن اتمهای طلا مکانهای 000 و اتمهای مس مکانهای $1/2, 1/2, 1/2, 1/2$ را در شبکه مکعبی مرکز سطحی اشغال می‌کنند. شاخصهای آن دسته از بازتابهای جدید پرتو x را پیدا کنید. که به هنگام رفتن آلیاژ از حالت نامنظم به منظم پدیدار می‌شوند. همه بازتابهای جدید با شاخصهای کوچکتر یا مساوی ۲ را بنویسید.

۲. ظرفیت گرمایی پیکربندی. رابطه‌ای برحسب $P(T)$ برای ظرفیت گرمایی مربوط به آثار بانظم-بی‌نظم آلیاژ AB به دست آورید. [آنتروپی (۸) را آنتروپی پیکربندی یا آنتروپی آمیختگی می‌نامند].

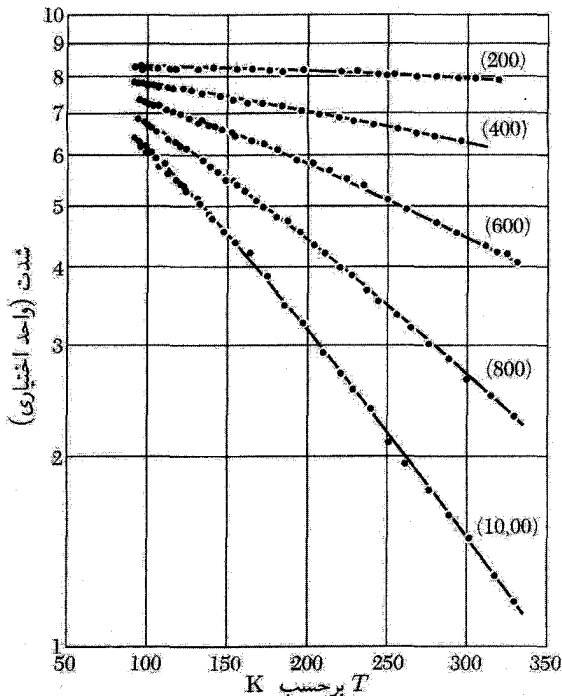
پیوست الف

وابستگی خطوط بازتاب به دما

... من به این نتیجه رسیدم که افزایش زاویه پراکندگی بر تیزی خطوط تداخل تأثیر ندارد، بلکه شدت آنها را از بین می‌برد و هر چه دما بیشتر باشد این مطلب بیشتر واقعیت پیدا می‌کند.

پ. دبی

هنگامی که دمای بلور افزایش می‌یابد، شدت باریکه‌های بازتابیدهٔ براگ کاهش می‌یابد، ولی پهنای زاویه‌ای خطوط بازتابیده تغییر نمی‌کند. شدتهای تجربی آلومینیم در شکل ۱ نشان داده شده‌اند. شگفت‌آور است که می‌توان از اتمهایی که در دمای اتاق حرکت کاتوره‌ای با دامنهٔ زیاد دارند و فواصل لحظه‌ای بین همسایه‌های اول تا ده درصد تغییر می‌کند، بازتاب پرتو x تیزی به دست آورد. قبل از تجربهٔ لاوه هنگامی که پیشنهاد انجام‌دادنش در قهوه‌خانه‌ای در مونیخ مورد بحث قرار گرفت،^۱ این اعتراض مطرح شد که به دلیل افت و خیزهای قابل ملاحظهٔ گرمایی اتمهای بلور در دمای اتاق، مکانهای لحظه‌ای‌شان آرایش دوره‌ای منظم ندارند. در نتیجه، بحث به این صورت ادامه یافت که نباید یک باریکهٔ پراشیدهٔ کاملاً واضح را انتظار داشت.



شکل ۱. وابستگی شدت به دما برای بازتابهای $(h^{\circ}o)$ پرتو x در آلومینیم. بازتابهای $(h^{\circ}o)$ با مقادیر فرد h در ساختار fcc ممنوع‌اند.

ولی یک باریکه پراشیده کاملاً واضح به دست آمد و دلیل آن را دبی ارائه کرد. دامنه پرتو پراکنده شده توسط بلور را در نظر بگیرید: فرض می‌کنیم مکان اتمی که اسماً در \mathbf{r}_j است، شامل جمله $\mathbf{u}(t)$ باشد که نسبت به زمان افت‌وخیز می‌کند $\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_j + \mathbf{u}(t)$. همچنین، فرض می‌کنیم که هر اتم مستقلاً حول مکان تعادل خود افت‌وخیز دارد.^۱ در این صورت، میانگین گرمایی عامل ساختار (رابطه ۴۳ فصل ۲) شامل جملات زیر است

$$f_j \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j) \langle \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{u}) \rangle \quad (1)$$

که در آن $\langle \dots \rangle$ علامت میانگین گرمایی است، بسط رشته‌ای تابع نمایی عبارت است از

$$\langle \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{u}) \rangle = 1 - i\langle \mathbf{G} \cdot \mathbf{u} \rangle - \frac{1}{2} \langle (\mathbf{G} \cdot \mathbf{u})^2 \rangle + \dots \quad (2)$$

۱. این مدل اینشتین در مورد جامد است که در دماهای پایین مدل خیلی خوبی نیست، ولی در دماهای بالا خوب کار می‌کند.

وابستگی خطوط بازتاب به دما 703

از آنجا که \mathbf{u} یک جابه‌جایی گرمایی کاتوره‌ای است و به جهت \mathbf{G} مربوط نیست، $(\mathbf{G} \cdot \mathbf{u}) = 0$. به علاوه

$$\langle (\mathbf{G} \cdot \mathbf{u})^2 \rangle = G^2 \langle u^2 \rangle \langle \cos^2 \theta \rangle = \frac{1}{3} \langle u^2 \rangle G^2$$

ضریب $\frac{1}{3}$ از میانگین هندسی $\cos^2 \theta$ روی کره حاصل می‌شود.
 دو جمله اول بسط رشته‌ای تابع

$$\exp\left(-\frac{1}{6} \langle u^2 \rangle G^2\right) = 1 - \frac{1}{6} \langle u^2 \rangle G^2 + \dots \quad (3)$$

مانند دو جمله اول رابطه (2) است. می‌توان نشان داد که در نوسانگر هماهنگ همه جمله‌ها در رشته‌های (2) و (3) با هم برابرند. بدین ترتیب شدت پراکندگی، که برابر است با مربع دامنه، به صورت زیر است

$$I = I_0 \exp\left(-\frac{1}{3} \langle u^2 \rangle G^2\right) \quad (4)$$

که در آن I_0 شدت پراکندگی حاصل از شبکه صلب است. عامل نمایی، عامل دبی-والر است. در اینجا $\langle u^2 \rangle$ میانگین مربعی جابه‌جایی اتم است. میانگین گرمایی انرژی پتانسیل برای نوسانگر هماهنگ کلاسیکی در سه بعد برابر $\frac{3}{2} k_B T$ است، در نتیجه

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2} C \langle u^2 \rangle = \frac{1}{2} M \omega^2 \langle u^2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T \quad (5)$$

که در آن C ثابت نیرو، M جرم اتم، و ω بسامد نوسانگر است. در این رابطه از تساوی $\omega^2 = C/M$ استفاده کرده‌ایم. بنابراین شدت پراکندگی عبارت است از

$$I(hkl) = I_0 \exp(-k_B T G^2 / M \omega^2) \quad (6)$$

که در آن hkl شاخصهای بردار شبکه وارون \mathbf{G} اند. این نتیجه کلاسیکی در دماهای بالا تقریب خوبی است.

در نوسانگرهای کوانتومی، $\langle u^2 \rangle$ حتی در دمای $T = 0$ صفر نیست؛ زیرا حرکت نقطه صفر وجود دارد. در مدل نوسانگرهای هماهنگ مستقل، انرژی نقطه صفر $\frac{3}{2} \hbar \omega$ است، که برابر است با انرژی نوسانگر هماهنگ کوانتومی سه‌بعدی در حالت پایه در مقایسه با انرژی کلاسیکی همین نوسانگر در حالت سکون. نیمی از انرژی نوسانگر به صورت انرژی پتانسیل است، لذا در حالت پایه داریم

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2} M \omega^2 \langle u^2 \rangle = \frac{3}{2} \hbar \omega; \quad \langle u^2 \rangle = \frac{3 \hbar}{2 M \omega} \quad (7)$$

در نتیجه در صفر مطلق، با استفاده از رابطه (۴) داریم

$$I(hkl) = I_0 \exp(-\hbar G^2 / 2M\omega) \quad (۸)$$

اگر داشته باشیم $G = 10^9 \text{cm}^{-1}$ ، $\omega = 10^{14} \text{s}^{-1}$ و $M = 10^{-22} \text{g}$ ، شناسه تابع نمایی تقریباً برابر $I/I_0 \simeq 0.9$ در نتیجه در صفر مطلق ۹۰ درصد باریکه به طور کشسان و ۱۰ درصد به طور ناکشسان پراکنده می شود.

از رابطه (۶) و از شکل ۱ می بینیم که با افزایش دما شدت خط پراشیده کاهش می یابد ولی به گونه فاجعه آمیز. بازتابهای با G کوتاه کمتر از بازتابهای با G بلند تحت تأثیر قرار می گیرند. شدتی که محاسبه کردیم همان شدت پراش همدوس یا پراکندگی کشسان در جهتهای کاملاً مشخص براگ است. شدتی که از چنین جهتهایی محو شده است به صورت پخش شده در زمینه ظاهر می شود. در پراکندگی ناکشسان، فوتون پرتو x باعث برانگیختگی یا وانگیختگی ارتعاشات شبکه می شود. و انرژی و جهت فوتون تغییر می کند.

در یک دمای معین عامل دبی-والر مربوط به یک خط پراش با افزایش بزرگی بردار شبکه وارون G مربوط به بازتاب کاهش می یابد. در دماهای بالا هر چه $|G|$ بزرگتر باشد، بازتاب ضعیفتر است. نظریه ای که در اینجا برای بازتاب پرتو x بررسی شد، به خوبی در مورد پراش نوترون و اثر موسباوئر، یا همان گسیل بدون پس زدگی پرتوهای گاما توسط هسته های مقید داخل بلور، صادق است.

پرتوهای x می توانند از طریق فرایندهای ناکشسان فوتو یونش الکترونها و پراکندگی کامپتون نیز جذب بلور شوند. در اثر فوتوالکتریک، فوتون پرتو x جذب و الکترونی از اتم به خارج پرتاب می شود. در اثر کامپتون، فوتون به طور ناکشسان به وسیله الکترون پراکنده می شود: فوتون انرژی از دست می دهد و الکترون از اتم به خارج پرتاب می شود. عمق نفوذ باریکه پرتو x ، به نوع جامد و به انرژی فوتون وابسته است؛ و معمولاً حدود یک سانتیمتر است. یک باریکه پراشیده در بازتاب براگ بلور ایده آل ممکن است، در فاصله بسیار کوتاھتری، شاید 10^{-3}cm ، انرژی را با خود حمل کند.

پیوست ب

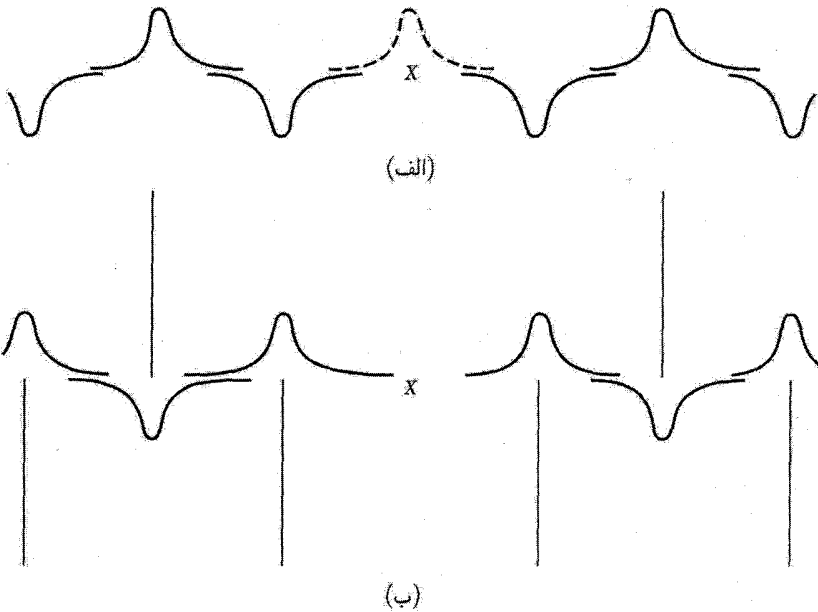
روش محاسبهٔ اوالد برای جمع‌زنیهای شبکه‌ای

مسئله عبارت است از محاسبهٔ پتانسیل الکتروستاتیکی که به یک یون در حضور همهٔ یونهای دیگر در بلور اعمال می‌شود. شبکه‌ای در نظر می‌گیریم که از یونهای جملگی با بار مثبت و یا جملگی با بار منفی تشکیل شده باشد، و فرض می‌کنیم یونها کروی‌اند.

پتانسیل کل $\varphi = \varphi_1 + \varphi_2$ روی هر یون را به صورت مجموع دو پتانسیل متمایز، ولی مربوط به هم محاسبه می‌کنیم. متغیر φ_1 پتانسیل مربوط به ساختاری است که در آن در هر یک از جایگاههای یونی، یک توزیع گاوسی از بارهایی هم‌علامت با یونهای واقعی قرار دارد. بنابر تعریف ثابت مادلونگ، سهم توزیع بار واقع در نقطهٔ مرجع، در پتانسیلهای φ_1 و φ_2 در نظر گرفته نمی‌شود (شکل ۱ الف). بنابراین پتانسیل φ_1 را به صورت چنین اختلافی تعریف می‌کنیم

$$\varphi_r = \varphi_a - \varphi_b$$

φ_a پتانسیل رشتهٔ پیوسته‌ای از توزیعهای گاوسی و φ_b پتانسیل یک تک‌توزیع گاوسی واقع در نقطهٔ مرجع است.



شکل ۱. (الف) توزیع باری که برای محاسبه پتانسیل φ_1 مورد استفاده قرار گرفته است؛ پتانسیل φ_a محاسبه می شود (این پتانسیل شامل منحنی خط چین در نقطه مرجع هم هست)، و φ_b ، پتانسیل منحنی خط چین به تنهایی است. (ب) توزیع بار برای پتانسیل φ_2 . نقطه مرجع را با X مشخص کرده ایم.

متغیر φ_2 ، پتانسیل شبکه ای از بارهای نقطه ای همراه با یک توزیع گاوسی اضافی با بار مخالف است که بر هر یک از بارهای نقطه ای نهاده شده است (شکل ۱ ب).

نکته جدا کردن مسئله به دو بخش φ_1 و φ_2 در آن است که با انتخاب گزینه مناسب برای پارامتری که پهنای هر یک از قله های گاوسی را تعیین می کند، می توانیم برای هر دو بخش به طور همزمان، همگرایی خوبی به دست آوریم. به هنگام جمع زنی دو توزیع بار مجزا که φ_1 و φ_2 را می دهند، توزیع های گاوسی کاملاً حذف می شوند، در نتیجه مقدار پتانسیل کل φ مستقل از پارامتر پهناست، ولی سرعت همگرایی به مقدار انتخاب شده برای آن پارامتر بستگی دارد.

نخست پتانسیل φ_a مربوط به توزیع گاوسی پیوسته را محاسبه می کنیم. φ_a و چگالی بار ρ را در رشته فوریه بسط می دهیم

$$\varphi_a = \sum_{\mathbf{G}} c_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \quad (1)$$

$$\rho = \sum_{\mathbf{G}} \rho_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \quad (2)$$

که در آن G ، 2π برابر برداری در شبکهٔ وارون است. معادلهٔ پواسون به قرار زیر است

$$\nabla^2 \varphi_a = -4\pi\rho$$

یا

$$\sum G^2 c_G \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) = 4\pi \sum \rho_G \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$$

در نتیجه

$$c_G = 4\pi\rho_G/G^2 \quad (3)$$

برای یافتن ρ_G فرض می‌کنیم که همراه هر نقطهٔ شبکه در شبکهٔ براوه، پایه‌ای وجود دارد، شامل یونهایی با بار q_t در مکانهای \mathbf{r}_t نسبت به آن نقطهٔ شبکه. بنابراین هر نقطهٔ یونی، مرکز یک توزیع گاوسی بار با چگالی زیر است

$$\rho(\mathbf{r}) = q_t(\eta/\pi)^{3/2} \exp(-\eta r^2)$$

که در آن از عامل جلوی تابع نمایی مطمئن می‌شویم که بار کل وابسته به یون برابر q_t است. پارامتر گستره، η را باید چنان با درایت برگزید که همگرایی سریع در نتیجهٔ نهایی رابطهٔ (۶) را، که مقدار آن مستقل از η است، تضمین کند.

