



# فیزیک حالت جامد ۲

مؤلف:

دکتر امیرعباس صبوری دودران



## فهرست

نه	پیشگفتار
1	فصل اول. ساختار الکترونی جامدات
2	مقدمه
2	1-1 فلزات از منظر کلاسیکی
4	1-1-1 مدل درود
5	2-1-1 تقریب زمان واهلش
10	3-1-1 شکست های مدل درود
14	2-1 فلزات از منظر کوانتومی
15	1-2-1 مدل الکترون آزاد
17	2-2-1 نوارهای انرژی در جامدات
23	3-2-1 نظریه بلوخ
28	4-2-1 شرط بورن - وان کارمن یا شرط مرزی تناوبی
32	5-2-1 الکترون در یک بلور ایده آل
44	6-2-1 شرط پراش الکترون های ظرفیت
50	7-2-1 برهم کنش الکترون با پتانسیل تناوبی ضعیف (مدل الکترون تقریباً آزاد)
57	3-1 رویکرد دیگر در ساختار الکترونی جامدات برای الکترون های مغزی
58	1-3-1 مدل تنگ بست
73	4-1 سطح فرمی
90	پیوست 1-1 چگالی حالت انرژی برای یک ساختار نواری
93	مسائل
98	سؤالات تستی

103	فصل دوم. نیم‌رساناها و نارساناها
104	مقدمه
104	1-2 نیم‌رساناها
104	1-1-2 ساختار بلورین نیم‌رساناها $In_xGa_{1-x}N$
106	2-1-2 ساختار الکترونی نیم‌رسانا
113	3-1-2 محاسبه چگالی الکترون n و حفره p در نوارهای رسانش و ظرفیت
118	4-1-2 ناخالصی در نیم‌رسانا (نیم‌رساناهای غیرذاتی)
124	5-1-2 احتمال پرشدگی ترازهای ناخالصی‌های بخشنده و پذیرنده
126	6-1-2 پتانسیل شیمیایی نیم‌رساناهای غیرذاتی و اثرات دما بر آن
130	7-1-2 خواص انتقال الکتریکی در نیم‌رساناها
132	8-1-2 حاملین اقلیت در نیم‌رساناها
134	9-1-2 اثر هال در نیم‌رسانا
139	2-2 نارساناها (دی‌الکتریک‌ها)
139	1-2-2 خواص دی‌الکتریکی مواد
143	2-2-2 دی‌الکتریکی با اتم‌های قطبیده ذاتی و غیر ذاتی در حضور میدان الکتریکی
145	3-2-2 محاسبه قطبش الکتریکی یک دی‌الکتریک
148	4-2-2 قطبش‌پذیری یونی یک دی‌الکتریک یونی در حضور میدان الکتریکی
149	4-2-2 فروالکتریک‌ها
149	3-2 خواص نوری مواد
150	1-3-2 رفتار مواد در معرض نور مرئی
166	2-3-2 پدیده‌ی جذب از نقطه‌نظر ساختار نواری جامدات
176	4-2 اکسیتون‌ها
182	پیوست-1. محاسبه احتمال حضور الکترون در تراز بخشنده و حفره در تراز پذیرنده
185	پیوست-2. میدان الکتریکی در داخل یک دی‌الکتریک (از منظر کلاسیکی)

195	فصل سوم. خواص مغناطیسی چامدات
196	مقدمه
198	1-3 خواص مغناطیسی گاز الکترونی بدون برهم‌کنش در حضور میدان <b>B</b>
220	2-3 اثرات میدان مغناطیسی بر الکترون‌های شبه مغزی مواد
220	1-2-3 رفتار پارامغناطیسی الکترون‌های شبه‌مغزی مغناطیسی در حضور میدان
229	2-2-3 نگاه کوانتومی به پارامغناطیسی سیستم
237	3-3-3 قانون هوند
242	3-3 مغناطش یک سیستم با برهم‌کنش
243	1-3-3 نظریه هایزنبرگ
245	2-3-3 انرژی تبادل
252	3-3-3 فرومغناطیس
256	4-3-3 پادفرومغناطیس
257	5-3-3 محاسبه مدل میدان متوسط وایس برای یک پادفرومغناطیس
262	6-3-3 فری‌مغناطیس
263	7-3-3 امواج اسپینی فرومغناطیسی
267	8-3-3 امواج اسپینی پادفرومغناطیسی
269	9-3-3 جامدهای پارامغناطیسی
270	پیوست 1-3 محاسبه سهم حرکتی کمیت پذیرفتار مغناطیسی <b>C</b> یک گاز الکترونی
274	پیوست 2-3 قانون سوم هوند
278	پیوست 3-3 محاسبه ضریب لانده <b>g</b>
280	مسائل
284	سوالات تستی

289	فصل چهارم. خواص آبرسانایی
290	مقدمه
290	1-4 فلزات بهنجار و آبرساناها
294	2-4 شدت میدان مغناطیسی بحرانی
297	3-4 آبرسانای نوع اول و دوم
299	4-4 معادلات لندن
308	1-4-4 شماره کوانتیزه در داخل یک حلقه آبرسانا
310	5-4 مدل BCS
312	1-5-4 اثرات جرم ایزوتوپی در آبرساناها
314	2-5-4 تونل زنی آبرساناها
315	3-5-4 رفتار ظرفیت گرمایی در آبرسانا
318	مسائل
319	سؤالات تستی
323	جداول
325	مراجع

## پیشگفتار

فیزیک حالت جامد به دلیل گستردگی و نیز ارتباط مستقیم آن با ریاضیات پیشرفته، الکترومغناطیس، اپتیک، بلورشناسی، شیمی و ... به سختی می‌توان کتابی در حجم کم نوشته شود که اولاً مطالب ساده بیان گردد و ثانیاً پیوستگی مطالب در آن رعایت شود. از این رو در نگارش این کتاب بسیار تلاش نمودم تا خودخوان بودن این کتاب تأمین گردد ولی این کتاب به دلایل گفته شده دارای کم‌وکاستی‌هایی است که از اساتید محترم و دانشجویان عزیز تقاضا دارم با خواندن این کتاب هر گونه انتقاد و یا اشکالاتی چه محتوایی و چه نگارشی که در این کتاب می‌بینند به آدرس ایمیل داده شده فرستاده تا بتوانم در ویرایش‌های بعدی این اشکالات را برطرف نمایم. لازم به ذکر است که در هنگام نگارش این کتاب فرض بر آن شده است که دانشجویان، با دروس ریاضی فیزیک 1 و 2، مکانیک کوانتومی 1.2، مکانیک آماری، ترمودینامیک و فیزیک حالت جامد 1 آشنا باشند.