معمولاً ρ_G را با ضرب کردن دو طرف رابطهٔ (۲) در $\exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$ و انتگرال‌گیری روی حجم Δ ی یک یاخته محاسبه می‌کنیم. در این انتگرال‌گیری توزیع باری که باید در نظر بگیریم، توزیعی است که از نقطه‌های یونی درون همین یاخته و نیز از دنبالهٔ توزیعهای ناشی از همهٔ یاخته‌های دیگر حاصل می‌شود. ولی به‌سادگی دیده می‌شود که انتگرال چگالی بار کل ضربدر $\exp[-(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})]$ روی یک تک‌یاخته برابر است با انتگرال چگالی باری که از یک تک‌یاخته ناشی می‌شود، ضربدر $\exp[-i(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})]$ روی کل فضا. بنابراین داریم

$$\begin{aligned} \rho_G \int_{\text{یاخته}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} &= \rho_G \Delta \\ &= \int_{\text{کل فضا}} \sum_t q_t (\eta/\pi)^{3/2} \exp[-\eta(r - r_t)^2] \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \end{aligned}$$

این عبارت به‌سادگی برآورد می‌شود:

$$\begin{aligned} \rho_G \Delta &= \sum_t q_t \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_t) (\eta/\pi)^{3/2} \int_{\text{کل فضا}} \exp[-i(\mathbf{G} \cdot \boldsymbol{\xi} + \eta \boldsymbol{\xi}^2)] d\boldsymbol{\xi} \\ &= \left(\sum_t q_t \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_t) \right) \exp(-G^2/4\eta) = S(\mathbf{G}) \exp(-G^2/4\eta) \end{aligned}$$

که در آن $S(\mathbf{G}) = \sum_l q_l \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_l)$ درست همان عامل ساختار (فصل ۲) برحسب واحدهای مناسب است. با استفاده از روابط (۱) و (۳) داریم

$$\varphi_a = \frac{\sqrt{\pi}}{\Delta} \sum_{\mathbf{G}} S(\mathbf{G}) G^{-2} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r} - G^2/\epsilon\eta) \quad (4)$$

در مبدأ، $\mathbf{r} = 0$ ، داریم

$$\varphi_a = \frac{\sqrt{\pi}}{\Delta} \sum_{\mathbf{G}} S(\mathbf{G}) G^{-2} \exp(-G^2/\epsilon\eta)$$

پتانسیل φ_b ناشی از توزیع گاوسی مرکزی در نقطه یونی مرجع i برابر است با

$$\varphi_b = \int_0^\infty (\sqrt{\pi} r^2 dr)(\rho/r) = \sqrt{q_i}(\eta/\pi)^{1/2}$$

و در نتیجه داریم

$$\varphi_1(i) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Delta} \sum_{\mathbf{G}} S(\mathbf{G}) G^{-2} \exp(-G^2/\epsilon\eta) - \sqrt{q_i}(\eta/\pi)^{1/2}$$

پتانسیل φ_2 را باید در نقطه مرجع محاسبه کنیم، این پتانسیل غیر صفر است، زیرا دنباله توزیعهای گاوسی مربوط به یونهای دیگر در نقطه مرجع همپوشانی دارند. این پتانسیل از سه سهم زیر ناشی از هر نقطه یونی تشکیل شده است:

$$q_l \left[\frac{1}{r_l} - \frac{1}{r_l} \int_0^{r_l} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \int_{r_l}^\infty \frac{\rho(\mathbf{r})}{r} d\mathbf{r} \right]$$

که در آن جمله‌ها به ترتیب به بار نقطه‌ای، بخشی از توزیع گاوسی واقع در درون کره‌ای به شعاع r_l حول نقطه یونی l ام، و بخش خارج از این کره مربوط می‌شوند. با نشان دادن عبارت متناظر به جای $\rho(\mathbf{r})$ ، و با انجام دستکاریهای مقدماتی، داریم

$$\varphi_2 = \sum_l \frac{q_l}{r_l} F(\eta^{1/2} r_l) \quad (5)$$

که در آن

$$F(x) = (\sqrt{\pi})^{-1/2} \int_x^\infty \exp(-s^2) ds$$

سرانجام برای پتانسیل کل در یون مرجع i ، در میدان یونهای دیگر در بلور داریم

$$\varphi(i) = \frac{4\pi}{\Delta} \sum_{\mathbf{G}} S(\mathbf{G}) G^{-2} \exp(-G^2/4\eta) - 2q_l(\eta/\pi)^{1/2} + \sum_l \frac{q_l}{r_l} F(\eta^{1/2} r_l) \quad (6)$$

شگرد استفاده از روش اوالد آن است که η را به‌گونه‌ای برگزینیم که هر دو مجموعیابی در رابطه (۶) به‌سرعت همگرا شوند.

روش اوالد-کورنفلد^۱ برای مجموعیابیهای شبکه‌ای در آرایه‌های دوقطبی

کورنفلد روی اوالد را به آرایه‌های دوقطبی و چهارقطبی گسترش داد. در اینجا به میدان حاصل از آرایه‌ای از دوقطبیها، در نقطه‌ای که نقطهٔ شبکه‌ای نیست، می‌پردازیم، بنابر روابط (۴) و (۵)، پتانسیل در نقطهٔ \mathbf{r} شبکه‌ای از بارهای نقطه‌ای مثبت واحد برابر است با

$$\varphi = (4\pi/\Delta) \sum_{\mathbf{G}} S(\mathbf{G}) G^{-2} \exp[i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r} - G^2/4\eta] + \sum_l F(\sqrt{\eta}/r_l)/r_l \quad (7)$$

که در آن r_l ، فاصلهٔ بین \mathbf{r} و نقطهٔ شبکه‌ای l ام است.

اولین جملهٔ سمت راست، پتانسیل ناشی از توزیع بار $\rho = (\eta/\pi)^{3/2} \exp(-\eta r^2)$ را حول هر نقطهٔ شبکه‌ای می‌دهد. پتانسیل آرایه‌ای از دوقطبیهای واحد را در راستای z به کمک رابطهٔ مشهوری در الکتروستاتیک، با دیفرانسیل گرفتن، به‌صورت $-d/dz$ ، از پتانسیل فوق به‌دست می‌آوریم. سهم جملهٔ مورد بررسی برابر است با

$$-(4\pi i/\Delta) \sum_{\mathbf{G}} S(\mathbf{G})(G_z/G^2) \exp[i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r} - G^2/4\eta]$$

و مؤلفهٔ z میدان الکتریکی ناشی از این جمله برابر است با $E_x = \partial^2 \varphi / \partial z^2$ ، یا

$$-(4\pi/\Delta) \sum_{\mathbf{G}} S(\mathbf{G})(G_z^2/G^2) \exp[i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r} - G^2/4\eta] \quad (8)$$

پس از یک بار مشتق‌گیری از جملهٔ دوم سمت راست رابطه (۷) به‌دست می‌آوریم

$$-\sum_l z_l [(F(\sqrt{\eta} r_l)/r_l^3) + (2/r_l^2)(\eta/\pi)^{1/2} \exp(-\eta r_l^2)]$$

و مؤلفه z این بخش از میدان برابر است با

$$\sum_l \{ z_l^{\nu} [{}_3F_2(\sqrt{\eta}r_l)/r_l^{\delta} + (\epsilon/r_l^{\epsilon})(\eta/\pi)^{1/2} \exp(-\eta r_l^{\nu}) + (\nu/r_l^{\nu})(\eta^{\nu}/\pi)^{1/2} \exp(-\eta r_l^{\nu})] - [(F(\sqrt{\eta}r_l)/r_l^{\nu}) + (\nu/r_l^{\nu})(\eta/\pi)^{1/2} \exp(-\eta r_l^{\nu})] \} \quad (9)$$

E_z کل برابر است با مجموع روابط (۸) و (۹). تأثیر هر تعداد از شبکه‌ها را می‌توان افزود.

پیوست ج

کوانتش امواج کشسان: فونونها

در فصل ۴ فونونها به صورت امواج کشسان کوانتیده معرفی شدند. چگونه موج کشسان کوانتیده می‌شود؟ ارتعاشات یک شبکه خطی از ذراتی را که با فنر به هم متصل‌اند، مدل ساده‌ای از فونونهای داخل بلور در نظر بگیرید. حرکت ذره را می‌توان درست مانند نوسانگر هماهنگ یا مجموعه‌ای از نوسانگرهای هماهنگ جفت‌شده کوانتیده کرد. برای این کار تبدیل مختصات ذره به مختصات فونون صورت می‌گیرد. مختصات فونونی را مختصات موجی هم می‌نامند، زیرا نشانگر موج متحرک‌اند.

فرض کنید N ذره به جرم M توسط فنرهایی با ثابت نیروی C و طول a به یکدیگر متصل باشند. برای تعیین شرایط مرزی، فرض کنید ذرات حلقه‌ای دایره‌ای تشکیل دهند. جابه‌جاییهای عرضی ذرات عمود بر صفحه حلقه را در نظر می‌گیریم. جابه‌جایی ذره s ، q_s و تکانه‌اش p_s است. هامیلتونی دستگاه برابر است با

$$H = \sum_{s=1}^n \left\{ \frac{1}{2M} p_s^2 + \frac{1}{2} C (q_{s+1} - q_s)^2 \right\} \quad (1)$$

هامیلتونی نوسانگر هماهنگ عبارت است از

$$H = \frac{1}{2M} p^2 + \frac{1}{2} C x^2 \quad (2)$$

و ویژه‌مقدارهای انرژی، وقتی $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ عبارت‌اند از

$$\epsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (3)$$

مسئله ویژه‌مقداری را نیز برای زنجیره‌ای با هامیلتونی متفاوت (۱) کاملاً می‌توان حل کرد. برای حل رابطه (۱) یک تبدیل فوریه از مختصات q_s, p_s به مختصات Q_k, P_k ، که مختصات فونونی معروف‌اند، انجام می‌دهیم.

مختصات فونونی

در تمامی مسائل شبکه‌ی دوره‌ای، تبدیل مختصات ذره‌ای q_s به مختصات فونونی Q_k به‌کار می‌رود. قرار می‌دهیم

$$q_s = N^{-1/2} \sum_k Q_k \exp(iksa) \quad (4)$$

متناظر با تبدیل وارون

$$Q_k = N^{-1/2} \sum_s q_s \exp(-iksa) \quad (5)$$

در اینجا مقادیر N بردار موج k ، که با شرط مرزی دوره‌ای $q_s = q_{s+N}$ مجاز است، توسط رابطه زیر ارائه می‌شوند

$$k = 2\pi n/Na; \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \left(\frac{1}{2}N - 1 \right), \frac{1}{2}N \quad (6)$$

به تبدیل تکانه ذره p_s به تکانه P_k ، همیوگ کانونی مختصات Q_k ، نیاز داریم. این تبدیل برابر است با

$$p_s = N^{-1/2} \sum_k P_k \exp(-iksa); \quad P_k = N^{-1/2} \sum_x p_s \exp(iksa) \quad (7)$$

این نتیجه کاملاً همان نیست که به‌سادگی از درج p به جای q و P به جای Q در روابط (۴) و (۵) به‌دست می‌آید، زیرا k و $-k$ در روابط (۴) و (۷) با یکدیگر تعویض شده‌اند.

ثابت می‌کنیم که انتخاب P_k و Q_k در رابطهٔ جابه‌جایی کوانتومی متغیرهای کانونی صدق می‌کند. جابه‌جاگر زیر را تشکیل می‌دهیم

$$[Q_k, P_{k'}] = N^{-1} \left[\sum_r q_r \exp(-ikra), \sum_s p_s \exp(ik'sa) \right] \quad (۸)$$

$$= N^{-1} \sum_r \sum_s [q_r, p_s] \exp[-i(kr - k's)a]$$

از آنجا که عملگرهای q, p همیوگ‌اند، در این رابطهٔ جابه‌جایی صدق می‌کنند

$$[q_r, p_s] = i\hbar\delta(r, s) \quad (۹)$$

که در آن $\delta(r, s)$ نماد دلتای کرونکر است.

بدین ترتیب رابطهٔ (۸) به صورت زیر درمی‌آید

$$[Q_k, P_{k'}] = N^{-1} i\hbar \sum_r \exp[-i(k - k')ra] = i\hbar\delta(k, k') \quad (۱۰)$$

بدین ترتیب P_k, Q_k نیز متغیرهای همیوگ‌اند. در اینجا جمع‌زنی به صورت زیر محاسبه شده است

$$\sum_r \exp[-i(k - k')ra] = \sum_r \exp[-i\frac{2\pi}{N}(n - n')r] = N\delta(n, n') = N\delta(k, k') \quad (۱۱)$$

که در آن از رابطهٔ (۶) و یک نتیجهٔ استاندارد برای رشتهٔ متناهی موجود در رابطهٔ (۱۱) استفاده شده است. تبدیلات (۷) و (۴) را روی هامیلتونی (۱) انجام می‌دهیم و از جمع‌بندی (۱۱) استفاده می‌کنیم:

$$\sum_s p_s^\dagger = N^{-1} \sum_s \sum_k \sum_{k'} P_k P_{k'} \exp[-i(k + k')sa] \quad (۱۲)$$

$$= \sum_k \sum_{k'} P_k P_{k'} \delta(-k, k') = \sum_k P_k P_{-k};$$

$$\sum_s (q_{s+1} - q_s)^\dagger = N^{-1} \sum_s \sum_k \sum_{k'} Q_k Q_{k'} \exp(ik'sa) [\exp(ika) - 1]$$

$$\times \exp(ik'sa) [\exp(ik'a) - 1] = \frac{2}{k} \sum_k Q_k Q_{-k} (1 - \cos ka) \quad (۱۳)$$

بدین ترتیب هامیلتونی (۱) برحسب مختصات فونونی تبدیل می‌شود به

$$H = \sum_k \left\{ \frac{1}{2M} P_k P_{-k} + C Q_k Q_{-k} (1 - \cos ka) \right\} \quad (۱۴)$$

اگر نماد ω_k را، که با رابطه زیر تعریف می‌شود، معرفی کنیم

$$\omega_k \equiv (2C/M)^{1/2} (1 - \cos ka)^{1/2} \quad (15)$$

هامیلتونی فونونی به صورت زیر خواهد بود

$$H = \sum_k \left\{ \frac{1}{2M} P_k P_{-k} + \frac{1}{2} M \omega_k^2 Q_k Q_{-k} \right\} \quad (16)$$

معادله حرکت عملگر مختصه فونونی Q_k با دستورالعمل استاندارد مکانیک کوانتومی به دست می‌آید:

$$i\hbar \dot{Q}_k = [Q_k, H] = i\hbar P_{-k}/M \quad (17)$$

که در آن H از رابطه (۱۴) داده می‌شود، از آن گذشته با استفاده از جابه‌جاگر رابطه (۱۷)،

$$i\hbar \ddot{Q}_k = [\dot{Q}_k, H] = M^{-1} [P_{-k}, H] = i\hbar \omega_k^2 Q_k \quad (18)$$

در نتیجه

$$\ddot{Q}_k + \omega_k^2 Q_k = 0 \quad (19)$$

این رابطه معادله حرکت نوسانگر هماهنگ با بسامد ω_k است. ویژه‌مقادیر انرژی نوسانگر هماهنگ کوانتومی عبارت‌اند از

$$\epsilon_k = \left(n_k + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_k \quad (20)$$

که در آن عدد کوانتومی $n_k = 0, 1, 2, \dots$ انرژی کل دستگاه برای تمامی فوتونها عبارت است از

$$U = \sum_k \left(n_k + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_k \quad (21)$$

این نتیجه، کوانتس انرژی امواج کشسان را روی یک خط نشان می‌دهد.

عملگرهای آفرینش و نابودی

در محاسبات پیشرفته مفید است که هامیلتونی (۱۶) به شکل مجموعه‌ای از نوسانگرهای هماهنگ تبدیل

شود:

$$H = \sum_k \hbar \omega_k \left(a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \right) \quad (22)$$

در اینجا a_k, a_k^+ عملگرهای نوسانگر هماهنگ اند، که به عملگرهای آفرینش و نابودی یا عملگرهای بوزونی نیز معروف اند. این تبدیل در ادامه به دست می آید.

عملگر آفرینش بوزونی a^+ که «فونون می آفریند»، با این ویژگی تعریف می شود که وقتی بر یک حالت نوسانگر هماهنگ با عدد کوانتومی n عمل می کند، داریم:

$$a^+|n\rangle = (n+1)^{1/2}|n+1\rangle \quad (23)$$

و عملگر نابودی بوزونی a که «فونون را از بین می برد» با این ویژگی تعریف می شود

$$a|n\rangle = n^{1/2}|n-1\rangle \quad (24)$$

در نتیجه:

$$a^+a|n\rangle = a^+n^{1/2}|n-1\rangle = n|n\rangle \quad (25)$$

به طوری که $|n\rangle$ ویژه حالتی از عملگر a^+a با ویژه مقدار درست n ، به نام عدد کوانتومی یا عدد اشغال نوسانگر، است. وقتی مد فونونی k در ویژه حالتی با شاخص n_k است، می توان گفت تعداد n_k فونون در این مد وجود دارد. ویژه مقدارهای معادله (۲۲) عبارتند از $U = \sum (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_k$ ، که با رابطه (۲۱) سازگارند. با توجه به آنکه

$$aa^+|n\rangle = a(n+1)^{1/2}|n+1\rangle = (n+1)|n\rangle \quad (26)$$

جابه جاگر عملگرهای موج بوزونی a_k و a_k^+ این رابطه را برآورده می کند

$$[a, a^+] \equiv aa^+ - a^+a = 1 \quad (27)$$

هنوز باید ثابت کرد که هامیلتونی (۱۶) را می توان مثل (۱۹) برحسب عملگرهای فونونی a_k, a_k^+

بیان کرد. این کار را می توان توسط تبدیل زیر انجام داد

$$a_k^+ = (2\hbar)^{-1/2}[(M\omega_k)^{1/2}Q_{-k} - i(M\omega_k)^{-1/2}P_k] \quad (28)$$

$$a_k = (2\hbar)^{-1/2}[(M\omega_k)^{1/2}Q_k + i(M\omega_k)^{-1/2}P_{-k}] \quad (29)$$

روابط وارون عبارتند از

$$Q_k = (\hbar/2M\omega_k)^{1/2}(a_k + a_{-k}^+) \quad (30)$$

$$P_k = i(\hbar M\omega_k/2)^{1/2}(a_k^+ - a_{-k}) \quad (31)$$

به کمک روابط (۴)، (۵)، و (۲۹) عملگر مکان ذره به این شکل می‌شود

$$q_s = \sum_k (\hbar/2NM\omega_k)^{1/2} [a_k \exp(iks) + a_k^+ \exp(-iks)] \quad (32)$$

این معادله عملگر جابه‌جایی ذره را به عملگرهای آفرینش و نابودی مربوط می‌سازد. برای دستیابی به رابطه (۲۹) از (۲۸)، از ویژگیهای زیر استفاده می‌کنیم

$$Q_{-k}^+ = Q_k; \quad P_{-k}^+ = P_k \quad (33)$$

این ویژگیها از روابط (۵) و (۷) با استفاده از این در بایست مکانیک کوانتومی به دست می‌آیند، که عملگرهای q_s و p_s هرمیتی‌اند:

$$q_s = q_s^+; \quad p_s = p_s^+ \quad (34)$$

در این صورت رابطه (۲۸) از تبدیلهای (۴)، (۵)، و (۷) ناشی می‌شود. ثابت می‌کنیم که رابطه جابه‌جایی (۳۳) با عملگرهای تعریف شده در روابط (۲۸) و (۲۹) برآورده می‌شود:

$$[a_k, a_k^+] = (2\hbar)^{-1} (M\omega_k [Q_k, Q_{-k}] - i[Q_k, P_k] + i[P_{-k}, Q_{-k}] + [P_{-k}, P_k]/M\omega_k) \quad (35)$$

از رابطه (۱۰) با استفاده از $[Q_k, P_{k'}] = i\hbar\delta(k, k')$ داریم

$$[a_k, a_{k'}^+] = \delta(k, k') \quad (36)$$

آنچه باقی می‌ماند آن است که نشان دهیم عبارتهای (۱۶) و (۲۲) ی هامیلتونی فونونی یکسان‌اند. از رابطه (۱۵) برمی‌آید که $\omega_k = \omega_{-k}$ ، و در نتیجه داریم

$$\hbar\omega_k (a_k^+ a_k + a_{-k}^+ a_{-k}) = \frac{1}{2M} (P_k P_{-k} + P_{-k} P_k) + \frac{1}{4} M\omega_k^2 (Q_k Q_{-k} + Q_{-k} Q_k)$$

این رابطه یکسان بودن عبارت (۱۴) و (۲۲) را برای H نشان می‌دهد. بسامد

$$\omega_k = (2C/M)^{1/2} (1 - \cos ka)^{1/2}$$

در رابطه (۱۵) با بسامد کلاسیکی مد نوسانگر با بردار موج k قابل بازشناسی است.

پیوست د

تابع توزیع فرمی-دیراک

تابع توزیع فرمی-دیراک^۱ را می‌توان در چند مرحله با کاربرد رهیافتی مدرن در مکانیک آماری به دست آورد. در اینجا این استدلال را خلاصه می‌کنیم. نمادگذاری به‌گونه‌ای است که آنتروپی متعارف S به آنتروپی بنیادی σ توسط $S = k_B \sigma$ و دمای کلوین T به دمای بنیادی τ توسط $\tau = k_B T$ مربوط می‌شود، که در آن k_B ضریب بولتزمن و برابر با 1.38066×10^{-23} JK است.

کمیت‌های مهم عبارت‌اند از آنتروپی، دما، ضریب بولتزمن، پتانسیل شیمیایی، ضریب گیبس، و توابع توزیع. آنتروپی مقیاسی از تعداد حالت‌های کوانتومی دسترس‌پذیر برای یک دستگاه بسته می‌تواند در هر یک از این حالت‌های کوانتومی باشد و (فرض می‌کنیم) با احتمال مساوی و در هر یک از این حالت‌ها یافت شود. فرض بنیادی آن است که حالت‌های کوانتومی برای دستگاه، دسترس‌پذیر یا دسترس‌ناپذیرند، و اینکه دستگاه با احتمال مساوی در هر یک از حالت‌های دسترس‌پذیر می‌تواند وجود داشته باشد. اگر g

۱. در این پیوست تا حدود قابل ملاحظه‌ای از کتاب زیر استفاده شده است

دستگاه دسترس پذیر وجود داشته باشد، آنتروپی به صورت $\sigma = \log g$ تعریف می شود. بنابراین آنتروپی ای که چنین تعریف می شود، تابعی از انرژی U ، تعداد ذرات N ، و حجم V دستگاه است. دو دستگاه، هر یک با انرژی مشخص، هنگامی که با یکدیگر در تماس گرمایی قرار می گیرند، می توانند انرژی مبادله کنند؛ انرژی کل آنها ثابت باقی می ماند، ولی قیدهای روی انرژیهای هر یک برداشته می شود. انتقال انرژی در یک جهت، یا شاید در جهت دیگر، می تواند حاصل ضرب $g_1 g_2$ را که مقیاسی از تعداد حالتها دسترس پذیر دستگاههای مرکب است، افزایش دهد. آنچه فرض بنیادی می نامیم، نتیجه را به طرف تخصیصی از انرژی کل می کشاند که تعداد حالتها دسترس پذیر را بیشینه کند؛ هرچه این تعداد بیشتر باشد، بهتر و محتملتر است. این بیان هسته اصلی قانون افزایش آنتروپی است، که بیان عام قانون دوم ترمودینامیک است.

دو دستگاه را در تماس گرمایی قرار داده ایم به طوری که انرژی مبادله کنند. محتملترین پیامد این رویارویی چیست؟ یک دستگاه در اثر کاهش انرژی دستگاه دیگر انرژی به دست می آورد و در این فاصله آنتروپی کل دو دستگاه افزایش می یابد. سرانجام برای انرژی کل معلومی آنتروپی بیشینه می شود. مشکل نیست که نشان دهیم این بیشینه وقتی حاصل می شود که مقدار $(\partial\sigma/\partial U)_{N,V}$ در یک دستگاه برابر مقدار همین کمیت در دستگاه دوم است. این ویژگی تساوی برای دو دستگاه در تماس گرمایی همان ویژگی است که از دما انتظار داریم. در نتیجه، دمای بنیادی τ با رابطه زیر تعریف می شود

$$\frac{1}{\tau} \equiv \left(\frac{\partial\sigma}{\partial U} \right)_{N,V} \quad (1)$$

با استفاده از $1/\tau$ مطمئن می شویم که انرژی از τ بالا به τ پایین شارش می کند و به هیچ رابطه پیچیدهتری نیاز نیست.

اکنون مثال بسیار ساده ای از ضریب بولتزمن در نظر می گیریم. فرض کنید یک دستگاه کوچک را فقط با دو حالت، یکی در انرژی 0 و دیگری در انرژی ϵ ، در تماس گرمایی با یک دستگاه بزرگ، که آن را منبع می نامیم، قرار دهیم. انرژی کل دستگاههای مرکب U است، وقتی دستگاه کوچک در حالت انرژی صفر باشد، این منبع دارای انرژی U است و برای آن تعداد $g(U_0)$ حالت موجود است. وقتی دستگاه کوچک در حالت انرژی ϵ است، این منبع انرژی $U - \epsilon$ را خواهد داشت و تعداد $g(U_0 - \epsilon)$ حالت برای آن دسترس پذیر است. با در نظر گرفتن فرض بنیادی، نسبت احتمال یافتن دستگاه کوچک با انرژی ϵ به احتمال یافتن آن در انرژی صفر عبارت است از

$$\frac{P(\epsilon)}{P(0)} = \frac{g(U_0 - \epsilon)}{g(U_0)} = \frac{\exp(\sigma(U_0 - \epsilon))}{\exp(\sigma U_0)} \quad (2)$$

با استفاده از تعریف (۱) دربارهٔ دما، آنتروپی منبع، σ ، را می‌توان به صورت رشتهٔ تیلور بسط داد.

$$\sigma(U_0 - \epsilon) \simeq \sigma(U_0) - \epsilon(\partial\sigma/\partial U_0) = \sigma(U_0) - \epsilon/\tau \quad (۳)$$

از جمله‌های مرتبهٔ بالاتر در این بسط می‌توان چشم پوشید. با حذف جملهٔ $\exp[(\sigma U_0)]$ ، که در صورت و مخرج رابطهٔ (۲) ظاهر می‌شود، پس از جانشینی رابطهٔ (۳) داریم

$$P(\epsilon)/P(0) = \exp(-\epsilon/\tau) \quad (۴)$$

این ا همان نتیجهٔ بولتزمن است. برای نشان دادن کاربرد آن، انرژی میانگین گرمایی $\langle \epsilon \rangle$ ی دستگاه دو حالتی را که در تماس گرمایی با منبعی در دمای τ است، محاسبه می‌کنیم:

$$\langle \epsilon \rangle = \sum_i \epsilon_i P(\epsilon_i) = 0 \cdot P(0) + \epsilon P(\epsilon) = \frac{\epsilon \exp(-\epsilon/\tau)}{1 + \exp(-\epsilon/\tau)} \quad (۵)$$

که در آن شرط بهنجارش را روی مجموع احتمال اعمال کرده‌ایم:

$$P(0) + P(\epsilon) = 1 \quad (۶)$$

این استدلال را می‌توان بی‌درنگ برای پیدا کردن انرژی میانگین یک نوسانگر هماهنگ در دمای τ ، مانند قانون پلانک، تعمیم داد.

مهمترین تعمیم این نظریه در مورد دستگاههایی است، که می‌توانند، علاوه بر انرژی، ذرات را به منبع منتقل کنند. برای دو دستگاه در تماس پخشی و گرمایی، آنتروپی نسبت به انتقال ذرات و نیز انتقال انرژی بیشینه می‌شود. نه تنها $(\partial\sigma/\partial U)_{N,V}$ ، بلکه $(\partial\sigma/\partial N)_{U,V}$ نیز باید در دو دستگاه برابر باشد، که در آن N تعداد ذرات از یک گونهٔ معین است. این شرط تساوی جدید موجب معرفی^۱ پتانسیل شیمیایی μ می‌شود:

$$-\frac{\mu}{\tau} = \left(\frac{\partial\sigma}{\partial N} \right)_{U,V} \quad (۷)$$

برای دو دستگاه در تماس گرمایی و پخشی، $\tau_1 = \tau_2$ و $\mu_1 = \mu_2$. علامت منها در رابطهٔ (۷) برای تضمین آن است که وقتی تعادل حاصل می‌شود، جهت شارش از پتانسیل شیمیایی بالا به پتانسیل شیمیایی پایین است.

ضریب گیبس تعمیمی از ضریب بولتزمن رابطهٔ (۴) است و ما را در بررسی دستگاههایی که ذرات را منتقل می‌کنند، مجاز می‌دارد. ساده‌ترین مثال، دستگاهی با دو حالت است، یکی با هیچ ذره و انرژی

صفر و دیگری با یک ذره و انرژی ϵ . این دستگاه در تماس با منبعی با دمای τ و پتانسیل شیمیایی μ است. رابطه (۳) را برای آنتروپی منبع بسط می‌دهیم:

$$\begin{aligned}\sigma(U_0 - \epsilon; N_0 - 1) &= \sigma(U_0; N_0) - \epsilon(\partial\sigma/\partial U_0) - 1 \cdot (\partial\sigma/\partial N_0) \\ &= \sigma(U_0; N) - \epsilon/\tau + \mu/\tau\end{aligned}\quad (8)$$

با مانستگى با رابطه (۴)، ضریب گیبس را به صورت نسبت احتمال اشغال دستگاه با یک ذره در انرژی ϵ به احتمال اینکه دستگاه در انرژی صفر اشغال نشده باشد، داریم

$$P(1, \epsilon)/P(0, 0) = \exp[(\mu - \epsilon)/\tau] \quad (9)$$

پس از بهنجارسازی، نتیجه (۹) به آسانی به صورت زیر بیان می‌شود

$$P(1, \epsilon) = \frac{1}{\exp[(\epsilon - \mu)/\tau] + 1} \quad (10)$$

که تابع توزیع فرمی-دیراک است.

پیوست ه

به دست آوردن معادله dk/dt

روش به دست آوردن ساده و دقیق dk/dt که در زیر می آید منسوب به کرومر^۱ است. در مکانیک کوانتومی، برای هر عملگر A داریم

$$d\langle A \rangle / dt = (i/\hbar) \langle [H, A] \rangle \quad (۱)$$

که در آن H هامیلتونی است.^۲

فرض می کنیم A عملگر انتقالی شبکه T باشد که چنین تعریف می شود

$$Tf(x) = f(x + a) \quad (۲)$$

که در آن a بردار پایه، در اینجا یک بعدی، است. در تابع بلوخ

$$T\psi_k(x) = \exp(ika)\psi_k(x) \quad (۳)$$

1. kroemer

۲. مقاله زیر را نیز ملاحظه کنید:

C. L. Cook, American J. Phys. 55, 953 (1987).

این نتیجه معمولاً برای نوار نوشته می‌شود، ولی حتی اگر ψ_k یک ترکیب خطی حالت‌های بلوخ از هر تعداد نوار باشد نیز، به شرط آنکه همه نوارهای در طرح منطقه کاهش یافته دارای بردار موج یکسان k باشند، صادق است.

هامیلتونی بلور H_0 با عملگر انتقال شبکه T جابه‌جا می‌شود، در نتیجه $[H_0, T] = 0$. اگر یک نیروی خارجی یکنواخت F اضافه کنیم،

$$H = H_0 - Fx \quad (4)$$

و

$$[H, T] = FaT \quad (5)$$

با استفاده از روابط (۱) و (۵).

$$d\langle T \rangle / dt = (i/\hbar)(Fa)\langle T \rangle \quad (6)$$

با استفاده از رابطه (۶)

$$\langle T \rangle^* d\langle T \rangle / dt = (iFa/\hbar) |\langle T \rangle|^2;$$

$$\langle T \rangle d\langle T^* \rangle / dt = -(iFa/\hbar) |\langle T \rangle|^2$$

و با جمع این دو رابطه داریم

$$d|\langle T \rangle|^2 / dt = 0 \quad (7)$$

این رابطه معادله دایره در صفحه مختلط است. محورهای مختصات در این صفحه بخشهای حقیقی و موهومی ویژه‌مقدار $\exp(ika)$ اند. اگر $\langle T \rangle$ از آغاز روی دایره واحد باشد، روی همان دایره واحد باقی خواهد ماند.

برای ψ هایی که در شرایط مرزی دوره‌ای صدق می‌کنند، $\langle T \rangle$ تنها هنگامی می‌تواند روی دایره واحد قرار داشته باشد که ψ_k تک‌تابع بلوخ باشد، یا برهم‌نهی از توابع بلوخ از نوارهای مختلف ولی با k کاهش یافته یکسان باشد.

هنگامی که $\langle T \rangle$ حول دایره واحد حرکت می‌کند، بردار موج k برای مؤلفه‌های ψ_k در تمامی نوارها دقیقاً با آهنگ یکسان تغییر می‌کند. با $\langle T \rangle = \exp(ika)$ ، با استفاده از رابطه (۶) داریم

$$ia dk/dt = iFa/\hbar \quad (8)$$

یا نتیجه دقیق زیر را داریم

$$dk/dt = F/\hbar \quad (9)$$

این مسئله بدان معنا نیست، که اختلاط بین نواری (مانند تونل زنی زرن) تحت نفوذ میدانهای الکتریکی اعمالی رخ نمی دهد؛ بلکه دقیقاً به این معناست که k برای هر مؤلفه بسته موج با آهنگ ثابت تحول پیدا می کند. این نتیجه به آسانی به ۳ بعد تعمیم می یابد.

پیوست و

معادله ترابرد بولتزمان

نظریه کلاسیکی فرایندهای ترابرد بر مبنای معادله ترابرد بولتزمان است. در فضای شش بعدی مختصات دکارتی \mathbf{r} و سرعت \mathbf{v} کار می‌کنیم. تابع توزیع کلاسیکی $f(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ با رابطه زیر تعریف می‌شود

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v} = \text{تعداد ذرات در} \quad (1)$$

معادله بولتزمان با استدلالی در ادامه به دست می‌آید. اثر تغییر زمان dt را روی تابع توزیع بررسی می‌کنیم. از قضیه لیوویل در مکانیک کلاسیک می‌فهمیم که اگر عنصر حجمی را در راستای خط شارش دنبال کنیم، توزیع پایسته است و در غیاب برخوردها:

$$f(t + dt, \mathbf{r} + d\mathbf{r}, \mathbf{v} + d\mathbf{v}) = f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) \quad (2)$$

با در نظر گرفتن برخوردها:

$$f(t + dt, \mathbf{r} + d\mathbf{r}, \mathbf{v} + d\mathbf{v}) - f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = dt(\partial f / \partial t)_{\text{برخورد}} \quad (3)$$

$$dt/(\partial f/\partial t) + d\mathbf{r} \cdot \text{grad}_{\mathbf{r}}f + d\mathbf{v} \cdot \text{grad}_{\mathbf{v}}f = dt(\partial f/\partial t)_{\text{برخورد}} \quad (۴)$$

شتاب $d\mathbf{v}/dt$ را با α نشان می‌دهیم؛ در نتیجه

$$\boxed{\partial f/\partial t + \mathbf{v} \cdot \text{grad}_{\mathbf{r}}f + \alpha \cdot \text{grad}_{\mathbf{v}}f = (\partial f/\partial t)_{\text{برخورد}}} \quad (۵)$$

این رابطه معادلهٔ ترابرد بولتزمن است.

در اغلب مسائل برخورد جملهٔ برخورد $(\partial f/\partial t)$ را می‌توان با معرفی زمان واهلش $\tau_c(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ ، که معادلهٔ زیر تعریف می‌کند، بررسی کرد.

$$(\partial f/\partial t)_{\text{برخورد}} = -(f - f_0)/\tau_c \quad (۶)$$

در اینجا f تابع توزیع در تعادل گرمایی است. τ_c مربوط به زمان واهلش را با τ مربوط به دما اشتباه نکنید. فرض می‌کنیم یک توزیع غیرتعادلی سرعتها توسط نیروهای خارجی که ناگهان جابه‌جا می‌شوند، برقرار شود. در نتیجه واپاشی توزیع به سوی تعادل از رابطهٔ (۶) حاصل می‌شود، که با استفاده از تعریف توزیع داریم $\partial f_0/\partial t = 0$.

$$\frac{\partial(f - f_0)}{\partial t} = -\frac{f - f_0}{\tau_c} \quad (۷)$$

این معادله دارای جواب زیر است

$$(f - f_0)_t = (f - f_0)_{t=0} \exp(-t/\tau_c) \quad (۸)$$

وابستگی τ به \mathbf{r} و \mathbf{v} را استثنا نکرده‌ایم.

روابط (۱)، (۵)، و (۶) را ترکیب می‌کنیم تا معادلهٔ ترابرد بولتزمن را در تقریب زمان واهلش به دست

آوریم:

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + \alpha \cdot \text{grad}_{\mathbf{v}}f + \mathbf{v} \cdot \text{grad}_{\mathbf{r}}f = -\frac{f - f_0}{\tau_c}} \quad (۹)$$

بنا به تعریف در حالت پایا داریم $\partial f/\partial t = 0$.

پخش ذره

دستگاهی همدم را با شیب تراکم ذره در نظر بگیرید. معادلهٔ ترابرد بولتزمن در حالت پایا در تقریب زمان واهلش چنین می‌شود

$$v_x df/dx = -(f - f_0)/\tau_c \quad (10)$$

که در آن تابع توزیع غیرتعادلی f در جهت x تغییر می‌کند. می‌توان رابطهٔ (۱۰) را تا مرتبهٔ اول به صورت زیر نوشت

$$f_1 = f_0 - v_x \tau_c df_0/dx \quad (11)$$

که در آن $\partial f/\partial x$ را با df_0/dx جایگزین کرده‌ایم. در صورت تمایل می‌توان محاسبه را برای جوابهای مرتبهٔ بالاتر تکرار کرد. در نتیجه جواب مرتبهٔ دوم عبارت است از

$$f_2 = f_0 - v_x \tau_c df_1/dx = f_0 - v_x \tau_c df_0/dx + v_x^2 \tau_c^2 d^2 f_0/dx^2 \quad (12)$$

تکرار را می‌توان در بررسی آثار غیرخطی به‌کار برد.