در مقطع کارشناسی رشته فیزیک، دانشجویان گرایش فیزیک حالت جامد دو درس تخصصی سه واحدی با عناوین فیزیک حالت جامد 1 و فیزیک حالت جامد 2 را می‌گذرانند. این کتاب در ادامه کتاب فیزیک حالت جامد 1 تهیه و تنظیم شده است. در کتاب فیزیک حالت جامد 1 ما با بلور که متشکل از اتم‌ها با یک آرایش منظم که یک شبکه را پدید می‌آورند، آشنا شدیم. همچنین در آن کتاب به معرفی ساختارهای مختلف بلور، انواع پیوندهای اتمی و ارتعاشات شبکه‌ای می‌پردازد. الکترون‌ها می‌توانند خواص مختلف الکترونی و مغناطیسی در بلور پدید آورند که بررسی این خواص به‌طور دقیق امکان‌پذیر نمی‌باشد ولی با ساده سازی و استفاده از تقریب‌ها ما را به سمت ساختار الکترونی واقعی بلور هدایت نمی‌کنند. در این کتاب در ابتدا به بررسی

ساختار الکترونی فلزات پرداخته است. الکترون‌های رسانش با تقریب مرتبه اول، می‌توان به مانند الکترون‌های تقریباً آزاد در نظر گرفته شوند. از این رو در فصل اول به بررسی ساختار الکترونی یک گاز الکترونی پرداخته‌ایم. این تقریب، یک سری اطلاعات کلی از فلزات در اختیار ما می‌گذارد ولی با این مدل نمی‌توان بین فلزات تمایزی در ساختار الکترونی‌شان قائل شد. در فصل دوم تقریب را کمی واقع‌بینانه‌تر نموده و پتانسیل یون‌های شبکه را به مجموعه گاز الکترونی به مانند یک اختلال اضافه نموده‌ایم. این اختلال باعث ایجاد گاف‌های در نوارهای انرژی می‌شود. برای بررسی ساختار الکترونی دیگر دسته الکترون‌ها (الکترون‌های ظرفیت و مغزی) نیاز به مدل‌های دیگر است که در فصل سوم به چند مدل که در پیدایش مدل‌های واقع‌بینانه‌تر کمک کرده‌اند، به آنها پرداخته می‌شوند. فصل چهارم به معرفی سطح فرمی به عنوان تعریف دیگری از فلزات می‌پردازد. فلزات به دلیل داشتن هندسه سطح فرمی متفاوت دارای خواص الکتریکی و مغناطیسی متفاوتی می‌باشند. دسته دیگر مواد نیم‌رساناها هستند که در دماهای پایین رفتاری عایق‌گونه و در دماهای بالا رفتاری فلزگونه دارند که در فصل پنجم به خواص الکترونی این دسته مواد و نیز به معرفی حفره به عنوان دیگر حاملین مهم در رسانش نیم‌رساناها پرداخته است. مواد نیم‌رسانا امروزه نقش کلیدی در صنعت الکترونیک بازی می‌کند. در ادامه فصول، به دسته‌بندی مواد مغناطیسی از لحاظ مغناطیسی (فرومغناطیس، فری‌مغناطیس و آنتی‌فرومغناطیسی) و رفتار این دسته مواد در حضور میدان مغناطیسی (پارامغناطیسی یا دیامغناطیسی) و نیز امواج اسپینی و مگنون‌ها (برانگیختگی مغناطیسی) می‌پردازد. در داخل هر فصل به نکات مهمی به طور مشخص و مجزا بیان و برخی دیگر از آنها در پاورقی جهت تکمیل مطالب آورده شده است که به خوانندگان محترم توصیه می‌شود به آنها توجه نمایند.

در انتها لازم می‌دانم از دوست و همکار محترم جناب آقای دکتر سید احمد بابانژاد به خاطر نقطه نظرهای ارزشمندشان که در ویرایش این کتاب بنده را یاری نموده‌اند کمال سپاسگزاری را داشته باشم و نیز از کلیه همکاران محترم تدوین مخصوصاً مدیریت محترم تدوین جناب آقای دکتر محمدعلی ابراهیمی و معاون محترم تدوین جناب آقای محمدرضا ثمری و کارشناسان محترم تدوین سرکار خانم اشرف شوریابی، سرکار خانم زینب حیدری عراقی، سرکار خانم خدیجه علی‌نژاد و جناب



آقای امیر عالی به خاطر زحمات بی‌دریغ‌شان در راستای چاپ این کتاب، کمال  
سپاسگزاری و امتنان را دارم.  
این کتاب را به همسر و فرزندانم به خاطر صبوری‌شان در طی نگارش این کتاب  
تقدیم می‌دارم.

امیرعباس صبوری‌دودران<sup>1</sup>  
تابستان 1393

# فصل اول

## ساختار الکترونی جامدات

### هدف کلی

از ساده‌ترین ویژگی‌های مواد که به سادگی قابل آزمایش می‌باشند، می‌توان به رسانندگی الکتریکی و حرارتی اشاره نمود. در ابتدای قرن بیستم، مورد توانست رسانندگی فلزات را به‌طور کلاسیکی تخمین بزند و سپس با آغاز نگرش کوانتومی و ارایه نظریه نواری جامدات شناخت مواد روز به روز پیشرفت نمود. در این فصل، بعد از معرفی نظریه مورد، به ساده‌ترین مدل (مدل الکترون آزاد) برای توصیف الکترونی فلزات خواهیم پرداخت. در ادامه دانشجویان با دو رویکردهای مهم دیگر مانند الکترون تقریباً آزاد و تنگ‌بست به توصیف ساختار الکترونی بلور آشنا می‌شوند. همچنین در راستای معرفی این رویکردها، با کمیت‌های مهمی مانند چگالی حالت انرژی، نوار انرژی، جرم مؤثر الکترون، گاف انرژی و ... نیز آشنا خواهند شد.