توزیع کلاسیکی

فرض می‌کنیم f_0 تابع توزیع در حد کلاسیکی باشد:

$$f_0 = \exp[(\mu - \epsilon)/\tau] \quad (13)$$

آزادیم هر بهنجارش تابع توزیعی که راحت‌تر است اختیار کنیم، زیرا معادلهٔ ترابرد در f و f_0 خطی است. در اینجا علی‌رغم بهنجارش به صورت رابطهٔ (۱) می‌توانیم آن را با رابطهٔ (۱۳) تعریف کنیم. در نتیجه

$$df_0/dx = (df_0/d\mu)(d\mu/dx) = (f_0/\tau)(d\mu/dx) \quad (14)$$

و جواب مرتبهٔ اول رابطهٔ (۱۱) برای توزیع غیرتعادلی چنین می‌شود

$$f = f_0 - (v_x \tau_c f_0/\tau)(d\mu/dx) \quad (15)$$

چگالی شار ذره در جهت x عبارت است از

$$J_n^x = \int v_x f D(\epsilon) d\epsilon \quad (16)$$

که در آن $D(\epsilon)$ چگالی حالت‌های الکترونی در واحد حجم در گسترهٔ انرژی واحد است:

$$D(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2M}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon^{1/2} \quad (17)$$

در نتیجه

$$J_n^x = \int v_x f \cdot D(\epsilon) d\epsilon - (d\mu/dx) \int (v_x^2 \tau_c f \cdot / \tau) D(\epsilon) d\epsilon \quad (18)$$

انتگرال اول صفر می‌شود، زیرا v_x تابعی فرد و f تابعی زوج از v_x است. این مسئله صفرشدن شار خالص ذره را برای توزیع تعادلی f قطعی می‌کند. انتگرال دوم صفر نخواهد شد. قبل از محاسبهٔ انتگرال دوم، این فرصت را داریم که از آنچه دربارهٔ وابستگی زمان واهلش τ_c به سرعت می‌دانیم، استفاده کنیم. فقط برای مثال فرض می‌کنیم τ_c ثابت و مستقل از سرعت است؛ در نتیجه τ_c را می‌توان از انتگرال بیرون آورد:

$$J_n^x = -(d\mu/dx)(\tau_c/\tau) \int v_x^2 f \cdot D(\epsilon) d\epsilon \quad (19)$$

انتگرال را می‌توان چنین نوشت:

$$\frac{1}{3} \int v^2 f \cdot D(\epsilon) d\epsilon = \frac{2}{3M} \int \left(\frac{1}{2} M v^2 \right) f \cdot D(\epsilon) d\epsilon = n\tau/M \quad (20)$$

زیرا انتگرال درست برابر چگالی انرژی جنبشی ذرات، $\frac{2}{3}n\tau$ ، است. در اینجا $\int f \cdot D(\epsilon) d\epsilon = n$ برابر تراکم است. چگالی شار ذره عبارت است از

$$J_n^x = -(n\tau_c/M)(d\mu/dx) = -(\tau_c\tau/M)(dn/dx) \quad (21)$$

زیرا

$$\mu = \tau \log n + \text{ثابت} \quad (22)$$

نتیجهٔ (۲۱) شکل معادلهٔ پخش با ضریب پخش زیر است:

$$D_n = \tau_c\tau/M = \frac{1}{3} \langle v^2 \rangle \tau_c \quad (23)$$

فرض ممکن دیگر دربارهٔ زمان واهلش آن است که با سرعت نسبت عکس داشته باشد، همانند $\tau_c = l/v$ ، که در آن l مسافت آزاد میانگین ثابت است. به جای رابطهٔ (۱۹) داریم

$$J_n^x = -(d\mu/dx)(l/\tau) \int (v_x^2/v) f \cdot D(\epsilon) d\epsilon \quad (24)$$

و اکنون انتگرال را می‌توان چنین نوشت

$$\frac{1}{\tau} \int v f_0 D(\epsilon) d\epsilon = \frac{1}{\tau} n \bar{c} \quad (25)$$

که در آن \bar{c} سرعت میانگین است. بنابراین

$$J_n^x = -\frac{1}{\tau} (l \bar{c} n / \tau) (d\mu / dx) = -\frac{1}{\tau} l \bar{c} (dn / dx) \quad (26)$$

و ضریب پخش عبارت است از

$$D_n = \frac{1}{\tau} l \bar{c} \quad (27)$$

توزیع فرمی-دیراک

تابع توزیع عبارت است از

$$f_0 = \frac{1}{\exp[(\epsilon - \mu) / \tau] + 1} \quad (28)$$

برای تشکیل df_0 / dx ، مثل رابطه (۱۴)، به مشتق $df_0 / d\mu$ نیاز داریم. در زیر استدلال می‌کنیم که در دماهای پایین، $\mu \ll \tau$:

$$df_0 / d\mu = \delta(\epsilon - \mu) \quad (29)$$

در اینجا δ تابع دلتای دیراک است و برای تابع عام $F(\epsilon)$ دارای این ویژگی است که

$$\int_{-\infty}^{\infty} F(\epsilon) \delta(\epsilon - \mu) d\epsilon = F(\mu) \quad (30)$$

حال انتگرال $\int_{-\infty}^{\infty} F(\epsilon) (df_0 / d\mu) d\epsilon$ را مورد بررسی قرار می‌دهیم. در دماهای پایین، برای $\epsilon \simeq \mu$ بسیار بزرگ و برای مقادیر دیگر انرژی کوچک است. به استثنای مواردی که در نزدیکی μ تابع $F(\epsilon)$ به سرعت تغییر می‌کند، می‌توان $F(\epsilon)$ را با مقدار $F(\mu)$ به خارج از انتگرال برد:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} F(\epsilon) (df_0 / d\mu) d\epsilon &\simeq F(\mu) \int_{-\infty}^{\infty} (df_0 / d\mu) d\epsilon = -F(\mu) \int_{-\infty}^{\infty} (df_0 / d\epsilon) d\epsilon \\ &= -F(\mu) [f_0(\epsilon)]_{-\infty}^{\infty} = F(\mu) f_0(0) \end{aligned} \quad (31)$$

که در آن $df_0 / d\mu = -df_0 / d\epsilon$ را به کار برده‌ایم. همچنین $f_0 = 0$ را برای $\epsilon = \infty$ به کار برده‌ایم. در دماهای پایین $f_0(0) \simeq 1$ ؛ در نتیجه طرف راست رابطه (۳۱) درست برابر $F(\mu)$ است، که با تقریب تابع دلتا سازگار است. در نتیجه

$$df_0 / dx = \delta(\epsilon - \mu) d\mu / dx \quad (32)$$

از رابطهٔ (۱۶) چگالی شار ذره عبارت است از

$$J_n^x = -(d\mu/dx)\tau_c \int v_x^2 \delta(\epsilon - \mu) D(\epsilon) d\epsilon \quad (۳۳)$$

که در آن τ_c زمان واهلش در سطح کرهٔ فرمی است. با استفاده از $D(\mu) = 3n/2\epsilon_F$ در صفر مطلق، که در آن $\epsilon_F \equiv \frac{1}{3}mv_F^2$ سرعت v_F را در سطح فرمی تعریف می‌کند. انتگرال دارای مقدار زیر است

$$\frac{1}{3}v_F^2(3n/2\epsilon_F) = n/m \quad (۳۴)$$

بنابراین

$$J_n^x = -(n\tau_c/m)d\mu/dx \quad (۳۵)$$

در صفر مطلق $\mu(0) = (\hbar^2/2m)(3\pi^2n)^{2/3}$ در نتیجه

$$\begin{aligned} d\mu/dx &= \left[\frac{2}{3}(\hbar^2/2m)(3\pi^2)^{2/3}/n^{1/3} \right] dn/dx \\ &= \frac{2}{3}(\epsilon_F/n)dn/dx \end{aligned} \quad (۳۶)$$

به طوری که رابطهٔ (۳۳) به این صورت درمی‌آید

$$J_n^x = -(2\tau_c/3m)\epsilon_F dn/dx = -\frac{1}{3}v_F^2\tau_c dn/dx \quad (۳۷)$$

ضریب پخش ضریب dn/dx است:

$$D_n = \frac{1}{3}v_F^2\tau_c \quad (۳۸)$$

که بسیار شبیه به نتیجهٔ (۲۳) برای توزیع کلاسیکی سرعتهاست. در رابطهٔ (۳۸) زمان واهلش باید در سطح فرمی اختیار شود.

می‌بینیم، جایی که توزیع فرمی-دیراک به کار می‌رود، مانند فلزات، مسائل ترابرد را می‌توان به آسانی تقریب کلاسیکی حل کرد.

رسانندگی الکتریکی

رسانندگی الکتریکی همدمای σ از نتیجهٔ مربوط به ضریب پخش ذرات حاصل می‌شود، به شرط آنکه چگالی شار ذره را در بار ذره، q ، ضرب کنیم و به جای شیب پتانسیل شیمیایی، $d\mu/dx$ ، شیب

$qd\varphi/dx = -qE_x$ مربوط به پتانسیل خارجی را قرار دهیم، که در آن E_x مؤلفه x شدت میدان الکتریکی است. چگالی جریان الکتریکی گاز کلاسیکی با زمان واهلس τ_c از رابطه (۲۱) نتیجه می‌شود:

$$\mathbf{J}_q = (nq^2\tau_c/m)\mathbf{E}; \quad \sigma = nq^2\tau_c/m \quad (39)$$

برای توزیع فرمی-دیراک، با استفاده از رابطه (۳۵) داریم

$$\mathbf{J}_q = (nq^2\tau_c/m)\mathbf{E}; \quad \sigma = nq^2\tau_c/m \quad (40)$$

پیوست ز

پتانسیل برداری، تکانه میدان، و تبدیلات پیمانه‌ای

این بخش به این دلیل مطرح می‌شود، که یافتن توصیف کامل پتانسیل برداری مغناطیسی \mathbf{A} در یک مکان مشکل است و اینکه پتانسیل برداری در ابررسانایی مورد نیاز است. اینکه هامیلتونی ذره‌ای در میدان مغناطیسی به شکلی است که در ادامه از رابطه (۱۸) استخراج شده است، ممکن است معماگونه به نظر

برسد:

$$H = \frac{1}{2M} \left(\mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + Q\varphi \quad (1)$$

که در آن Q ، M ، \mathbf{A} ، و φ به ترتیب بار، جرم، پتانسیل برداری، و پتانسیل الکتروستاتیکی است. این عبارت در مکانیک کلاسیکی و مکانیک کوانتومی معتبر است. از آنجا که انرژی جنبشی ذره توسط میدان مغناطیسی ایستا تغییر نمی‌کند، شاید غیرمنتظره باشد که پتانسیل برداری میدان مغناطیسی وارد هامیلتونی شود. همان‌طور که خواهیم دید، جواب در آن است که تکانه \mathbf{p} شامل دو بخش باشد، تکانه جنبشی آشنای

$$\mathbf{p}_{\text{جنبشی}} = M\mathbf{v} \quad (2)$$

و تکانه پتانسیل یا تکانه میدان

$$\mathbf{p}_{\text{میدان}} = \frac{Q}{c} \mathbf{A} \quad (۳)$$

تکانه کل عبارت است از

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_{\text{جنبشی}} + \mathbf{p}_{\text{میدان}} = M\mathbf{v} + \frac{Q}{c} \mathbf{A} \quad (۴)$$

و انرژی جنبشی برابر است با

$$\frac{1}{2} M v^2 = \frac{1}{2M} (Mv)^2 = \frac{1}{2M} \left(\mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A} \right)^2 \quad (۵)$$

پتانسیل برداری^۱ با رابطه زیر به میدان مغناطیسی مربوط می‌شود

$$\mathbf{B} = \text{curl} \mathbf{A} \quad (۶)$$

فرض می‌کنیم با ماده‌ای غیرمغناطیسی سروکار داریم، در نتیجه \mathbf{H} و \mathbf{B} یکسان بررسی می‌شوند.

معادله‌های لاگرانژی حرکت

دستورالعمل مکانیک کلاسیک برای یافتن هامیلتونی روشن است: برای یافتن هامیلتونی، ابتدا لاگرانژی را به دست می‌آوریم. لاگرانژی در مختصات تعمیم یافته عبارت است از

$$L = \frac{1}{2} M \dot{\mathbf{q}}^2 - Q\varphi(\mathbf{q}) + \frac{Q}{c} \dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{A}(\dot{\mathbf{q}}) \quad (۷)$$

این رابطه درست است، زیرا همان طور که نشان خواهیم داد، منجر به معادله درست حرکت بار در میدانهای ترکیبی الکتریکی و مغناطیسی خواهد شد.

در مختصات دکارتی، معادله حرکت لاگرانژ برابر است با:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \quad (۸)$$

۱. برای بررسی مقدماتی پتانسیل برداری کتاب زیر را ببینید:

و به‌طور مشابه برای y و z همین رابطه را خواهیم داشت. از رابطه (۷) داریم

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -Q \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{Q}{c} \left(\dot{x} \frac{\partial A_x}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial A_y}{\partial x} + \dot{z} \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \quad (9)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = M \dot{x} + \frac{Q}{c} A_x \quad (10)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = M \ddot{x} + \frac{Q}{c} \frac{dA_x}{dt} = M \ddot{x} + \frac{Q}{c} \left(\frac{\partial A_x}{\partial t} + \dot{x} \frac{\partial A_x}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial A_x}{\partial y} + \dot{z} \frac{\partial A_x}{\partial z} \right) \quad (11)$$

بدین ترتیب رابطه (۸) تبدیل می‌شود به

$$M \ddot{x} + Q \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{Q}{c} \left[\frac{\partial A_x}{\partial t} + \dot{y} \left(\frac{\partial A_x}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial x} \right) + \dot{z} \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \right] = 0 \quad (12)$$

یا

$$M \frac{d^2 x}{dt^2} = QE_x + \frac{Q}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]_x \quad (13)$$

یا

$$E_x = -\frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{1}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} \quad (14)$$

$$\mathbf{B} = \text{curl } \mathbf{A} \quad (15)$$

معادله (۱۳) معادله نیروی لورنتس است. با این معادله قطعی است که رابطه (۷) درست است. متذکر می‌شویم که در رابطه (۱۴) \mathbf{E} دارای یک سهم از پتانسیل الکتروستاتیکی و سهم دیگر از مشتق زمانی پتانسیل برداری مغناطیسی \mathbf{A} است.

به‌دست آوردن هامیلتونی

تکانه \mathbf{p} برحسب لاگرانژی به‌صورت زیر تعریف می‌شود، که با رابطه (۴) سازگار است.

$$\mathbf{p} \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} = M \dot{\mathbf{q}} + \frac{Q}{c} \mathbf{A} \quad (16)$$

هامیلتونی $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ با رابطه زیر تعریف می‌شود

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \equiv \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}} - L \quad (17)$$

یا مانند رابطه (۱)

$$H = M \dot{\mathbf{q}}^2 + \frac{Q}{c} \dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{A} - \frac{1}{2} M \dot{\mathbf{q}}^2 + Q\varphi - \frac{Q}{c} \dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{2} M \left(\mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + Q\varphi \quad (18)$$

تکانه میدان

تکانه‌ای که در میدان الکترومغناطیسی ذره متحرکی را در میدان مغناطیسی همراهی می‌کند، با انتگرال حجمی برداری پوینتینگ ارائه می‌شود، طوری که

$$\mathbf{p}_{\text{میدان}} = \frac{1}{4\pi c} \int dV \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad (19)$$

در تقریب غیرنسبیتی با $v \ll c$ کار می‌کنیم، که در آن v سرعت ذره است. در مقادیر کم v/c فرض می‌کنیم \mathbf{B} تنها ناشی از یک چشمه خارجی، ولی \mathbf{E} ناشی از بار ذره باشد. برای بار Q در \mathbf{r}' ,

$$\mathbf{E} = -\nabla\psi; \nabla^2\varphi = -4\pi Q\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (20)$$

بدین ترتیب

$$\mathbf{p}_f = \frac{1}{4\pi c} \int dV \nabla\varphi \times \text{curl } \mathbf{A} \quad (21)$$

به کمک رابطه‌ای برداری داریم

$$\int dV \nabla\varphi \times \text{curl } \mathbf{A} = - \int dV [\mathbf{A} \times \text{curl}(\nabla\varphi) - \mathbf{A} \text{div}\nabla\varphi - (\nabla\varphi) \text{div}\mathbf{A}] \quad (22)$$

ولی $\text{curl}(\nabla\varphi) = 0$ ، و همواره می‌توان پیمانه را طوری برگزید که $d(V)\mathbf{A} = 0$ ، که پیمانه عرضی است.

بدین ترتیب، داریم

$$\mathbf{p}_f = -\frac{1}{4\pi c} \int dV \mathbf{A} \nabla^2\varphi = \frac{1}{c} \int dV \mathbf{A} Q\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{Q}{c} \mathbf{A} \quad (23)$$

این است تعبیر سهم میدان در تکانه کل $\mathbf{p} = M\mathbf{v} + Q\mathbf{A}/c$

تبدیل پیمانه‌ای

فرض کنید $H\psi = \epsilon\psi$ ، که در آن

$$H = \frac{1}{2M} \left(\mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A} \right)^2 \quad (24)$$

تبدیل پیمانه‌ای به \mathbf{A}' را در نظر بگیرید، که

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi \quad (25)$$

که در آن χ کمیتی نرده‌ای است. اکنون $\mathbf{B} = \text{curl } \mathbf{A} = \text{curl } \mathbf{A}'$ زیرا $\text{curl}(\nabla\chi) \equiv 0$ معادله شرویدینگر تبدیل می‌شود به

$$\frac{1}{2M} \left(\mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A}' + \frac{Q}{c} \nabla\chi \right)^2 \psi = \epsilon\psi \quad (26)$$

تابع ψ' به چه صورت باشد تا در معادله زیر با ϵ یکسان در رابطه (۲۶) صدق کند؟

$$\frac{1}{2M} \left(\mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A}' \right)^2 \psi' = \epsilon\psi' \quad (27)$$

معادله (۲۷) هم‌ارز معادله زیر است:

$$\frac{1}{2M} \left(\mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A} - \frac{Q}{c} \nabla\chi \right)^2 \psi' = \epsilon\psi' \quad (28)$$

حل زیر را می‌آزماییم

$$\psi' = \exp(iQ\chi/\hbar c)\psi \quad (29)$$

اکنون

$$p\psi' = \exp(iQ\chi/\hbar c)p\psi + \frac{Q}{c}(\nabla\chi)\exp(iQ\chi/\hbar c)\psi$$

به طوری که

$$\left(\mathbf{p} - \frac{Q}{c} \nabla\chi \right) \psi' = \exp(iQ\chi/\hbar c)p\psi$$

و

$$\frac{1}{2M} \left(\mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A} - \frac{Q}{c} \nabla\chi \right)^2 \psi' = \exp(iQ\chi/\hbar c) \frac{1}{2M} \left(\mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi = \exp(iQ\chi/\hbar c) \epsilon\psi \quad (30)$$

بدین ترتیب $\psi' = \exp(iQ\chi/\hbar c)\psi$ پس از تبدیل پیمانه‌ای (۲۵) در معادله شرویدینگر صدق می‌کند.

انرژی ϵ تحت این تبدیل ناورد است.

تبدیل پیمانه‌ای روی \mathbf{A} صرفاً فاز موضعی تابع موج را تغییر می‌دهد. می‌بینیم که

$$\psi'^* \psi' = \psi^* \psi \quad (31)$$

در نتیجه چگالی بار تحت تبدیل پیمانه‌ای ناورد است.

پیمانه در معادله لندن

به دلیل معادله پیوستگی شار بار الکتریکی در ابررسانا، لازم است

$$\operatorname{div} \mathbf{j} = 0$$

در نتیجه پتانسیل برداری در معادله لندن، $\mathbf{j} = -c\mathbf{A}/4\pi\lambda_L^2$ باید در معادله زیر صدق کند.

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0 \quad (32)$$

همچنین، از فصل مشترک خلا ابررسانا هیچ شار جریانی عبور نمی‌کند. مؤلفه عمودی جریان در عرض فصل مشترک باید صفر باشد: $\hat{j}_n = 0$ ، در نتیجه پتانسیل برداری در معادله لندن باید در رابطه زیر صدق کند.

$$A_n = 0 \quad (33)$$

پیمانه پتانسیل برداری در معادله لندن ابررسانایی باید طوری انتخاب گردد که روابط (۳۲) و (۳۳) برآورده شوند.

پیوست ح

زوجهای کوپر

برای مجموعه کاملی از حالت‌های یک دستگاه دو الکترونی، که در شرایط مرزی مکعبی با حجم واحد صدق می‌کند، این توابع حاصلضربی موج تخت را برمی‌گزینیم

$$\varphi(k_1, k_2; r_1, r_2) = \exp[i(k_1 \cdot r_1 + k_2 \cdot r_2)] \quad (1)$$

فرض می‌کنیم الکترون‌ها دارای اسپین مخالف باشند.
مختصات مرکز جرم و نسبی را معرفی می‌کنیم:

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2}(r_1 + r_2); \quad \mathbf{r} = r_1 - r_2 \quad (2)$$

$$\mathbf{K} = k_1 + k_2; \quad \mathbf{k} = \frac{1}{2}(k_1 - k_2) \quad (3)$$

در نتیجه

$$k_1 \cdot r_1 + k_2 \cdot r_2 = \mathbf{K} \cdot \mathbf{R} + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \quad (4)$$

بدین ترتیب رابطه (۱) تبدیل می‌شود به

$$\sigma(\mathbf{K}, \mathbf{k}; \mathbf{R}, \mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (5)$$

و انرژی جنبشی دستگاه دو الکترونی برابر است با

$$\epsilon_{\mathbf{K}} + E_{\mathbf{k}} = (\hbar^2/m) \left(\frac{1}{4} K^2 + k^2 \right) \quad (6)$$

به‌ویژه به تابعهای حاصلضربی که بردار موج \mathbf{K} ی مرکز جرمشان صفر است، توجه می‌کنیم، به‌طوری که، $k_1 = -k_2$. با برهم‌کنش H_1 بین دو الکترون، مسئله ویژه‌مقداری را برحسب بسط زیر بنا می‌کنیم؛

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (7)$$

معادله شرودینگر عبارت است از

$$(H_0 + H_1 - \epsilon)\chi(\mathbf{r}) = 0 = \sum_{\mathbf{k}'} [(E_{\mathbf{k}'} - \epsilon)g_{\mathbf{k}'} + H_1 g_{\mathbf{k}'}] \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) \quad (8)$$

که در آن H_1 انرژی برهم‌کنش دو الکترون است. در اینجا ϵ ویژه‌مقدار است. حاصلضرب زده‌ای در $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ را تشکیل می‌دهیم تا معادله دیرپای مسئله را به‌دست آوریم:

$$(E_{\mathbf{k}} - \epsilon)g_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{k} | H_1 | \mathbf{k}' \rangle = 0 \quad (9)$$

اکنون جمع را به انتگرال تبدیل می‌کنیم:

$$(E - \epsilon)g(E) + \int dE' g(E') H_1(E, E') N(E') = 0 \quad (10)$$

که در آن $N(E')$ تعداد حالت‌های دو الکترونی با تکانه کل $\mathbf{K} = 0$ و انرژی جنبشی dE' در E' است. اکنون عناصر ماتریسی $H_1(E, E') = \langle \mathbf{k} | H_1 | \mathbf{k}' \rangle$ را در نظر می‌گیریم: بررسیهای این عناصر توسط باردین از این نکته خبر می‌دهد که این عناصر هنگامی مهم‌اند که دو الکترون در یک پوسته نازک انرژی در نزدیکی سطح فرمی محبوس باشند در پوسته‌ای به ضخامت $\hbar\omega_D$ در بالای E_F که در آن ω_D بسامد قطع فونونی دبی است. فرض می‌کنیم که برای E, E' در داخل پوسته داریم:

$$H_1(E, E') = -V \quad (11)$$

و در هر جای دیگر H_1 صفر است. در اینجا فرض می‌شود V مثبت است:

بدین ترتیب با $\epsilon_m = \epsilon_F + \hbar\omega_D$ ، رابطه (۱۰) تبدیل می‌شود به:

$$(E - \epsilon)g(E) = V \int_{\epsilon_F}^{\epsilon_m} dE' g(E') N(E') = C \quad (12)$$

در اینجا C ثابتی مستقل از E است.

از رابطه (۱۲) داریم

$$g(E) = \frac{C}{E - \epsilon} \quad (13)$$

و

$$\lambda = V \int_{\epsilon_F}^{\epsilon_m} dE' \frac{N(E')}{E' - \epsilon} \quad (14)$$

با توجه به اینکه $N(E')$ تقریباً ثابت و در گستره کوچک انرژی بین ϵ_m و ϵ_F برابر با N_F است، آن را از انتگرال بیرون آورده به دست می‌آوریم:

$$\lambda = N_F V \int_{\epsilon_F}^{\epsilon_m} dE' \frac{\lambda}{E' - \epsilon} = N_F V \log \frac{\epsilon_m - \epsilon}{\epsilon_F - \epsilon} \quad (15)$$

ویژه مقدار ϵ در رابطه (۱۵) را به صورت زیر می‌نویسیم

$$\epsilon = \epsilon_F - \Delta \quad (16)$$

که انرژی بستگی Δ ی زوج الکترون را، نسبت به دو الکترون آزاد در سطح فرمی، تعریف می‌کند. بدین ترتیب رابطه (۱۵) تبدیل می‌شود به:

$$\lambda = N_F V \log \frac{\epsilon_m - \epsilon_F + \Delta}{\Delta} = N_F V \log \frac{\epsilon_m - \epsilon_F + \Delta}{\Delta} \quad (17)$$

یا

$$\lambda / N_F V = \log(\lambda + \epsilon_m - \epsilon_F + \Delta) \quad (18)$$

این نتیجه را برای انرژی بستگی زوج کوپر می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\Delta = \frac{\epsilon_m - \epsilon_F + \Delta}{\exp(\lambda / N_F V) - 1} \quad (19)$$

برای V مثبت (برهم‌کنش جاذب)، انرژی دستگاه با برانگیختگی زوج الکترون در بالای تراز فرمی پایین می‌آید. بنابراین گاز فرمی به طور مهمی ناپایدار است. انرژی بستگی (۱۹) ارتباط نزدیکی با گاف انرژی ابررسانایی E_g دارد. محاسبات BCS نشان می‌دهد که چگالی بالایی از زوجهای کوپر ممکن است در فلز تشکیل شود.

پیوست ط

معادله گینزبرگ-لاندائو (GL)

برای نظریه فاخر مربوط به پدیده‌شناسی حالت ابرسانا و تغییرات فضایی پارامتر نظم در آن حالت، به گینزبرگ^۱ و لاندائو^۲ مدیونیم. ابریکاسوف^۳ در ادامه این نظریه ساختار حالت گردابی را توصیف می‌کند، که در فناوری آهنربای ابرسانا بهره‌برداری می‌شود. از جذایبتهای نظریه GL آن است که طول هموسی و تابع موجی را که در فصل ۱۲ به‌کار رفت، به‌طور کاملاً طبیعی مطرح می‌کند. پارامتر نظم $\psi(\mathbf{r})$ را با این ویژگی تعریف می‌کنیم:

$$\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = n_S(\mathbf{r}) \quad (۱)$$

که در آن $n_S(\mathbf{r})$ غلظت موضعی الکترونهای ابررسانشی است. فرمولبندی ریاضی تعریف تابع $\psi(\mathbf{r})$ از نظریه BCS می‌آید. نخست عبارتی برای چگالی انرژی آزاد $F_S(\mathbf{r})$ در ابررسانا، به‌صورت تابعی از پارامتر نظم می‌نویسیم. فرض می‌کنیم که در اطراف دمای گذار، به‌طور کلی، داریم

$$F_S(\mathbf{r}) = F_N - \alpha |\psi|^2 + \frac{1}{4} \beta |\psi|^4 + (\frac{1}{2} m) |(-i\hbar \nabla - qA/c)\psi|^2 - \int^{B_a} \mathbf{M} \cdot d\mathbf{B}_a \quad (۲)$$

با ثابتهای مثبت پدیده‌شناختی α, β, m که بعداً درباره آنها بیشتر خواهیم گفت. در اینجا:

۱. چگالی انرژی آزاد حالت عادی است.

۲. $-\alpha|\psi|^2 + \frac{1}{2}\beta|\psi|^4$ عبارت نوعی لاندائو برای بسط انرژی آزاد برحسب یک پارامتر نظم است

که در گذار فاز مرتبه دو صفر می‌شود. این جمله را می‌توان به صورت $\frac{1}{2}\beta n_S^2 - \alpha n_S$ در نظر گرفت و به تنهایی هرگاه $n_S(T) = \alpha/\beta$ ، نسبت به n_S کمینه است.

۳. جمله برحسب $|\text{grad } \psi|^2$ افزایش انرژی ناشی از تغییرات فضایی پارامتر نظم را نمایش می‌دهد.

این جمله به صورت انرژی جنبشی در مکانیک کوانتومی است.^۱ تکانه جنبشی $-i\hbar\nabla$ با تکانه میدانی $-q\mathbf{A}/c$ همراه است که ناوردایی پیمانه‌ای انرژی آزاد را، به گونه پیوسته، تضمین می‌کند. در اینجا برای

زوج الکترون داریم $q = -2e$.

۴. جمله $-\int \mathbf{M} \cdot d\mathbf{B}_a$ با مغناطیدگی ساختگی $\mathbf{M} = (\mathbf{B} - \mathbf{B}_a)/4\pi$ ، افزایش انرژی آزاد ناشی

از طرد شار مغناطیسی از ابررسانا را نمایش می‌دهد.

در ادامه هر یک از جمله‌های مجزای رابطه (۲) را با مثالهایی نمایش خواهیم داد. نخست معادله (۶)

GL را استخراج می‌کنیم. انرژی آزاد کل $\int dV F_S(\mathbf{r})$ را نسبت به ورودشهای تابع $\psi(\mathbf{r})$ کمینه می‌کنیم. داریم

$$\delta F_S(\mathbf{r}) = [-\alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi + (\frac{1}{2}m)(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}/c)\psi \cdot (i\hbar\nabla - q\mathbf{A}/c)\delta\psi^* + c \cdot c] \quad (3)$$

انتگرال جزء به جزء می‌گیریم و به شرط آنکه $\delta\psi^*$ در مرزها صفر باشد، به دست می‌آوریم

$$\int dV (\nabla\psi)(\nabla\delta\psi^*) = - \int dV (\nabla^2\psi)\delta\psi^* \quad (4)$$

نتیجه می‌شود

$$\delta \int dV F_S = \int dV \delta\psi^* [-\alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi + (\frac{1}{2}m)(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}/c)^2\psi] + c. c. \quad (5)$$

این انتگرال به شرطی صفر می‌شود که جمله درون کروشه صفر باشد:

$$\boxed{[(\frac{1}{2}m)(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}/c)^2 - \alpha + \beta|\psi|^2]\psi = 0} \quad (6)$$

این رابطه معادله گینزبرگ-لاندائو است؛ این معادله مشابه معادله شرودینگر برای ψ است.

۱. سهمی به صورت $|\mathbf{M}|^2$ که در آن \mathbf{M} مغناطش است توسط لاندائو و لیفشیتز برای نمایش چگالی انرژی تبدلی در فرومغناطیس مطرح شد؛ صفحه ۶۵ کتاب QTS را ببینید.

با کمینه کردن رابطه (۲) نسبت به $\delta \mathbf{A}$ یک عبارت ناوردای پیمانه‌ای برای شار ابرجریان به دست می‌آوریم:

$$\mathbf{j}_S(\mathbf{r}) = -(iq\hbar/2m)(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - (q^2/mc)\psi^* \psi \mathbf{A} \quad (7)$$

در سطح آزاد نمونه، باید پیمانه را به گونه‌ای برگزینیم که این شرط مرزی که هیچ جریانی از ابررسانا به خلأ شارش نکند، برآورده شود: $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{j}_S = 0$ که در آن $\hat{\mathbf{n}}$ عمود بر سطح است.

طول همدوسی، طول همدوسی ذاتی ξ را می‌توان از رابطه (۶) تعریف کرد. \mathbf{A} را برابر صفر بگیرد و فرض کنید که از $\beta|\psi|^2$ بتوان در مقایسه با α چشم پوشید. معادله (۶) GL در یک بعد به صورت زیر درمی‌آید

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = \alpha \psi \quad (8)$$

این معادله پاسخی موج‌گونه به شکل $\exp(ix/\xi)$ دارد، که در آن ξ به صوت زیر تعریف می‌شود

$$\xi \equiv (\hbar^2/2m\alpha)^{1/2} \quad (9)$$

اگر جمله غیرخطی $\beta|\psi|^2$ را در رابطه (۶) حذف نکنیم، پاسخ ویژه جالبتری به دست می‌آوریم. به دنبال پاسخی می‌گردیم که در $x=0$ داشته باشیم $\psi=0$ ، و با $x \rightarrow \infty$ ، $\psi \rightarrow \psi_0$. این وضعیت، مرز بین حالت‌های عادی و ابررسانا را نمایش می‌دهد. چنین حالت‌هایی در صورتی می‌توانند همزیستی داشته باشند که میدان مغناطیسی H_c در ناحیه عادی برقرار باشد. فعلاً از نفوذ میدان به درون ناحیه ابررسانا چشم‌پوشی می‌کنیم: عمق نفوذ میدان را $\xi \ll \lambda$ می‌گیریم، که ابررسانای فرین نوع I را تعریف می‌کند. پاسخ معادله

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} - \alpha \psi + \beta|\psi|^2 \psi = 0 \quad (10)$$

تحت شرایط مرزی، به قرار زیر است

$$\psi(x) = (\alpha/\beta)^{1/2} \tanh(x/\sqrt{2}\xi) \quad (11)$$

درستی این پاسخ را می‌توان با جانشینی مستقیم اثبات کرد. در اعماق ابررسانا داریم $\psi_0 = (\alpha/\beta)^{1/2}$ که از کمینه کردن جمله‌های $-\alpha|\psi|^2 + \frac{1}{2}\beta|\psi|^4$ در انرژی آزاد نتیجه می‌شود. از رابطه (۱۱) می‌بینیم که ξ گستره همدوسی تابع موج ابررسانایی را در داخل ناحیه عادی مشخص می‌کند.

دیده‌ایم که در اعمال درون ابررسانا، انرژی آزاد وقتی کمینه است که $|\psi_0|^2 = \alpha/\beta$ به گونه‌ای که با استفاده از تعریف میدان بحرانی ترمودینامیکی H_c به عنوان چگالی انرژی آزاد پایدارسازی حالت ابررسانا داریم

$$F_S = F_N - \alpha^2/2\beta = F_N - H_c^2/8\pi \quad (12)$$

نتیجه می‌شود که میدان بحرانی به صورت زیر به α و β مربوط می‌شود

$$H_c = (\pi\alpha^2/\beta)^{1/2} \quad (13)$$

عمق نفوذ یک میدان مغناطیسی ضعیف ($B \ll H_c$) به درون ابررسانا را در نظر بگیرید. فرض می‌کنیم که $|\psi|^2$ در ابررسانا برابر با $|\psi_0|^2$ (مقدار آن در غیاب میدان) باشد. در نتیجه معادله شار ابرجریان به قرار زیر ساده می‌شود

$$\mathbf{j}_S(\mathbf{r}) = -(q^2/mc)|\psi_0|^2 \mathbf{A} \quad (14)$$

که همان معادله لندن $\mathbf{j}_S(\mathbf{r}) = -(c/4\pi\lambda^2)\mathbf{A}$ با عمق نفوذ زیر است

$$\lambda = \left(\frac{mc^2}{4\pi q^2 |\psi_0|^2} \right)^{1/2} = \left(\frac{mc^2 \beta}{4\pi q^2 \alpha} \right)^{1/2} \quad (15)$$

در نظریه ابررسانایی، نسبت بدون بعد دو طول مشخصه، $\kappa \equiv \lambda/\xi$ پارامتر مهمی است. از روابط (۹) و (۱۵) درمی‌یابیم که

$$\kappa = \frac{mc}{q\hbar} \left(\frac{\beta}{2\pi} \right)^{1/2} \quad (16)$$

اکنون نشان می‌دهیم که مقدار $\kappa = 1/\sqrt{2}$ ، ابررساناهای نوع I ($\kappa < 1/\sqrt{2}$) را از ابررساناهای نوع II ($\kappa > 1/\sqrt{2}$) جدا می‌سازد.

محاسبه میدان بحرانی بالایی. وقتی میدان مغناطیسی اعمال شده به مقداری کمتر از مقدار نشان داده شده با H_{c2} کاهش یابد، ناحیه‌های ابررسانایی به طور همزمان درون یک رسانای عادی هسته‌بندی می‌کنند. در سرآغاز ابررسانایی، $|\psi|$ کوچک است، در نتیجه معادله GL (۶) را خطی می‌کنیم و به دست می‌آوریم

$$\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}/c)^2 \psi = \alpha \quad (17)$$

میدان مغناطیسی در ناحیه ابررسانایی، در سرآغاز ابررسانایی درست برابر است با میدان اعمال شده، به گونه‌ای که $\mathbf{A} = B(\hat{y}, x, \hat{z})$ ، و رابطه (۱۷) به صورت زیر درمی‌آید

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi + \frac{1}{2m} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial y} + \frac{qB}{c} \right)^2 \psi = \alpha \psi \quad (18)$$

این معادله به شکل معادله شرودینگر ذره آزاد در میدان مغناطیسی است.