### هدف‌های یادگیری

دانشجو پس از مطالعه این فصل باید،

1. با ساختار الکترونی فلزات ساده و مدل‌های ساده برای توصیف خواص الکترونی آنها مانند مدل درود، تقریب الکترون آزاد (گاز الکترونی بدون برهم‌کنش)، موفقیت‌های و شکست‌های این مدل‌ها آشنا شود.

2. با شرایط مرزی پتانسیل بی‌نهایت و تناوبی (بورن-ون کارمن) آشنا شود و نشان دهد که الکترون آزاد در یک جعبه با ابعاد محدود، اندازه حرکت و انرژی کوانتیزه دارد.
3. با نظریه نواری جامدات و تابع موج بلوخ به‌عنوان تابع موج الکترون در بلور با یک پتانسیل دوره‌ای آشنا شود.

### مقدمه

این فصل، مروری بر مدل‌های به‌کار رفته در شناخت ساختار الکترونی جامدات از آغاز کشف الکترون و پیدایش مکانیک کوانتومی دارد. مدل الکترون آزاد از ساده‌ترین مدل‌هایی است که به خوبی قادر است، تا حدودی جامدات فلزی گروه اول و دوم جدول تناوبی را توصیف نماید، ولی برای دیگر گروه‌های جدول تناوبی نمی‌تواند توصیف خوبی ارائه دهد. از این رو، به دلیل سادگی مدل الکترون آزاد و کاربرد نسبتاً خوب آن در فلزات ساده<sup>۱</sup>، که دارای اربیتال‌های  $d$  یا  $f$  نیمه‌پر نمی‌باشند، پرداخته می‌شود و در ادامه، با گسترش این مدل به نظریه نواری، سعی بر آن دارد که به برخی از سؤالاتی که توسط مدل الکترون آزاد بی‌پاسخ مانده است، پاسخ داده شود. از نتایج مهم نظریه نواری، می‌توان به طبقه‌بندی و توصیف ساختار الکترونی و رسانندگی مواد اشاره نمود.

### 1-1 فلزات از منظر کلاسیکی

کشف الکترون به بیش از یک قرن پیش برمی‌گردد که از آن زمان مطالعات و تحقیقات در زمینه فیزیک حالت جامد آغاز شد. این ذره باردار، ساده‌ترین پدیده‌ی قابل مشاهده به نام رسانندگی الکتریکی در جامدات را توضیح می‌دهد. در اینجا، این سوال مطرح می‌شود که اگر همه مواد الکترون دارند، پس چرا برخی رسانا و برخی نارسانای الکتریکی هستند؟ این ویژگی رسانا یا نارسانا بودن مواد، می‌تواند خاصیتی باشد که بتوان توسط آن، مواد را دسته‌بندی نمود. در این فصل ابتدا به بررسی خواص فلزات خواهیم پرداخت، که اهم دلایل آن عبارت هستند از:

- دو سوم از عناصر جدول تناوبی فلز هستند.

۱. عضو گروه عناصر واسطه نباشند.

### 3 ساختار الکترونی جامدات

فلزات در سمت چپ جدول تناوبی قرار دارند. پوشش الکترونی این عناصر را می‌توان به دو قسمت تقسیم نمود: الف) آخرین تراز انرژی قسمتی پر با تک الکترونی که می‌توانند به راحتی آن را از دست دهند و به‌طور یکنواخت در فضای بین یونها توزیع شوند (گروه قلیایی) ب) پوشش الکترونی با ترازهای انرژی کاملاً پر (گروه قلیایی خاکی). به‌عنوان مثال، جامد لیتیم با فاصله بین‌اتمی 3 آنگستروم و شعاع یونش 0/5 آنگستروم، دارای فضای خالی<sup>1</sup> بسیار در بین یونها است. از این رو الکترون‌های رسانش قادر هستند در فضای یونی آزادانه حرکت کنند و به مانند کلاسی، یونها را در بر گیرند تا سیستم را به حداقل انرژی تقلیل و مجموعه‌ی پایداری را تشکیل دهند. این نوع پیوند در مقایسه با پیوندهای کووالانسی که بسیار جایگزیده و جهت‌مند هستند، جایگزیده و جهت‌مند نیستند. از این رو نقش پیوندی ضعیف‌تری را بازی می‌نمایند که آن باعث خاصیت چکش‌خواری در فلزات شده است.

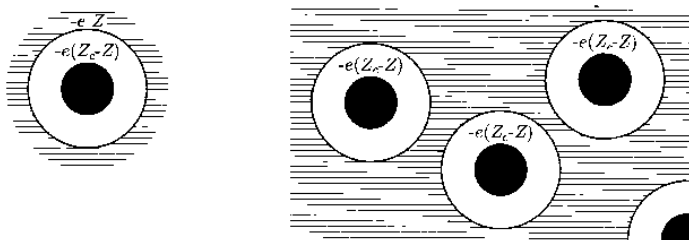
با تشکیل ساختاری بلوری فشرده و افزایش چگالی الکترونی، رسانندگی فلزات افزایش می‌یابد. از این رو ساختار بلوری فلزات به گونه‌ای است که دارای بیشترین تعداد اتم در سلول واحد با بیشترین همسایه برای هر اتم می‌باشند. این گونه ساختارها عبارت هستند از: شش وجهی پکیده HCP، مکعبی مرکز سطحی FCC و مکعبی مرکز حجمی BCC.

هسته‌های یونی فلزات بسیار کوچک‌اند که در فضای بلور به‌طور منظم جای گرفته‌اند. الکترون‌های ظرفیت و رسانش در این فضا پراکنده هستند و این الکترون‌های تقریباً آزاد، بار هسته‌های یونی را به مقدار  $e(Z - Z_c)$  می‌بینند که در اینجا  $e$  مقدار بار الکترون،  $Z$  عدد اتمی (تعداد کل الکترون‌ها) و  $Z_c$  تعداد الکترون‌های جایگزیده که هسته را استتار نموده‌اند (الکترون‌های مغزی)، می‌باشند.