به دنبال پاسخی به صورت $\exp[i(k_y y + k_z z)]\varphi(x)$ هستیم و به دست می آوریم

$$(\hbar^2/2m)[- \hbar^2 d^2/dx^2 + \hbar^2 k_z^2 + (\hbar k_y - qBx/c)^2]\varphi = \alpha\varphi \quad (19)$$

این رابطه معادله نوسانگر هماهنگ است به شرط آنکه $E = \alpha - (\hbar^2/2m)(k_y^2 + k_z^2)$ را ویژه مقدار معادله زیر در نظر بگیریم

$$(\hbar^2/2m)[- \hbar^2 d^2/dx^2 + (q^2 B^2/c^2)x^2 - (2\hbar k_y qB/c)x]\varphi = E\varphi \quad (20)$$

جمله خطی بر حسب x را می توان با جابه جایی مبدأ از صفر به $x_0 = \hbar k_y qB/2mc$ حذف کرد،

در نتیجه رابطه (20) با تغییر متغیر $X = x - x_0$ به صورت زیر درمی آید

$$-\left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dX^2} + \frac{1}{2} m (qB/mc)^2 X^2 \right] \varphi = (E + \hbar^2 k_y^2/2m)\varphi \quad (21)$$

بیشترین مقدار میدان مغناطیسی B که برای آن پاسخهای (21) وجود دارند، با کمترین ویژه مقدار

داده می شود که عبارت است از

$$\frac{1}{2} \hbar \omega = \hbar q B_{\max}/2mc = \alpha - \hbar^2 k_z^2/2m \quad (22)$$

که در آن ω بسامد نوسانگر، qB/mc است. با صفر قرار دادن k_z داریم

$$B_{\max} \equiv H_{c2} = 2\alpha mc/q\hbar \quad (23)$$

این نتیجه را می توان به کمک روابط (13) و (16) بر حسب میدان بحرانی ترمودینامیکی H_{c1} و پارامتر

$GL, \kappa = \lambda/\xi$ ، به این صورت بیان کرد:

$$H_{c2} = \frac{2\alpha mc}{q\hbar} \cdot \frac{H_c}{(\pi\alpha^2/\beta)^{1/2}} = \sqrt{2} \frac{mc}{\hbar q} \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} H_c = \sqrt{2} \kappa H_c \quad (24)$$

وقتی $\lambda/\xi > 1/\sqrt{2}$ ابررسانا دارای $H_{c2} > H_c$ است، و نوع Π خوانده می شود.

مفید است که H_{c2} را بر حسب کوانتوم شار $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/q$ و $\xi^2 = \hbar/2m\alpha$ بنویسیم:

$$H_{c2} = \frac{2m\alpha c}{q\hbar} \cdot \frac{q\Phi_0}{2\pi\hbar c} \cdot \frac{\hbar^2}{2m\alpha\xi^2} = \frac{\Phi_0}{2\pi\xi^2} \quad (25)$$

این رابطه به ما می گوید که در میدان بحرانی بالایی، چگالی شار H_{c2} درون ماده برابر است با یک کوانتوم

شار بر مساحت $2\pi\xi^2$ ، که با فاصله شبکه ای فلوکسوییدی از مرتبه ξ سازگار است.

پیوست ی

برخوردهای الکترون-فونون

فونونها ساختار بلوری موضعی را آشفته می‌کنند، و در نتیجه باعث واپیچش ساختار نواری می‌شوند. الکترونهاى رسانش تحت تأثیر این واپیچش قرار می‌گیرند. اثرهای مهم جفت‌شدگی الکترونها با فونونها عبارت‌اند از:

- الکترونها از یک حالت k به حالت دیگر k' پراکنده می‌شوند، که این امر منجر به مقاومت الکتريکی می‌شود.
- فونونها، در رویداد پراکندگی، ممکن است جذب شوند، که این امر منجر به تضعیف امواج فراصوتی می‌شود.
- الکترون واپیچش بلور را همراه خود حمل می‌کند، و در نتیجه جرم مؤثر الکترون زیاد می‌شود.
- واپیچش بلوری ناشی از الکترون ممکن است الکترون دیگری را تحت تأثیر قرار دهد که موجب برهم‌کنش الکترون-الکترونی شود که در نظریهٔ ابررسانایی وارد می‌شود.

تقریب پتانسیل تغییر شکل آن است که انرژی الکترون $\epsilon(k)$ با رابطهٔ زیر با اتساع بلوری $\Delta(\mathbf{r})$ یا

تغییر نسبی حجم جفت شود

$$\epsilon(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \epsilon_0(\mathbf{k}) + C\Delta(\mathbf{r}) \quad (1)$$

که در آن C ثابت است. این تقریب برای لبه‌های کروی نوار $\epsilon_0(\mathbf{k})$ در طول موجهای فونونی بلند و غلظتهای الکترونی پایین سودمند است. اتساع را می‌توان، همانند صفحه ۲۳ در *QTS*، به صورت زیر برحسب عملگرهای فونونی $a_{\mathbf{q}}$ و $a_{\mathbf{q}}^+$ ، مربوط به پیوست ج، بیان کرد

$$\Delta(\mathbf{r}) = i \sum_{\mathbf{q}} (\hbar/2M\omega_{\mathbf{q}})^{1/2} |\mathbf{q}| [a_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) - a_{\mathbf{q}}^+ \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})] \quad (2)$$

در اینجا M جرم بلور است. نتیجه (۲)، از رابطه ۳۲ در پیوست ج برای تشکیل $q_s - q_{s-1}$ در حد $k \ll 1$ نیز نتیجه می‌شود.

در تقریب بورن برای پراکندگی، به عناصر ماتریسی $C\Delta(\mathbf{r})$ بین حالت‌های بلوخی تک‌الکترونی $|\mathbf{k}\rangle$ و $|\mathbf{k}'\rangle$ با $|\mathbf{k}\rangle \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ می‌پردازیم. در نمایش میدان موجی، عنصر ماتریسی به قرار زیر است

$$\begin{aligned} H' &= \int d^3x \psi^+(\mathbf{r}) C\Delta(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}'}^+ c_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k}' | C\Delta | \mathbf{k} \rangle \\ &= iC \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}'}^+ c_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q}} (\hbar/2M\omega_{\mathbf{q}})^{1/2} |\mathbf{q}| (a_{\mathbf{q}} \int d^3x u_{\mathbf{k}'}^* u_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} \\ &\quad - a_{\mathbf{q}}^+ \int d^3x u_{\mathbf{k}'}^* u_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}}) \end{aligned} \quad (3)$$

که در آن

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (4)$$

که در آن $c_{\mathbf{k}}$ و $c_{\mathbf{k}}^+$ عملگرهای آفرینش و نابودی فرمیونی‌اند. حاصلضرب $u_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ حاوی بخشهای دوره‌ای توابع بلوخ و خود دارای دوره شبکه است؛ در نتیجه انتگرال در رابطه (۳) صفر می‌شود، مگر آنکه داشته باشیم

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' \pm \mathbf{q} = \begin{cases} 0 \\ \text{بردار شبکه وارون} \end{cases}$$

در نیمرسانا، در دماهای پایین، تنها امکان صفر (فرایندهای N) از نظر انرژی ممکن است مجاز باشد.

خود را به فرایندهای N محدود می‌سازیم، و برای سادگی $\int d^3x u_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}}$ را به تقریب برابر یک می‌گیریم. در نتیجه اختلال پتانسیل تغییر شکل برابر است با

$$H' = iC \sum_{\mathbf{kq}} (\hbar/2M\omega_{\mathbf{q}})^{1/2} |\mathbf{q}| (a_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ c_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{q}}^+ c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ c_{\mathbf{k}}) \quad (5)$$

زمان واهلش. بردار موج \mathbf{k} برای الکترون، در حضور برهم‌کنش الکترون-فونون، به تنهایی ثابت حرکت نیست، بلکه مجموع بردار موجهای الکترون و حفره مجازی پایسته است. فرض کنید که الکترونی در آغاز در حالت $|\mathbf{k}\rangle$ باشد؛ این الکترون برای چه مدت در آن حالت باقی خواهد ماند؟

نخست احتمال w را برای آنکه الکترونی در حالت \mathbf{k} یک فونون گسیل دارد به‌ازای واحد زمان محاسبه می‌کنیم. اگر $n_{\mathbf{q}}$ جمعیت آغازین حالت فونونی باشد، با استفاده از نظریه اختلال وابسته به زمان داریم

$$w(\mathbf{k}-\mathbf{q}; n_{\mathbf{q}+1} | \mathbf{k}; n_{\mathbf{q}}) = (2\pi/\hbar) |\langle \mathbf{k}-\mathbf{q}; n_{\mathbf{q}+1} | H' | \mathbf{k}; n_{\mathbf{q}} \rangle|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \quad (6)$$

که در آن

$$|\langle \mathbf{k}-\mathbf{q}; n_{\mathbf{q}+1} | H' | \mathbf{k}; n_{\mathbf{q}} \rangle|^2 = [C^2 \hbar q / 2M c_s (n_{\mathbf{q}} + 1)] \quad (7)$$

آهنگ کل برخورد، W ، الکترونی در حالت $|\mathbf{k}\rangle$ ، با یک دستگاه فونونی در صفر مطلق که در آن $n_{\mathbf{q}} = 0$ برابر است با

$$W = \frac{C^2}{4\pi\rho c_s} \int_{-1}^1 d(\cos\theta_{\mathbf{q}}) \int_0^{q_m} dq q^3 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}) \quad (8)$$

که در آن ρ چگالی جرمی است.

شناسه تابع دلتا برابر است با

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} (2\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} - q^2) - \hbar c_s q = \frac{\hbar^2}{2m^*} (2\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} - q^2 - q q_c) \quad (9)$$

که در آن $q_c = 2m^* c_s / \hbar$ ، و c_s سرعت صوت است. مقدار کمیته k ، که برای آن این شناسه می‌تواند صفر باشد، برابر است با $k_{\min} = \frac{1}{2}(q + q_c) = m^* c_s / \hbar$ ، که به‌ازای $q = 0$ به صورت $k_{\min} = \frac{1}{2} q_c = m^* c_s / \hbar$ ساده می‌شود. سرعت گروه الکترون به‌ازای این مقدار k ، $v_g = k_{\min} / m^*$ برابر است با سرعت صوت. بنابراین آستانه گسیل فونونها، توسط الکترونهای بلور آن است که باید سرعت گروه الکترونها، از سرعت صوت بیشتر باشد. این در بایست با آستانه چرنکوف برای گسیل فوتون از بلور، توسط الکترونهای سریع مشابهت دارد. انرژی الکترون در آستانه برابر است با $1\text{K} \sim 10^{-16} \sim 10^{11} \times 10^{-27} \sim 10^{-16} m^* c_s^2$ الکترونی

که انرژی آن کمتر از این آستانه باشد، در بلور کامل در صفر مطلق، حتی توسط برهم‌کنشهای الکترون-فونون از مرتبه‌های بالاتر نیز، دست کم در تقریب هماهنگ برای فونونها کند نخواهد شد. به‌ازای $q_c \gg k$ می‌توانیم از جمله qq_c در رابطه (۹) چشم‌پوشی کنیم. انتگرالهای رابطه (۸) به‌صورت زیر درمی‌آیند

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mu \int dq q^3 (\nu m^*/\hbar^2 q) \delta(\nu k\mu - q) = (\nu m^*/\hbar^3) \int_0^{\infty} d\mu k^2 \mu^2 = \nu m^* k^2 / 3\hbar^2 \quad (10)$$

و آهنگ گسیل فونون برابر است با

$$W(\text{گسیل}) = \frac{2C^2 m^* k^2}{3\pi \rho c_s \hbar^2} \quad (11)$$

که با انرژی الکترون، ϵ_k ، نسبت مستقیم دارد. اتلاف مؤلفه بردار موج، موازی با جهت الکترون در زمان گسیل فونونی تحت زاویه θ با k ، با $q \cos \theta$ داده می‌شود. آهنگ نسبی اتلاف k_z از انتگرال آهنگ گذار، همراه با ضریب اضافی $(q/k) \cos \theta$ در انتگرالده به‌دست می‌آید. به‌جای رابطه (۱۰) داریم

$$(\nu m^*/\hbar^2 k) \int_0^{\infty} d\mu \nu k^3 \mu^2 = 16 m^* k^2 / 5\hbar^2 \quad (12)$$

در نتیجه آهنگ نسبی کاهش k_z برابر است با

$$W(k_z) = 4C^2 m^* k^2 / 5\pi \rho c_s \hbar^2 \quad (13)$$

این کمیت در مقاومت الکتریکی وارد می‌شود.

نتیجه بالا در صفر مطلق به‌کار می‌رود. در دمای $k_B T \gg \hbar c_s k$ ، آهنگ انتگرال‌گیری شده گسیل فونونی برابر است با

$$W(\text{گسیل}) = \frac{C^2 m^* k k_B T}{\pi c_s^2 \rho \hbar^2} \quad (14)$$

برای الکترونیایی که در دمای نه چندان پایین در تعادل گرمایی‌اند، نامساوی مورد نیاز، به‌آسانی به‌ازای مقدار rms بردار k برآورده می‌شود. اگر فرض کنیم $C = 10^{-12}$ erg، $m^* = 10^{-27}$ g، $k = 10^7$ cm⁻¹، $\rho = 5$ g cm⁻³، و $c_s = 3 \times 10^5$ cm s⁻¹، آنگاه خواهیم داشت $W \simeq 10^{12}$ s⁻¹. رابطه (۱۳) در دمای صفر، با استفاده از این پارامترها می‌دهد: $W \simeq 5 \times 10^{10}$ s⁻¹.

نمایه

- آثار ترموالکتریکی ۲۳۸
آثار فوق‌ریز روی ESR در فلزات ۴۳۱
آشکارسازهای فوتولتایی ۵۵۸
آفرینش، عملگرهای ۷۱۴
آلایش ۲۳۳
آلیاژها (ی) ۶۷۲، ۷۰۰-۶۷۹
فلزات واسط ۶۹۴
مقاومت ۶۷۲
آنتروپی ۳۴۶
آمیختگی ۶۹۱
در ابررساناها ۲۹۲
آویخته، پیوندهای ۵۳۸
آهارانوف-بوم، اثر ۵۹۸
ابررساناهای دمای بالا ۳۲۶
ابررساناهای شگفت‌انگیز ۱۶۷، ۲۸۷
ابررسانایی، جدول ۲۸۸
نوع I ۲۹۱
نوع II ۳۱۴
ابرشبکه ۷۰۰
ابتیکی
جذب ۲۱۱، ۲۱۳، ۵۷۴
شاخه فونون ۱۱۲، ۱۲۰
اتساع ۸۷
اتلاف، قاعده جمع ۴۹۷
اثر
ایزوتوبی ۲۹۸
ابررساناها ۲۹۸
رسانندگی گرمایی ۱۴۸
دوهاس-سون آلفن ۲۶۹، ۲۷۲، ۳۳۳
رامان ۴۹۰
کوانتیده کسری هال (FQHE) ۵۵۴
مایسنر ۲۸۷
در کره ۳۲۹
هال ۱۷۴
با دو نوع حامل ۲۴۳
پیوندگاه بالیستیکی ۵۹۶
یان-تلر ۲۳۲

- احتمال تراگیسیل ۵۸۷
اسپین-شیکه
برهم‌کنش ۴۰۴
زمان واهلش ۴۰۳
اسپینل ۳۷۳
عادی ۳۷۳
معکوس ۳۷۳
اسپینی، موج (مگنون را نیز ببینید) ۳۶۴
تشدید ۴۲۱
کوانتش ۳۶۹
استتار الکتروستاتیکی ۴۳۳
استتار شده، پتانسیل کولنی ۴۳۵
استوکس، خط ۴۹۱
اسلیتر-پاؤلینگ، ترسیم ۶۹۶
اشباعی
قطبیدگی ۵۱۸
مغناطیدگی ۳۶۰
۴۱۹ If
اصل طرد پاؤلی ۶۶
اکستین ۴۸۰
فرنکل ۴۸۱
مات-وانیه ۴۸۱
اکستینونها ۴۷۹، ۴۷۲
اکوستیکی، شاخه فونون ۱۲۰
الکترون
مدارهای ۲۵۴
معادله حرکت ۲۱۱
الکترون-الکترون، برهم‌کنش ۴۳۳، ۴۵۸
الکترون-حفره، قطره‌های ۴۸۷
الکترون‌خواهی ۷۲
الکترون-شیکه، برهم‌کنش ۴۶۵
الکترون-فونون، برخوردی ۷۴۵
- الکترونهاي رسانشی ۲۹۳
پذیرفتاری ۳۰۱
فرومغناطیس ۳۶۳
امواج
آلفن ۴۶۹
کشسان، کوانتش ۷۱۱، ۱۱۶
ماریچی ۴۷۰
انبساط گرمایی ۱۳۸
انتقال
بردار ۷
عملهای ۸
نایت ۴۰۰
انتگرال کوشی ۴۷۶
انرژی
آزاد
ابرسانا ۳۰۱
پایدارسازی ۳۰۰
الکتروستاتیکی ۷۲
بارگیری ۶۰۵
تبادل ۳۵۹
چسبندگی ۵۷، ۷۰، ۲۶۳
جدول ۵۹، ۶۲
گاز فرمی ۱۸۰
فرمی ۱۵۴
فعال‌سازی ۶۳۱
مادلونگ ۷۲
ناهمسانگردی ۳۸۴
یونش
پذیرنده‌ها ۲۳۵، ۲۳۶
جدول ۶۳
دهنده‌ها ۲۳۵، ۲۳۶

مقاومت تک بلورها ۶۵۶	اولد
برگرز، بردارهای ۶۶۲	ترسیم ۴۱
برهم‌کشش	جمع‌زنی ۷۰۵
اسپین-شبكة ۴۰۴	کره ۵۴۰
الکترون-الکترون ۴۳۳، ۴۵۸	اولد-کورنفلد، روش ۷۰۹
الکترون-شبكة ۴۶۵	ایتیم-آهن، نارسنگ ۳۷۵
فوق ریزتماسی ۴۱۱	ایلمنیت ۵۱۸
ناهماهنگ ۱۳۸	اینشتین، چگالی حالتها ۱۳۵
وان دروالس ۶۲	باتریهای خورشیدی ۵۵۸
بریلوئن	باریک‌شدگی حرکتی ۴۰۸
پراکندگی ۴۷۳	باریم تیتانات ۵۰۷
تابع ۳۳۶	باز، مدارهای ۲۵۴
منطقه ۴۱، ۲۴۷، ۲۸۱	بازتاب، ضریب ۴۵۶
اول ۵۵، ۱۰۷، ۲۴۷	بازتابندگی ۴۷۴
حجم ۵۵	بازترکیب، نورتابی ۴۸۲
بسامد	بازسازی ۵۳۷
بلوخ ۲۴۲	براگ، قانون ۳۱
جهش ۶۴۷	برانگیختگی گرمایی مگنونها ۳۶۹
سیکلوترونی ۱۷۴	برانگیختگیهای بنیادی ۱۰۵
لارمور ۳۳۲	براو، شبکه ۱۱
بستر ۵۳۷	برخوردهای
بستگی بلور و ثابتهای کشسانی ۵۷	الکترون-الکترون ۴۶۰
بستگی قوی، روش ۲۵۶	الکترون-فونون ۷۴۵
بسگونگی ۲۷	بردار(های)
بسیط، یاخته ۸، ۲۷، ۴۲، ۱۱۱	انتقال ۷
بلوخ	برگرز ۶۶۲
بسامد ۲۴۲	شبكة وارون ۳۷
توابع ۱۸۸	برداری، پتانسیل ۷۳۱
دیوار ۳۸۶	برشی
قانون $T^{3/2}$ ۳۷۰	تنش بحرانی ۶۵۷
قضیه ۱۸۸	ثابت ۱۰۲
معادلات ۴۰۶	

- نوسانگر ۲۴۲
بلور
میدان، شکافتگی ۳۴۱
بلورنگاری سطح ۵۳۹
حالت‌های سطح ۵۴۶
بلورهای
پادفروالکترونیک ۵۳۰، ۵۲۷
فروالکترونیک ۵۱۵
آرایه خطی ۵۳۶
حوزه‌های ۵۲۸
فرومغناطیسی ۳۷۱
کووالانسی ۷۶
گازهای بی‌اثر ۵۸، ۶۲
جدول ۶۲
مولکولی ۴۸۶
نیم‌رسانا ۲۰۷
هالید قلیایی، جدول ۷۷
بلوری، تکانه ۱۹۵
بوتیکر-لاندائو، فرمولبندی ۵۹۴
بور، مگنتون ۳۳۵
بوزونی، عملگرهای ۷۱۵
بولتزمن، معادله تراپرد ۷۲۴
به‌دام‌اندازی حفره‌ها ۶۵۱
بیومغناطیس ۳۹۲
بی‌هنجاری کهن ۱۲۱
پاداستوکس، خط ۴۹۱
پادفروالکترونیک، بلورهای ۵۳۰، ۵۲۷
پادفرومغناطیس ۳۵۶
دمای نیل ۳۷۷
مگنونهای ۳۸۱
پارامتر(های)
سطح فرمی، جدول ۱۵۸
گینزبرگ-لاندائو ۷۴۰
نظم ۷۴۰
پارامغناطیس ۳۳۴
نظریه کوانتومی ۳۳۴
ون ولک ۳۴۶
پارامغناطیسی، ناراستیهای ۴۱۴
پاسخ گاز الکترونی ۴۷۱
پاسخ، تابع ۴۷۵
پاشیدگی، رابطه
امواج الکترومغناطیسی ۴۳۷
فونونی ۱۱۱
پاؤلی
اصل طرد ۶۶
مغناطیدگی اسپینی ۳۵۱، ۳۵۴، ۴۱۶
پایدارسازی
انرژی آزاد ۳۰۰
محکهای ۱۰۳
پایرلز
عایق ۴۶۸
ناپایداری ۴۶۶
پایه ۷
پتانسیل
برداری ۷۳۱
شیمیایی ۱۵۵، ۱۷۸
کولنی استتار شده ۴۳۵
لنارد-جونز ۶۷
پخش ۴۰۹، ۶۴۵
پذیرفتاری
دی‌الکترونیک ۵۰۶
مغناطیسی ۳۳۱، ۳۵۱، ۳۷۸
پذیرنده(ها)

- انرژی یونش ۲۳۶
 حالت‌های ۲۳۶
 پراش
- بازتابی الکترون پراثری (RHEED) ۵۴۰
 در پیوندگاه جوزفسون ۳۲۹
 موج ۳۱
 شرایط ۲۸
 پراکندگی
- کلاسیکی ۵۸۴
 ناکشسان توسط فونونها ۱۱۸
 پرووسکیت ۵۱۸
 پسماند ۳۸۵، ۳۹۰
 پلاسمون، بسامد
 اپتیکی ۴۳۸
 سطح ۴۶۹
 فصل مشترک ۴۶۹
 مد کره ۴۷۰
 نوسان ۴۴۰
 پلاسمونهای گاف ۴۷۱
 پلانک، توزیع ۱۲۴
 پلته، ضریب ۲۳۹
 پواز ۶۳۰
 پواسون
 معادله ۴۳۴
 نسبت ۱۰۱
 پولارون ۴۶۴
 ثابت جفت‌شدگی ۴۶۵
 پولاریتون ۴۵۲
 پهنای خط ۴۰۸
 پیچی، دررفتگی ۶۶۰
 پیروالکتتریک ۵۱۶
 پیروالکتترسیسته ۵۲۹
- پیمانه لاندائو ۵۵۳
 پیمانه لندن ۷۳۶
 پیوند(های)
 آویخته ۵۳۹
 کووالانسی ۷۶
 هیدروژنی ۸۱
 یونی ۷۱
 پیوندگاه
 ابررسانا ۳۲۱
 چندگن ۵۶۰
 پیوندگاههای $p-n$ ۵۵۴
 تابع
 بریلوئن ۳۳۶
 پاسخ ۴۷۵
 توزیع پلانک ۱۲۴
 توزیع شعاعی ۶۲۳
 دی‌الکتتریک ۴۳۳
 توماس-فرمی ۴۴۶
 گاز الکترونی ۴۳۳
 کار ۵۴۴
 تابعهای کار الکترون ۵۴۴
 جدول ۵۴۴
 تارهای نوری ۶۳۸
 تاره‌ها ۶۷۲
 تانسور مغناطوسانتدگی ۱۷۹، ۵۴۸
 تبادل(لی)
 انتگرال ۳۶۰
 انرژی ۳۵۹
 باریک‌شدگی ۴۰۸، ۴۲۵
 برهم‌کنش ۳۵۹
 تشدید بسامد ۴۳۲

- میدان ۳۵۹
تبدیل بانظم-بی نظم ۶۸۷
تبدیل پیمانهای ۷۳۴
تحرك
حاملها، جدول ۲۳۲
ذاتی ۲۳۱
لبه‌های ۵۵۲
تحلیل فوریه ۱۸۹، ۴۸، ۳۳
تحویل یافته، طرح منطقه‌ای ۲۴۷
تداخل کوانتومی ۳۲۵، ۳۲۱
ترابرد مماسی سطح ۵۴۷
تراز(های)
انرژی در یک بعد ۱۵۲
شبه فرمی ۵۶۲
فرمی ۱۶۰
لانداؤ ۵۵۱، ۲۸۴، ۲۷۳
تراکم پذیری ۹۳
تراگسیل، احتمال ۵۸۷
ترانزیستور
اثر میدان نیم رسانای فلز-اکسید (MOSFET)
۵۴۷
تک الکترونی ۶۰۷
MOS ۵۴۸
ترسیم اسلیتر-پاولینگ ۶۹۶
ترسیم اوالد ۴۱
ترکیب الکترونی ۶۸۴
ترموالکتریکی، آثار ۲۳۸
ترمودینامیک گذار ابررسانش ۳۰۰
ترزیقی، لیزرهای ۵۶۲
تشدید(ی)
اسپینی الکترون ۴۰۰
برای سطح انرژی کره‌وار ۲۴۴
- پلاسمونی سطحی ۶۰۳
تونل زنی ۵۹۰
چهار قطبی هسته‌ای ۴۱۷
سیکلوترونی ۲۲۲
مغناطیسی هسته‌ای ۳۹۹
جدول ۴۰۲
تغییر نوار ۵۵۹
تقریب
توماس-فرمی ۴۴۴
شبکه خالی ۱۹۸
میدان میانگین ۳۵۷
تک الکترونی، ترانزیستور ۶۰۷
تکانه
بلوری ۱۹۵
شبکه ۲۱۵
فونون ۱۱۷
تکثیر در رفتگی ۶۶۹
تک حوزه، ذرات ۳۹۱
تکینه‌های وان هوف ۱۳۷
تنش برشی بحرانی ۶۵۷
تنگ چین شش گوشه‌ای، ساختار ۱۸
توابع بلوخ ۱۸۸
توابع وانیه ۲۸۳
توان ترموالکتریکی مطلق ۲۴۰
توزیع
پلانک ۱۲۴
شعاعی، تابع ۶۲۵
فرمی-دیراک ۱۵۴، ۱۱۷
توماس-فرمی
تابع دی الکتریک ۴۴۶
تقریب ۴۴۴
تونل زنی ۳۱۹

چسبندگی، انرژی ۵۷، ۲۶۳، ۷۰	احتمال ۵۷۶
جدول ۶۲، ۵۹	تشدیدی ۵۹۰
چاه پتانسیل مربعی ۲۶۳	جوزفسون ۳۲۱
فاز سدیم ۲۶۵	زیر ۲۴۲
گاز فرمی ۱۸۰	تهیجاهای شبکه ۶۴۲
چشمه فرانک-رید ۶۷۰	ثابت
چگالی حالتها ۱۲۵، ۱۳۷، ۱۵۷	برشی مؤثر ۱۰۲
تکینه‌ها ۱۳۷	دی‌الکتریک ۵۱۰
در دستگاه متناهی ۵۷۳	نیمرساناها ۲۳۵
در سه بعد ۱۲۹	ساختار ریز ۵۵۱
در یک بعد ۱۲۶	فوق ریز ۴۱۳
مدل ایششتین ۱۳۵	کوری ۳۳۷
مدل دبی ۱۲۹	گرونایزن ۱۴۹
چگالی در رفتگیها ۶۶۸	مادلونگ ۷۴
چگالی، جدول ۲۹	جامد(های)
حاصلضرب np ۲۳۰	بی شکل ۶۲۲
حالت گردابی ۲۹۱، ۳۱۵، ۳۲۷	کوانتومی ۹۹
حالتهای	نانوبلورین ۶۲۲
پذیرنده ۲۳۶	جایگزیدگی ۵۹۳
دهنده ۲۳۳	جذب
سطح ۵۴۶	ابتیکی ۲۱۳، ۵۷۴
حاملهای ذاتی، غلظت ۲۱۰، ۲۳۱	توان ۴۰۷
حجم منطقه بریلوتن ۵۵	غیرمستقیم ۲۱۱
حرکت نقطه صفر ۶۲	فوتونی ۲۱۱
حصار کوانتومی ۵۷۷	مستقیم ۲۱۰
حفره(ها)	جرم مؤثر ۲۱۹
به دام اندازی ۶۵۱	در نیمرساناها، جدول ۲۲۴
مدارهای ۲۵۴	گرمایی ۱۶۶
معادله حرکت ۲۱۸	منفی ۲۲۱
حوزه‌ها(ی)	جریانهای ماندگار ۳۱۳
بستار ۳۸۹	جوزفسون، تونل زنی ۳۲۱

- دوترازی، دستگاه ۳۵۳
- دوره‌ای، شرایط مرزی ۱۲۷
- دوره‌ای، طرح منطقه‌ای ۲۴۹
- دوقلو زایی ۶۵۹
- دولون و پتی، مقدار ۱۳۵
- دو هاس-سون آلفن
- اثر ۲۶۹، ۲۷۲، ۳۳۳
- دوره ۲۸۲
- دهنده، انرژی‌های یونش ۲۳۵، ۲۳۶
- دی‌الکتربک
- تابع ۴۳۳
- توماس-فرمی ۴۴۶
- گاز الکترونی ۴۳۳
- ثابت ۵۱۰
- پذیرفتاری ۵۱۰
- دیامغناطیس ۳۳۱
- لانژون ۳۳۲
- نظریه کوانتومی ۳۳۳
- دیوار بلوخ ۳۸۶
- دیودهای نورگسیل (LED) ۵۶۴
- ذاتی
- تحرك ۲۳۱
- طول همدوسی ۳۰۶
- نیمرسانای ۲۰۸
- رابطه
- باشیدگی فونونی ۱۰۷
- کلاگستون ۳۰۱
- کلاؤسیوس-موسوتی ۵۱۱
- کلونین ۲۴۰
- لیدن-زاکس-تتر ۴۵۵
- هاگن-روبنز ۴۹۹
- منشأ ۳۸۸
- خاکی کمیاب، یونهای ۳۳۷
- خاموشی، ضریب ۴۷۲
- خزش ۶۷۴
- خط استوکس ۴۹۱
- خط پاداستوکس ۴۹۱
- خود-به‌دام افتادگی ۲۳۲
- خودپخشی ۶۴۹
- خورشیدی، باتریهای ۵۵۸
- داویدف، شکافتگی ۴۸۶
- دبی
- تقریب T^3 ۱۳۲
- دمای 13°
- جدول ۱۳۴
- قانون T^3 ۱۳۱
- دبی-والر، عامل ۷۰۳
- دررفتگی
- پیچی ۶۶۰
- تکثیر ۶۶۹
- چگالی ۶۶۸
- لبه‌ای ۶۷۳، ۶۷۰
- دررفتگیها ۶۵۵
- دستگاه
- شاخص‌گذاری ۱۳
- مختصات دوار ۴۳۱
- PZT ۵۳۱
- دستگاههای میکروالکترومکانیکی ۶۱۸
- دمای
- بحرانی، فروالکتربک ۵۱۶
- دبی 13°
- گذار شیشه ۶۳۰

زوجهای کوپر ۳۱۰، ۶۱۲، ۷۳۷

ژیروسکوپ، معادله ۴۰۳

ژئومغناطیس ۳۹۲

ساختار(های)

الکترونی سطح ۵۴۴

الماسی ۲۳، ۵۶، ۲۰۵، ۲۰۸

بلوری

ساده ۱۸

غیرایده آل ۲۶

تنگ چین شش گوشه ۱۸

ریز، ثابت ۵۵۱

سدیم کلرید ۱۸

سزیم کلرید ۱۸

عامل ۴۸

الماس ۵۶

شبکه bcc ۵۰

شبکه fcc ۵۱

مکعبی روی سولفید ۲۵

نواری ۴۲

ژرمانیم ۲۲۵

نانولوله کربنی ۶۱۹

ساختاری، گذارهای فاز ۵۱۴

سانتی پواز ۶۳۰

سخت گردانی کاری ۶۷۴

سختی ۶۷۶

سد شوتکی ۵۵۸

سدیم فلزی ۵۱

سرعت تابدار مذاب ۶۳۳

سرعت گروه ۱۰۹

سزیم کلرید، ساختار ۱۸

سطح فرمی

LST ۴۵۵

رابطه های کریمرز-کرونیک ۴۷۵، ۴۷۶

رامان

اثر ۴۹۰

پراکندگی ۴۹۰

تقویت شده سطحی ۶۰۴

طیف نمایی تک نانولوله ها ۶۱۵

رسانندگی

الکتریکی ۱۶۷، ۲۳۳، ۴۷۰

جدول ۱۶۹

قاعده جمع ۴۹۸

کوانتوم ۵۸۸

گاز الکترونی بدون برخورد ۴۷۸

گرمایی ۱۴۰، ۱۷۷

ناخالصی ۲۳۳

یونی ۴۶۶

رنگ، مراکز ۶۴۹

روش

اولد-کورنفلد ۷۰۹

بستگی قوی ۲۵۶

شبه پتانسیل تجربی ۲۶۸

ویگنر-سایتس ۲۵۶

روی هم چینی کاتوره ای ۲۶

روی هم چینی، نقص ۶۵۸

ریچاردسون-داشمن، معادله ۵۴۵

ریلی، کاهش ۶۳۹

زمان واهلش طولی ۴۰۳

زیر

تونل زنی ۲۴۲

شکست ۲۴۲

زوایای چهاروجهی ۳۰

شبه پتانسیل، مؤلفه های	طلا ۲۷۸
روش ۲۶۷	مس ۲۷۶
سدیم فلزی ۲۶۶	سطح، بلورنگاری ۵۳۹
شبه ذره ۴۶۰	پلاسمونهای سطحی ۴۴۴، ۴۶۹
شرایط پراش موج ۳۸	ترابرد مماسی سطح ۵۴۷
شرایط مرزی دوره ای ۱۲۷	حالت های سطح ۵۴۶
شرط مرزی ویگنر-سایتس ۲۶۳	ساختار الکترونی سطح ۵۴۴
شش گوش، شبکه ۵۵	شبکه های سطح ۵۳۹
شعاع های	مقاومت سطحی ۱۸۱
اتمی ۸۲	سطوح فرمی ۲۴۵
جدول ۸۳	سفتی کشسانی ۹۰، ۹۷، ۹۸
بلورهای یونی ۸۴	سه ترازه، میز ۴۲۷
یونی	سدگانه، حالت های برانگیخته ۳۵۳
جدول ۸۳	سیکلوترونی
شفافیت فلزات قلیایی ۴۳۹	بسامد ۱۷۴
شکافتگی	تشدید ۲۲۲
داویدف ۴۸۶	سطح انرژی کره وار ۲۴۴
طیف نمایی، عامل ۳۴۴	سیلیس شیشه ای ۶۲۶
فوق ریز ۴۱۱	شاخص شکست ۴۷۳
میدان صفر ۴۲۶	شاخه فونون اپتیکی ۱۲۰
شکست زبر ۲۴۲	شاخه فونون اکوستیکی ۱۲۰
شکست، شاخص ۴۵۵	شبکه
شکل اتمی، عامل ۵۳	براهه ۱۱
شمارش مدهای بهنجار ۱۲۵	خالی، تقریب ۱۹۸
شوتکی	فضایی شش گوش ۵۵
تهیجاهای ۶۴۲	کاتوره ای ۶۲۸
سد ۵۵۸	مرعی ۱۳، ۲۰۵
ناراستی ۶۴۳	شبکه (های) ۵۳۹
شیشه ۶۳۰	انواع ۱۰، ۱۱
دمای گذار ۶۳۰	تهیجاهای ۶۴۲
ضریب	مکعبی ۱۱

عدد لورنتس ۱۷۷	بازتاب ۴۵۶
عرضی، زمان واهلش ۴۰۴	پلتیه ۲۳۹
عرضی، مدهای اپتیکی در پلاسما ۴۳۸	خاموشی ۴۷۳
علیت ۴۹۷	هال ۱۷۴
عمق نفوذ لندن ۳۰۴، ۳۲۹	جدول ۱۷۶
عملگرهای	ضریبهای و امغانطیدگی ۴۹۱
آفرینش ۷۱۴	طرح منطقه‌ای
بوزونی ۷۱۵	تحویل یافته ۲۴۷
نابودی ۷۱۴	دوره‌ای ۲۴۹
عملهای انتقال ۸	گسترده ۲۴۸
غلظت اتمی، جدول ۲۹	طول همدوسی ۳۰۵، ۷۴۲
غلظت حاملهای ذاتی ۲۱۰، ۲۲۷	ذاتی ۳۰۶
فازی، نمودارهای ۶۸۴، ۶۹۲	ظرفیت گرمایی الکترونی، جدول ۱۶۵
فرابنفش، حدهای تراگیسیل ۴۳۹	ظرفیت گرمایی پیکربندی ۷۰۰
فرانک-رید، چشمه ۶۷۰	ابرسانا ۲۹۲
فرایندهای	شیشه‌ها ۶۳۷
عادی ۱۴۵	فلزات ۱۵۱
واگرد ۱۴۳	فونون ۱۲۳
فرضیه لارمور ۳۳۲	گاز الکترون ۱۶۰
فرمول لاندائر ۵۸۷	ظرفیت، لبه نوار ۲۰۹
فرمولبندی بوتیکر-لاندائر ۵۹۴	عامل
فرمی	دبی-والر ۷۰۳
انرژی ۱۵۴	ساختار ۴۸
تراز ۱۵۵، ۲۲۷	الماس ۵۶
سطوح ۲۴۵	شبکه bec ۵۰
گاز ۱۵۰	شبکه fec ۵۱
مایع ۴۵۸	شکافتگی طیف‌نمایی ۳۴۴
فرمی-دیراک، توزیع ۱۵۴، ۷۱۷	شکل اتمی ۵۳
فرمیونهای سنگین ۱۶۶	ساختار ۵۳
فرنکل، ناراستی ۶۴۳، ۶۵۳	عایقها ۲۰۳
فروالکتریک	عدد سختی ویکرز ۶۷۷