مطابق شکل (1-1)، بخش سیاه مربوط به هسته اتم، بخش سفید الکترون‌هایی که به هسته مقید هستند (الکترون‌های مغزی) و بخش هاشور خورده، فضایی است که الکترون‌های ظرفیت و رسانش تقریباً آزادانه در آن حرکت می‌کنند و نسبت به بقیه الکترون‌ها در فاصله دورتری از هسته قرار دارند، از این رو، سهم اثرات کولنی بار هسته

1. فضای خالی از حضور یونها که توسط الکترون‌ها اشغال شده است.

بر روی این دسته الکترون‌ها (به دلیل استتار هسته توسط الکترون‌های مغزی و دوری از یون‌ها) کاهش می‌یابد.



شکل 1-1. نمایش شماتیک سه ناحیه مختلف شامل: هسته (بخش سیاه)، الکترون‌های جایگزیده استتار کننده هسته که الکترون‌های مغزی نامیده می‌شوند (بخش سفید) و الکترون‌های ظرفیت و رسانش (بخش هاشور خورده).

در ادامه به اولین مدل و ساده‌ترین مدل که درست سه سال بعد از کشف الکترون در سال 1900 ارائه شد، می‌پردازیم.

### 1-1-1 مدل درود<sup>1</sup>

سوالات بسیاری در خصوص رسانندگی مواد در زمان‌های بسیار دور مطرح شده بود که بی‌پاسخ مانده بود. در ابتدای قرن بیستم درست سه سال بعد از کشف الکترون، الکترون به عنوان ذره‌ای با بار الکتریکی منفی، عامل رسانندگی در مواد معرفی شد. در آن دوره از زمان، چارچوب تفکرات فیزیکدانان از نوع نیوتونی و ترمودینامیک بود و الکترون را به عنوان یک ذره کاملاً کلاسیکی می‌پنداشتند. از جمله سوالات بی‌پاسخ در آن دوره، محاسبه سرعت الکترون و رسانندگی متناهی در فلزات در حضور میدان الکتریکی بود. برای اولین بار درود برای توجیه عدم رسانندگی نامتناهی فلزات، حضور یون‌ها در جامدات و برخورد الکترون‌ها با یون‌ها دانست<sup>۲</sup>. او الکترون را به مانند گلوله‌ای سخت و بسیار کوچک باردار که در حضور میدان الکتریکی شتاب می‌گیرد و

1. The Drude model

۲. ولی براساس نظریه‌ی نواری (بخش (1-2-2)) نشان داده می‌شود که دردمای صفر مطلق الکترون‌ها توسط یون‌های یک شبکه منظم ایده‌آل پراکنده نمی‌گردند. به زبان ساده‌تر الکترون‌های رسانش در یک بلور ایده‌آل یون‌های منظم بلور را نمی‌بینند تا پراکنده شوند. در این‌جا فرض پراکندگی اسپینی در نظر گرفته نشده است.

در نهایت می‌تواند در اثر برخوردهای پی‌درپی با یون‌های شبکه در طی مسیر حرکتی خود با یک سرعت متوسط (سرعت سوق) حرکت کند.

مدل درود مانند هر مدل دیگری دارای مفروضاتی است که عبارت هستند از:

• الکترون‌های متحرک فقط با هسته‌های یونی برخورد می‌کنند که در فضا جایگزیده هستند.

• الکترون‌ها در بین برخوردها هیچ‌گونه برهم‌کنشی با یکدیگر و با یون‌ها ندارند.

• برخورد از نوع لحظه‌ای است که فقط باعث تغییر جهت سرعت الکترون‌ها می‌شود. جهت پراکندگی کاملاً تصادفی فرض می‌شود.

• تعادل گرمایی الکترون با محیط پیرامونش فقط در لحظه برخورد با یون‌های شبکه است که با سرعت معادل با انرژی گرمایی یون‌ها از آن‌ها جدا می‌شود.

احتمال برخورد یا آهنگ برخورد الکترون‌ها با هسته‌های یونی در واحد زمان

برابر  $\frac{1}{t}$  است که در اینجا  $t$  متوسط زمان برخورد الکترون در برخورد پی‌درپی با یون‌ها می‌باشد که آن را می‌توان برابر با زمان واهلش<sup>1</sup> الکترون در نظر گرفت.

**نکته 1-1:** همانطور که در زیرنویس به آن اشاره شد. در یک بلور ایده‌آل در دمای صفر مطلق یون‌های شبکه عامل پراکندگی نمی‌باشند ولی عدم وجود یک بلور ایده‌آل باعث می‌شود تا برخی عوامل از جمله ناخالصی‌ها، دررفتگی‌ها، ناکاملی‌ها و ارتعاشات شبکه‌ای، عوامل پراکندگی باشند. از این رو با یک بازنگری در روابط مورد و معرفی یک زمان واهلش برای هر یک از این عوامل پراکندگی، می‌توان به درستی از روابط مورد در توصیف کمیت‌های فیزیکی استفاده نمود.

### 2-1-1 تقریب زمان واهلش

در درس الکترومغناطیس دیدیم، می‌توان چگالی جریان الکتریکی  $\mathbf{J}$  یک رسانا را برحسب سرعت متوسط ذرات  $\langle \mathbf{v} \rangle$  و چگالی بار الکتریکی الکترون‌ها  $(r = n(-e))$  به صورت زیر نوشت:

$$\mathbf{J} = r \langle \mathbf{v} \rangle = -ne \frac{\langle \mathbf{p} \rangle}{m_e} \quad (1-1)$$

<sup>1</sup>. Relaxation time

که در آن  $m_e$  جرم الکترون،  $n$  چگالی الکترون و  $\langle \mathbf{p} \rangle$  متوسط اندازه حرکت می‌باشند. تحول زمانی  $\mathbf{p}$  در بازه زمانی  $dt$  تحت اثر نیروی خارجی  $\mathbf{f}(t)$  را در نظر بگیرید. احتمال برخورد و عدم برخورد در طی بازه‌ی زمانی  $t$  و  $t+dt$  به ترتیب برابر  $dt/t$  و  $(1-dt/t)$  هستند. متوسط اندازه حرکت الکترون در زمان  $(t+dt)$  با فرض این‌که در بازه زمانی  $dt$  برخوردی صورت نپذیرد، برابر است با:

$$\langle \mathbf{p}(t+dt) \rangle = (1 - \frac{dt}{t}) \langle \mathbf{p}(t) \rangle + \frac{\mathbf{f}(\mathbf{p}(t))}{\hbar t} dt + O(dt)^2 \quad (2-1)$$