- آرایه خطی ۵۳۶
 بلورهای ۵۱۵
 حوزه‌های ۵۲۸
 فرود عمودی، بازتاب ۴۹۷
 فرومغناطیس، بلورهای ۳۶۳
 الکترونیهای رسانشی ۳۶۳
 بی‌شکل ۶۳۲
 تشدید ۴۱۸
 حوزه‌های ۳۸۳
 نظم ۳۷۱
 فرومغناطیسهای بی‌شکل ۶۳۲
 فرونشانی تکانه زاویه‌ای مداری ۳۴۲
 فریدل، نوسانهای ۴۴۸
 فعال‌سازی، انرژی ۶۴۷
 فلزات واسطه، آلیاژهای ۶۹۴
 فلزها ۸۰
 فلوکسویید ۳۱۲
 فوتوگسیل پرتو x از جامدها (XPS) ۴۹۲
 فوتوگسیل فرابنفش (UPS) از جامدها ۴۹۴
 فوتولیتوگرافی ۵۷۵
 فوتولتایی، آشکارسازهای ۵۵۸
 فوریه، تحلیل ۳۳، ۴۸، ۱۹۰
 فوق‌ریز
 تماسی، برهم‌کنش ۴۱۱
 ثابت ۴۱۳
 شکافتگی ۴۱۱
 فونون
 تکانه ۱۱۷
 رابطه پاشیدگی ۱۰۷
 ظرفیت گرمایی ۱۲۳
 فونونها(ی) ۱۱۸، ۱۱۹، ۱۲۳
 اپتیکی نرم ۵۲۱
 پراکندگی ناکشسان ۱۱۸
 در فلزات ۴۵۱
 مسافت آزاد میانگین ۱۴۰
 فونونی
 مختصات ۷۱۲
 مدهای نرم ۱۲۱
 مقاومت گرمایی گاز ۱۴۲
 فیک، قانون ۶۴۶
 قاعده جمع
 اتلاف ۴۹۷
 رسانندگی ۴۹۸
 قاعده ماتیسین ۱۷۰
 قانون
 اثر جرم ۲۳۰
 اهم ۱۶۷، ۵۹۲
 براگ ۳۱
 فیک ۶۴۶
 کوری ۳۳۷
 کوری-وایس ۳۵۸
 لنز ۳۳۲
 ویدمان-فرانتس ۱۷۷
 هوک ۸۵
 $T^{3/2}$ بلوخ ۳۷۰
 T^3 دبی ۱۳۱
 قضیه بلوخ ۱۸۸
 قطبش‌پذیری ۵۱۰
 الکترونی ۵۱۱
 جدول ۵۱۳
 کره رسانا ۵۳۳
 قطبیدگی ۵۰۱
 اشباعی ۵۳۶

- فصل مشترک ۵۳۴
 قطره‌های الکترون-حفره ۴۸۷
 قواعد هوند ۳۳۹
 قواعد هیوم-روتیری ۶۸۳
 کاتوره‌ای
 روی هم‌چینی ۲۶
 شبکه ۶۲۸
 کار، تابع ۵۴۴
 کاهش ریلی ۶۳۹
 کرنش
 کشسان ۸۵
 مؤلفه‌های ۸۷
 کرونیگ-پنی، مدل ۱۸۹
 در فضای وارون ۱۹۶
 کره
 اوالد ۵۴۰
 فلزی ۵۳۳
 مایسنر ۲۸۷
 مد پلاسمونی ۴۷۰
 کریمرز-کرونیگ، رابطه‌های ۴۷۵، ۴۷۶
 کریمرز-هایزنبرگ ۴۷۵
 کلاگستون، رابطه ۳۰۱
 کلاؤسیوس-موسوتی، رابطه ۵۱۱
 کلوین، رابطه ۲۴۰
 کوارتز همجوش ۶۲۶
 کوانتش
 امواج کشسان ۱۱۶، ۷۱۱
 مدارها در میدان مغناطیسی ۲۶۹
 موج اسپینی ۴۲۱
 کوانتومی
 تداخل ۳۲۱، ۳۲۵
 جامد ۹۹
 نظریه
 پارامغناطیس ۳۳۴
 دیامغناطیس ۳۳۳
 نقطه‌های ۵۶۹، ۶۰۰
 حالت‌های بار ۶۰۵
 کوانتیدگی شار ۳۱۰
 کوپر، زوج‌های ۳۱۰، ۶۱۲، ۷۳۷
 کوری
 ثابت ۳۳۷
 قانون ۳۳۷
 کوری-وایس، قانون ۳۵۸
 کوشی، انتگرال ۴۷۶
 گاز الکترون بدون برخورد، رسانندگی ۴۷۸
 گاز فرمی ۱۵۰
 گاف
 انرژی ۱۸۶، ۱۸۷
 ابررساناها ۲۹۴، ۲۹۵
 پلاسمونهای ۴۷۱
 غیرمستقیم ۲۱۰
 مستقیم ۲۱۰
 نواری ۲۰۸، ۲۱۰
 گاف انحلال‌پذیری ۶۹۲
 گذار
 جابه‌جاشونده ۵۲۰
 بانظم-بی‌نظم ۵۱۶
 مرتبه اول ۵۲۵
 مرتبه دوم ۵۲۵
 فاز
 ساختاری ۵۱۴
 نظریه لاندائو ۵۲۳

- ۵۵۱، ۲۸۴، ۲۷۳ تراز
 نظریه
 گذار فاز ۵۵۳
 مایع فرمی ۴۵۸
 لاندائو-گینزبرگ، معادله ۷۴۰
 لاندائو، فرمول ۵۸۷
 لانژون
 دیامغناطیس ۳۳۲
 نتیجه ۳۳۳
 لاوه، معادله ۴۱، ۵۶۵، ۷۰۱
 لایه MOS ۵۴۸
 لبه نوار رسانش ۲۰۹
 لبه نوار ظرفیت ۲۰۹
 لغزش ۶۵۸
 لندن
 پیمانه ۷۳۶
 عمق نفوذ ۳۰۴، ۳۲۹
 معادله ۳۰۲، ۷۳۶
 لنز، قانون ۳۳۲
 لوتینگر، مایع ۵۸۵
 لورنتس
 عدد ۱۷۷
 میدان ۵۰۹
 لیتوگرافی باریکه الکترونی ۵۷۱
 لیدن-زاکس-تلی، رابطه ۴۵۵
 لیزر(های) ۴۲۸
 تزریقی ۵۶۲
 نیمرسانا ۵۶۲
 یاقوت ۴۲۸
 مات، گذار ۴۴۹
 مات-وانیه، اکستون ۴۸۱
- فلز-عایق مات ۴۴۹
 گذارهای بین نواری ۴۷۹
 گران روی ۶۳۰
 گردابی، حالت ۲۹۱، ۳۱۵، ۳۲۷
 گرمایونی، گسیل ۵۴۵
 گرمایی
 انبساط ۱۳۸
 جرم مؤثر ۱۶۶
 رسانندگی ۱۴۰، ۱۷۷
 اثر ایزوتوپی ۱۴۸
 جدول ۱۳۴
 شیشه ۶۳۰
 فلزها ۱۷۷
 یک بعدی ۶۱۸
 مقاومت ویژه گاز فونونی ۱۴۲
 یونش ۲۳۷
 گرونایزن، ثابت ۱۴۹
 گروه آهن ۳۴۱
 گروه لاتتانید ۳۳۹
 گسیل گرمایونی ۵۴۵
 گشتاور چهارقطبی الکتریکی ۴۱۷
 گینزبرگ-لاندائو
 پارامتر ۷۴۰
 معادله ۷۴۰
 لارمور
 بسامد ۳۳۲
 فرضیه ۳۳۲
 لاگرانژی، معادله های ۷۳۲
 لاتتانید، گروه ۳۳۹
 لاندائو
 پیمانه ۵۵۳

اپتیکی عرضی، TO ۱۱۱	مادلونگ
اکوستیکی طولی، LA ۱۱۱	انرژی ۷۲
اکوسیتیکی عرضی، TA ۱۱۱	ثابت ۷۴
بهنجار، شمارش ۱۲۵	ماکسول، معادلات ۵۰۱
فونونی نرم ۱۲۱	مایسنر، اثر ۲۸۷
نرم ۵۱۶، ۵۳۶	کره ۲۸۷
مراکز F ۴۱۴، ۶۵۰، ۶۵۴	مایع فرمی ۴۵۸
مراکز رنگ ۶۴۹	مایع لوتینگر ۵۸۵
مرزخانه‌های با زاویه کم ۶۶۵	مجموعه‌یابیهای شبکه‌ای در آرایه‌های دوقطبی ۷۰۹
مزوسکوپی، رژیم ۵۹۷	محاسبه نوار انرژی ۲۴۸
معادلات ماکسول ۵۰۱	محکهای پایداری ۱۰۳
معادله	مد پلاسمونی کره ۴۷۰
پواسون ۴۳۴	مد تنفسی شعاعی ۶۱۴
ترابرد بولترمن ۷۲۴	مدار(های)
حرکت الکترون ۲۱۱	استخوان سگی ۲۷۸
حرکت حفره ۲۱۸	الکترون ۲۵۴
ریچاردسون-داشمن ۵۴۵	باز ۲۵۴
زیروسکوپی ۴۰۳	مغناطومقاومت ۲۸۳
گینزبرگ-لاندائو ۳۰۶، ۷۴۰	حفره ۲۵۴
لاندائو-گینزبرگ ۳۰۶، ۷۴۰	فرین ۲۷۶
لاوه ۴۱، ۵۶۵، ۷۰۱	ناخالصی ۲۴۳
لندن ۳۰۲، ۷۳۶	مدل
موج	دبی، چگالی حالتها ۱۲۹
در پیوستار ۱۲۰	کرونیگ-پینی ۱۸۹
در شبکه دوره‌ای ۱۹۴	کلاسیکی ۱۵۱
معادله‌های بلوخ ۴۰۶	مغز خالی ۲۶۶
معادله‌های لاگرانژی ۷۳۲	هایزنبرگ ۳۵۹
مغناطوبلورین، انرژی ۳۸۴	مدول حجمی ۹۲
مغناطوبلاسمایی، بسامد ۴۷۰	گاز الکترون ۱۷۸
مغناطوتاکیسی ۳۹۳	مدول یانگ ۱۰۱
مغناطورسانندگی، تانسور ۱۷۹، ۵۴۸	مدهای
مغناطوژیریک، نسبت ۳۳۵، ۴۰۱	اپتیکی طولی، LO ۱۱۱

- مغناطوکشسانی، جفت شدگی ۳۹۶
 مغناطومقاومت ۵۴۸
 دو نوع حامل ۲۴۴
 غول آسا ۳۹۷
 مغناطیدگی ۳۳۶
 اشباعی ۳۳۷، ۳۶۰
 مغناطیسی، تشدید ۳۹۹
 مقاومت
 آلیاژها ۶۷۲
 برشی تک بلورها ۶۵۶
 سطحی ۱۸۱
 کوانتوم ۵۸۸
 مربع ۱۸۱
 هال ۵۴۹
 مقاومت ویژه
 الکتریکی ۱۷۰
 جدول ۱۶۹
 گرمایی گاز فونونی ۱۴۲
 نسبت ۱۷۱
 مقدار دولون و پتی ۱۳۵
 مگنتون
 پور ۳۳۵
 هسته‌ای ۴۰۱
 مگنتیت ۳۷۲
 مگنون (ها) ۳۶۴
 برانگیختگی گرمایی ۳۶۹
 پادفرومغناطیس ۳۸۱
 رابطه پاشیدگی ۳۹۵، ۳۶۶
 منطقه اول بریلوتن ۵۵، ۱۰۷، ۲۴۷
 منطقه بریلوتن ۴۱، ۲۴۷، ۲۸۱
 موج
 اسپینی ۳۶۴
- معادله
 در بیوستار ۱۲۰
 شبکه دوره‌ای ۱۹۰
 مولکولی، هیدروژن ۷۸، ۱۰۰
 میدان
 الکتریکی موضعی ۵۰۶
 بحرانی ۲۸۹، ۳۲۸
 بلور ۳۴۱
 لایه‌های نازک ۳۲۸
 لورنتس ۵۰۹
 واقطییدگی ۵۳۵
 میز، اساس کار ۴۲۶
 میکروالکترومکانیکی، دستگاههای ۶۱۸
 میکروسکوپ
 اپتیکی ۵۷۴
 الکترونی تراگسیلی (TEM) ۵۷۳
 الکترونی روبشی ۵۷۳
 تونلی روبشی (STM) ۵۷۵
 گمانه روبشی ۵۷۲
 نیروی اتمی ۵۷۸
 نیروی مغناطیسی ۳۹۳، ۵۸۰
 نابودی، عملگرهای ۷۱۴
 ناپایداری پاپرلز ۴۶۶
 ناخالصی
 رسانندگی ۲۳۳
 مدارهای ۲۴۳
 ناراستی (های)
 پارامغناطیسی ۴۱۴
 شونکی ۶۴۳
 فرنکل ۶۴۳، ۶۵۳
 نارسنگ (گارنت) های آهن ۳۷۵

نمودارهای فازی ۶۸۴، ۶۹۲	نانوبلورها ۵۶۸
نوار انرژی، محاسبه ۲۴۸	ترازهای انرژی ۵۹۸
نوارهای انرژی ۱۸۲، ۱۸۳	فلورسانی ۵۷۵
نوترونی، پراش ۵۶	نانوبلورین، جامد ۶۲۲
نوسانگر بلوخ ۲۴۲	نانوساختارها ۵۶۸
نوسانگری، قدرت ۵۱۴	نانولوله‌ها ۵۶۸
نوسانهای طولی پلاسما ۴۴۰	چگالی حالتها ۵۸۲
نهاد کسری یونی، جدول ۸۱	ساختار نواری ۶۱۹
نیروی لورنتس ۱۷۳	ناهمسانگردی، انرژی ۳۸۴
نیروی وادارنده ذره کوچک ۳۹۶	نایت، انتقال ۴۰۰
نیل، دمای ۳۷۷، ۳۷۸، ۳۷۹	نتیجه لاتزون ۳۳۳
نیل، دیوار ۳۹۷	نرم، مدهای ۵۱۶، ۵۳۶
نیمرسانا(های)	نسبت ژیرومغناطیسی ۳۳۵
بلورهای ۲۰۷	نسبت مقاومت ویژه ۱۷۱
بی‌شکل ۶۳۳	نظریه
ذاتی ۲۰۸	اختلال $k \cdot p$ ۲۸۲
کاستی‌دار ۲۳۳	کواتومی
گاف مستقیم، جدول ۲۱۰	پارامغناطیس ۳۳۴
لیزرهای ۵۶۲	دیامغناطیسی ۳۳۳
واگن ۴۵۱	لاتداؤ
نیمرساناهای بی‌شکل ۶۳۳	گذار فاز ۵۲۳
نیمه‌فلزها ۱۸۳، ۲۴۰	مایع فرمی ۴۵۸
وابستگی خطوط بازتاب به دما ۷۰۱	BCS ۲۹۹، ۳۰۸
وادارندگی ۳۸۵، ۳۹۰	RKKY ۶۹۸
وارون، بردارهای شبکه ۳۷	نظم
وارون، نقاط شبکه ۳۵	بلندبرد ۶۸۷
واقطبیدگی، میدان ۵۳۵	پارامتر ۷۴۰
واگرد، فرایند ۱۴۵	کوتاه‌برد ۶۸۷
واگنی ۱۵۳	نقاط ذوب، جدول ۶۰
وامغناطیدگی	نقاط شبکه وارون ۳۵
آیزنرتروپیک ۳۴۶	نقطه‌های بحرانی ۴۷۹
	نقطه‌های کواتومی ۵۶۹، ۶۰۰

- بی‌دررو ۳۴۷
 ضریبهای ۴۱۹
 وان هوف، تکنیگیهای ۵۸۲، ۱۳۷
 وان‌دروالس، برهم‌کنش ۶۴
 وانیه، توابع ۲۸۳
 واهلدس ۴۰۳
 اورباخ ۴۰۴
 رامان ۴۰۴
 زمان
 اسپین-شیکه ۴۰۳
 طولی ۴۰۳
 مستقیم ۴۰۴
 وایس، میدان ۳۵۷
 ون ولک، پارامغناطیس ۳۴۶
 ویدمان-فرانتس، قانون ۱۷۷
 ویکرز، عدد سختی ۶۷۷
 ویگنر-ساتیس
 روش ۲۵۶
 شرط مرزی ۲۶۳
 یاخته ۲۶۴، ۴۲، ۱۳، ۱۰
 هاگن-روینز، رابطه ۴۹۹
 هال
 اثر ۱۷۴
 با دو نوع حامل ۲۴۳
 پیوندگاه بالیستیکی ۵۹۶
 ضریب ۱۷۴
 مقاومت ۵۴۹
 هایزنبرگ، مدل ۳۵۹
 هسته‌ای
- پارامغناطیسی ۳۳۱
 تشدید چهارقطبی ۴۱۷
 تشدید مغناطیسی ۳۹۹
 جدول ۴۰۲
 مگنتون ۴۰۱
 وامغناطیدگی ۳۴۸
 هلیوم مایع ۱۷۰
 همدوسی، طول ۷۴۲، ۳۰۵
 ذاتی ۳۰۶
 هوک، قانون ۸۵
 هوند، قواعد ۳۳۹
 هیوم-روتزی، قواعد ۶۸۳
 یاخته بسیط ۸
 ویگنر-ساتیس ۴۱
 یکه ۸
 یاخته ویگنر-ساتیس ۲۶۴، ۴۲، ۱۳، ۱۰
 یاخته یکه ۸
 یاقوت، لیزر ۴۲۸
 یان-تلر، اثر ۲۳۲
 به‌دام افتادن ۶۵۳
 یکسوسازی ۵۵۶
 یکه، یاخته ۸
 یوتکتیکها ۶۹۲
 FQHE ۵۵۴
 IQHE ۵۵۱، ۵۵۰
 mesh ۵۳۹
 NMR ۳۹۹