داخل پرانتز دوم سمت راست عبارت (2-1) همان بسط تیلور اندازه حرکت می‌باشد که در ضریب احتمال عدم پراکندگی  $(1 - \frac{dt}{t})$  ضرب شده است. با استفاده از تعریف نیرو به صورت  $\langle \mathbf{f}(t) \rangle = \frac{\mathbf{f}(\mathbf{p}(t))}{\hbar t}$  در رابطه‌ی (2-1)، متوسط تغییرات اندازه حرکت تا مرتبه  $O(dt)^2$  قبل از برخورد برابر است با:

$$d\langle \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{p}(t+dt) \rangle - \langle \mathbf{p}(t) \rangle = \langle \mathbf{f}(t) \rangle - \frac{\langle \mathbf{p}(t) \rangle}{t} dt + O(dt)^2 \quad (3-1)$$

که با تقسیم طرفین رابطه (3-1) به  $dt$ ، عبارت  $d\langle \mathbf{p} \rangle / dt$  برابر با نیروهای متوسط خارجی  $\langle \mathbf{f}(t) \rangle$  بر الکترون و نیروی اتلافی  $-\frac{\langle \mathbf{p}(t) \rangle}{t}$  ناشی از برخورد الکترون با عوامل پراکندگی می‌باشد که در اینجا مورد عامل پراکندگی را اشتباهاً یون‌های شبکه می‌دانست. با در نظر گرفتن  $dt \ll 0$  می‌توان از جملات مرتبه  $(dt)^2$  به بالا صرف‌نظر کرد (رابطه (4-1)).

$$\frac{d\langle \mathbf{p}(t) \rangle}{dt} = \langle \mathbf{f}(t) \rangle - \frac{\langle \mathbf{p}(t) \rangle}{t} \quad (4-1)$$

**نکته 1-2:** اگر به زمان برخورد در عبارت (4-1) به عنوان طول عمر یک فرآیند به آن نگاه شود از این‌رو رفتار یک سیستم با طول عمر  $t$  نسبت به یک سیستم بدون طول عمر، متفاوت می‌گردد.

**نکته 1-3:** نکته مهم دیگر نهفته شده در رابطه (4-1) این است که این برخوردها (الکترون با عوامل پراکندگی) سیستم را به سمت یک شرایط پایا هدایت می‌کنند.

## 7 ساختار الکترونی جامدات

از این رو عدم وجود پراکندگی در سیستم نمی‌تواند در حضور میدان‌های خارجی شرایط پایایی را ایجاد نماید. از این رو در یک بازه‌ی زمانی کوچک در مقایسه با زمان  $t$  ( $dt \ll t$ ) شرایط پایا برقرار نمی‌باشد و شکل قانون دوم نیوتون به صورت  $\frac{d\langle \mathbf{p}(t) \rangle}{dt} = \langle \mathbf{f}(t) \rangle$  را در آن بازه زمانی کوچک  $dt$  خواهد داشت.

سیستم یک گاز الکترونی بدون برهم‌کنش را که تحت اثر میدان الکتریکی یکنواخت  $\mathbf{E}$  قرار دارد را در نظر بگیرید. نیروی اعمالی بر هر الکترون برابر  $\mathbf{f}(t) = -e\mathbf{E}$  است که در حالت پایا متوسط تغییرات زمانی اندازه حرکت  $\frac{d\langle \mathbf{p}(t) \rangle}{dt}$  برابر با صفر می‌گردد.<sup>۱</sup> از این رو با توجه به رابطه (4-1)، متوسط اندازه حرکت الکترون در بلور به صورت رابطه (5-1) نتیجه می‌شود:

$$-\frac{\langle \mathbf{p}(t) \rangle}{t} - e\mathbf{E} = 0 \quad \text{پ} \quad \langle \mathbf{p}(t) \rangle = -te\mathbf{E} \quad (5-1)$$

$$\langle \mathbf{V} \rangle = \frac{-e\mathbf{E}t}{m}, \quad \langle \mathbf{J} \rangle = -ne\langle \mathbf{V} \rangle \quad (6-1)$$

با استفاده از قانون اهم،  $\mathbf{J} = s\mathbf{E}$ ، رسانندگی الکتریکی به صورت رابطه زیر به دست می‌آید:

$$s = \frac{ne^2t}{m_e} \quad (7-1)$$

با استفاده از رابطه (7-1) و با در نظر گرفتن رسانش الکتریکی فلزات  $s$  به طور تجربی با چگالی الکترونی  $n = 10^{22} - 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ ، زمان واهلش برابر  $t = 10^{15} \text{ s} - 10^{14} \text{ s}$  خواهد شد. برای به دست آوردن مسافت آزاد میانگین کافی است سرعت متوسط الکترون در جامدات را داشته باشیم. با توجه به مدل درود، الکترون‌ها با برخورد با یون‌های شبکه می‌تواند با محیط تبادل حرارتی داشته باشند که طبق قضیه همپاری

۱. زمان محاسبه متوسط زمانی به مراتب بسیار بیشتر از زمان واهلش می‌باشد.  
 ۲. در دمای اتاق نوعاً فلزات معمولی دارای مقاومت ویژه  $r = \frac{1}{s} \sim 1 - 20 \text{ m}\Omega \text{ cm}$  می‌باشد.



انرژی در مکانیک آماری، می توان متوسط سرعت الکترون ها در دمای  $T$  را به دست آورد.

$$\frac{1}{2} m_e \langle v^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T \quad (8-1)$$

سرعت به دست آمده از رابطه (8-1) به سرعت پخش یا سرعت حرارتی، معروف می باشد. این سرعت جهت ارجحی در فضا ندارد، از این رو متوسط جابه جایی الکترون ها صفر خواهد شد (از این رو سرعت متوسط الکترون ها صفر می باشد  $\langle \mathbf{v} \rangle = 0$ ). جذر مجذور متوسط این سرعت  $\sqrt{\langle v^2 \rangle}$  از مرتبه  $10^7 \text{ cm/s}$  است که مقداری است بسیار بزرگتر از آنی است که از تجربه به دست می آید. با در نظر گرفتن سرعت پخش و زمان واهلش سیستم  $t = 10^{15} \text{ s} - 10^{14} \text{ s}$ ، مقدار پویش آزاد میانگین<sup>۱</sup> (متوسط مسافت آزاد بین دو برخورد متوالی) را می توان تخمین زد  $v t = 0/1 - 1 \text{ nm}$  که تقریباً با فاصله بین اتمی از مرتبه چند اتم در جامدات معادل است. این نتیجه ی خوشحال کننده برای درود در آن زمان بود ولی بعد از ظهور فیزیک کوانتومی و نظریه نواری الکترون و اندازه گیری هایی که در دماهای پایین انجام شده است نشان داده می شود که مقدار پویش آزاد میانگین از مرتبه سانتی متر (تقریباً  $10^8$  برابر فاصله بین اتمی) می باشد که با نظریه درود مطابقتی نداشت. در آینده نشان خواهیم داد، الکترون در فلزات ایده آل<sup>۲</sup> در دمای صفر مطلق هیچ گونه پراکندگی نخواهند داشت و پراکندگی به دست آمده به دلیل عدم ایده آل بودن فلزات می باشد.

بایستی به این نکته اشاره نمود با حضور میدان الکتریکی حرکت الکترون ها جهت ارجحی پیدا می نماید که متوسط جابه جایی الکترون ها دیگر صفر نخواهد شد. سرعت متوسط به دست آمده از این جابه جایی سرعت سوق (یا سرعت رانش) می نامند. از نگاه کلاسیکی به دلیل کوچکی این جابه جایی الکترون (که ناشی از برخورد پی درپی الکترون ها با عوامل پراکندگی) در جهت میدان الکتریکی، سرعت سوق  $\mathbf{v}_d$  بسیار

۱. Mean Free Path

۲. فلزاتی با شبکه بلوری کاملاً یکسان و منظم، بدون هیچ گونه ناخالصی و درفتگی در آنها.

## 9 ساختار الکترونی جامدات

کوچکی را نتیجه می‌دهد. این سرعت بسیار کوچکتر از سرعت حرارتی (سرعت پخش) که در پارگراف قبلی به آن اشاره شده است، خواهد بود. جریان الکتریکی حاصله در فلزات ناشی از سرعت سوق می‌باشد. بدون حضور میدان الکتریکی اندازه حرکت متوسط الکترون‌ها برابر صفر خواهد شد که با اعمال میدان الکتریکی الکترون‌ها اندازه حرکتی متوسطی معادل  $m_e \mathbf{v}_d$  را از میدان کسب می‌کند که در شرایط پایا به مانند روابط (5-1) و (6-1) خواهیم داشت.

$$\frac{d\langle \mathbf{P} \rangle}{dt} = -\frac{m_e \mathbf{r}}{t} - e\mathbf{E} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{r} \mathbf{v}_d = -\frac{et}{m_e} \mathbf{E} = -m_e^* \mathbf{E}$$

که در اینجا  $m_e^* = \frac{et}{m_e}$  تحرک‌پذیری الکترون است که متناسب با متوسط زمان برخورد  $t$  (زمان واهلش) می‌باشد، از این رو با در دست داشتن تحرک‌پذیری فلزات، می‌توان زمان  $t$  را محاسبه نمود.

نکته دیگر که در فصل‌های آیند بیشتر به آن خواهیم پرداخت، جرم الکترون در مواد (رسانا یا نیمرسانا) می‌باشد. جرم الکترون در مواد با جرم واقعی الکترون  $m_e$  در خلاء متفاوت می‌باشد که به آن جرم مؤثر الکترون  $m_e^*$  گفته می‌شود. در روابطه بالا بایستی از جرم مؤثر  $m_e^*$  استفاده نماییم که در فصل دوم توضیح داده خواهد شد. نشان خواهیم داد که الکترون در ساختارهای بلوری متفاوت دارای جرم مؤثرهای متفاوتی هستند (هم از نظر مقدار و هم از نظر علامت) که این تفاوت می‌تواند رسانندگی و تحرک‌پذیری متفاوتی را در مواد سبب شود.

در ادامه نشان خواهیم داد، هرچند که نتایج مدل درود تا حدودی با برخی از نتایج تجربی قابل مقایسه است، ولی در بیان برخی از خصوصیات الکترونی در جامدات فلزی با شکست‌هایی روبه‌رو است که به چند نمونه از آن اشاره می‌کنیم.

**نکته 1-4:** در این نظریه به دلیل عدم در اختیار داشتن  $t$ ، کمیت‌های وابسته به  $t$  به درستی محاسبه نمی‌گردد ولی نسبت‌های برخی از این کمیت‌ها (به دلیل حذف عبارت  $t$ ) توافق نسبتاً خوبی با تجربه را نتیجه می‌دهد.

### 3-1-1 شکست‌های مدل درود

#### • ظرفیت گرمایی ویژه

از شکست‌های این مدل، در به‌دست آوردن مقدار ظرفیت گرمای الکترونی در جامدات است. با در نظر گرفتن یک سیستم گاز الکترونی بدون برهم‌کنش و قضیه همپاری انرژی<sup>1</sup> (که از مکانیک آماری آموخته‌ایم) می‌توان انرژی چنین سیستمی را به‌دست آورد که با استفاده از آن و تعریف ظرفیت گرمای ویژه  $C_{cl} = \frac{1}{T} \frac{dE}{dT}$ ، رابطه‌ی (9-1) را که نشان دهنده عدم وابستگی دمایی ظرفیت گرمایی است (عبارت دولون و پتی)، نتیجه گرفت.

$$E = \frac{3}{2} nk_B T \quad \text{و} \quad C_{cl} = \frac{3}{2} nk_B \quad (9-1)$$

در صورتی‌که تجربه نشان می‌دهد در دماهای پایین سهم الکترونی ظرفیت گرمایی ویژه در جامدات وابستگی دمایی دارد.

**نکته 1-5:** ظرفیت گرمایی ویژه فلزات در دماهای پایین به‌صورت  $C_V = gT + aT^3$  می‌باشد که در آن  $gT$  مربوط به سهم الکترونی و  $aT^3$  مربوط به سهم ارتعاشات شبکه‌ای (فونون) در ظرفیت گرمایی ویژه است که از درس فیزیک حالت جامد<sup>1</sup> به یاد داریم. سهم الکترونی در گرمای ویژه فلزات  $gT$  (که از مدل درود استخراج می‌گردد) با ضرب ضریب  $T/T_F$  به مقادیر تجربی نزدیک می‌گردد. در این جا  $T_F$  دمای فرمی است که با رابطه  $\epsilon_F = k_B T_F$  از انرژی فرمی نتیجه می‌شود (نسبت  $T/T_F$  از مرتبه 0/01 می‌باشد). این نسبت مربوط به الکترون‌های است که در اطراف سطح فرمی واقع هستند که با دریافت انرژی گرمایی به ترازهای انرژی بالاتر برانگیخته می‌شوند و الکترون‌هایی که در ترازهای زیرین‌تری از سطح فرمی قرار دارند سهمی برای دریافت انرژی گرمایی ندارند و در ظرفیت گرمایی نقشی ایفا نمی‌کنند.

#### • رسانایی گرمایی و قانون ویده‌ما-فرانتس

وجود کمیت زمان واهلش  $t$  در رسانندگی الکتریکی و گرمایی، دورد را وا داشت که کمیت‌هایی را محاسبه کند که وابستگی  $t$  نداشته باشد تا بتواند مستقیماً با کمیت‌های

1. به ازای هر جمله انرژی با توان دوم به‌صورت  $\frac{1}{2} a q_i^2$  (که در آن  $q_i$  مؤلفه مختصات مکانی یا اندازه حرکت است) می‌توان معادل دمایی  $k_B T/2$  را به آن نسبت داد.

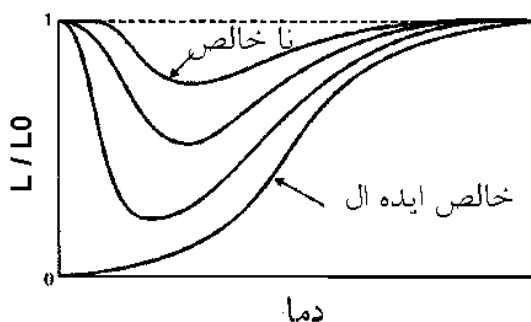
آزمایشگاهی مقایسه شوند. نسبت ویده-ما-فرانتس  $\frac{k}{s}$  کمیتی است که به زمان واهلش بستگی ندارد ولی این نسبت توسط دو کمیت رسانندگی گرمایی  $k$  و رسانندگی الکتریکی  $s$  مشخص می‌شود که هر دو وابسته خطی به زمان واهلش  $t$  دارند.

طبق تعریف، جریان گرمایی  $\dot{J}_q$  در واحد زمان بر واحد سطح، برابر است با:

$$\dot{J}_q = -k \dot{\nabla} T \quad (10-1)$$

در نظریه درود فرض بر این است که رسانندگی انرژی گرمایی تقریباً از طریق الکترون‌ها رسانش فلزات انتقال می‌یابد که با استفاده از نظریه انرژی جنبشی می‌توان آن را به صورت زیر بیان نمود.

$$k = \frac{1}{3} \langle v^2 \rangle t c_{el} \quad (11-1)$$



شکل 1-2. اثر دما بر عدد لورنتس برای مواد خالص ایده‌ال و ناخالص را نشان می‌دهد.

با استفاده از روابط (7-1) و (11-1) نسبت ویده-ما-فرانتس  $\frac{k}{s}$  به دست می‌آید و

نیز تقسیم آن به دما، عدد لورنتس  $L = \frac{k}{sT}$  نامیده می‌شود. با توجه به مقادیر  $k$ ،  $s$

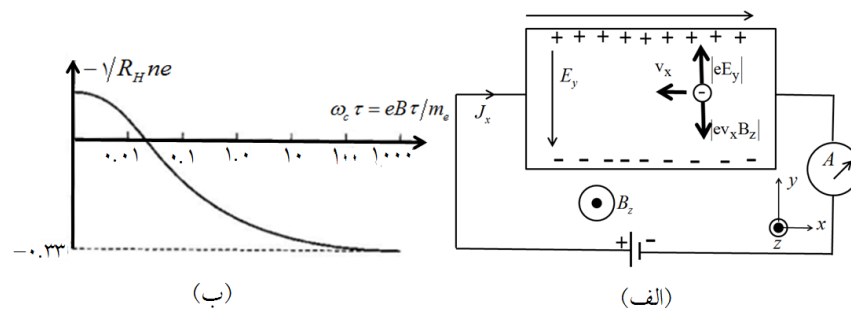
به دست آمده از مدل درود، عدد لورنتس برابر  $1/1' 10^8 \text{ WWK}^{-2}$  است.  $L = \frac{k}{sT} = \frac{3 k_B}{2 e^2}$

ولی تجربه نشان می‌دهد مقدار  $L$  در دمای اتاق برای تعدادی از فلزات تقریباً مقداری ثابت و برابر  $2/5' 10^8 \text{ WWK}^{-2}$  است که مقدار آن دو برابر مقداری است که

از مدل درود نتیجه می‌شود. هر چند که مرتبه بزرگی یکسانی را نتیجه می‌دهد ولی همچنان این اختلاف قابل ملاحظه است که آن می‌تواند ناشی از اختلاف سهم الکترون‌ها در رسانش الکتریکی و گرمایی باشد.

هر چند نظریه درود توصیف دقیقی از کمیت‌ها به ما نمی‌دهد ولی همچنان به عنوان ابزاری قوی به درک مفاهیمی بنیادی‌تری همچون پراکندگی و زمان واهلش در اختیار ما می‌گذارد.

در محاسبات دورد نشان داده می‌شود که عدد لورنتس مستقل از دما و مقداری است ثابت، در صورتی که تجربه نشان می‌دهد در دمای پایین‌تر از دمای اتاق عدد لورنتس با دما کاهش می‌یابد که آن از شکست‌های مدل درود در توصیف این نسبت می‌باشد (شکل (2-1)).



شکل 3-1. الف) طرح شماتیکی از آزمایش هال. ب) اثرات میدان مغناطیسی بر ضریب هال.

### • اثر هال

آزمایش اثر هال در فلزات نشان دهنده آن است که حاملین جریان در فلزات، الکترون‌ها می‌باشند. با توجه به شکل الف (3-1) یک نوار فلزی را در حضور دو میدان قرار داده شده است:  $E_x$  میدان الکتریکی طولی و  $B_z$  میدان مغناطیسی عمود بر نوار. میدان الکتریکی طولی  $E_x$  جریان الکتریکی طولی را سبب می‌شود که با اعمال میدان مغناطیسی الکترون‌ها نخست به سمت عرض نوار، هدایت شده و سپس با توجه به اختلاف پتانسیلی پدیدار شده در عرض نوار (ناشی از تجمع الکترونی)، دوباره مسیر

طولی خود را ادامه می‌دهند. به این معنی که دو نیروی اعمال شده بر الکترون: نیروی عرضی ناشی از میدان عرضی  $E_y$  پدید آمده<sup>1</sup> و نیروی مغناطیسی خارجی یکدیگر را خنثی کرده و مؤلفه‌ی عرضی سرعت الکترون‌ها  $v_y$  صفر می‌گردد.

با استفاده از نکته (1-1)، مفهوم زمان واهلش  $t$  و رابطه (4-1) می‌توان رابطه (1-1) (12) را نوشت.

$$m_e \left\langle \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right\rangle = -e\mathbf{E} - e \left\langle \frac{\mathbf{r}}{v} \right\rangle \cdot \frac{\mathbf{r}}{B} - \frac{m_e \langle \mathbf{v} \rangle}{t} \quad (12-1)$$

در حالت پایا  $\left\langle \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right\rangle = 0$  می‌باشد.

$$\begin{aligned} \dot{\langle v_x \rangle} &= \frac{-e}{m_e} t E_x - w_c t \langle v_y \rangle \\ \dot{\langle v_y \rangle} &= \frac{-e}{m_e} t E_y + w_c t \langle v_x \rangle \end{aligned}$$

در اینجا  $w_c = \frac{eB}{m_e}$  فرکانس زاویه‌ای سیکلوترونی است.

همان‌طور که در بالا اشاره شد با صفر قرار دادن مؤلفه عرضی متوسط سرعت الکترون‌ها  $\langle v_y \rangle = 0$ ، رابطه زیر را بین مؤلفه‌های میدان الکتریکی طولی و عرضی نتیجه می‌شود.

$$\frac{E_y}{E_x} = -w_c t$$

طبق تعریف ضریب هال  $R_H = \frac{E_y}{BJ_x}$ ، رابطه (13-1) نتیجه می‌شود.

$$\begin{aligned} R_H &= \frac{E_y}{BJ_x} = \frac{E_y}{Bs E_x} = \frac{-w_c t}{Bs} \\ R_H &= -\frac{1}{ne} \end{aligned} \quad (13-1)$$

---

1. این میدان عرضی پدید آمده ناشی از یک گرادیان توزیع الکترونی نسبت به نقطه مقابل این تجمع الکترونی است.

در رابطه (13-1) عبارت  $s$  را از رابطه (7-1) و  $w_c = \frac{eB}{m_e}$  استفاده شده است. رابطه (13-1) طبق نظریه درود نشان دهنده عدم وابستگی ضریب هال به میدان مغناطیسی  $B$  و زمان واهلش  $t$  می‌باشد. در صورتی که نتایج تجربی وجود وابستگی به میدان مغناطیسی را نشان می‌دهد (شکل (3-1) ب).

## 2-1 فلزات از منظر کوانتومی

با ظهور فیزیک کوانتوم در دهه 1920 میلادی نگرش فیزیکدانان به مواد تغییر یافت. می‌توان شروع مفاهیم اولیه فیزیک کوانتومی را از فیزیک اتمی دانست که با حل معادله شرودینگر برای هر اتم منزوی، ویژه مقادیر و ویژه توابع اتم منزوی را به دست آورد. مربع اندازه ویژه توابع اتمی به دست آمده، احتمال حضور الکترون در هر حالت انرژی در اطراف هسته اتم را مشخص می‌کند که شمیمیدان‌ها آن‌ها را با نام اربیتال اتمی می‌شناسند.

در ادامه نشان خواهیم داد که چگونه با در دست داشتن ساختار الکترونی اتم‌های منزوی (که از فیزیک اتمی استخراج می‌شود)، می‌توان به خصوصیات بلور دست یافت. همچنین در این فصل به معرفی تعدادی از رویکردهای مهم برای محاسبه ساختار الکترونی بلور خواهیم پرداخت.

هر اتم منزوی از تعدادی اربیتال الکترونی که به هسته مقید می‌باشند تشکیل شده است (اربیتال‌های  $s, p, d, f, g$ ). با کنار هم قرار دادن اتم‌ها به طور منظم می‌توان یک شبکه بلورین همراه با هم‌پوشانی اربیتال‌های اتمی ساخت. دسته‌ای از این اربیتال‌های اتمی که به هسته اتم نزدیک می‌باشند تقریباً هیچ گونه هم‌پوشانی با اربیتال‌های اتمی اتم‌های همسایه نزدیک خود ندارند. از این رو، این اربیتال‌ها شکل اتمی خود را حفظ نموده و الکترون‌هایشان کاملاً جایگزیده در اطراف هسته می‌باشند. دسته دیگر، اربیتال‌هایی هستند که از هسته دور می‌باشند که به علت هم‌پوشانی‌شان با اربیتال‌های اتم‌های همسایه پدیده هیبریداسیون را به وجود می‌آورند. به این دسته از الکترون‌ها را الکترون‌های ظرفیت یا رسانش گویند. توابع موج این دسته از الکترون‌ها که متأثر از پتانسیل شبکه هستند، دارای توابع موج گسترده می‌باشند که به توابع موج بلوخ معروف هستند که در ادامه به آن خواهیم پرداخت. گروه اول جدول تناوبی، سدیم، پتاسیم،

رویدم و سزیم، فقط یک الکترون در بالاترین تراز انرژی اشغال شده‌شان دارند. وابستگی کم این الکترون با هسته اتم و هم‌پوشانی زیاد اربیتال‌شان با اربیتال‌های اتم‌های همسایگان نزدیک به خود باعث گستردگی توابع موج این دسته از الکترون‌ها می‌شود. این گروه از اتم‌ها قادرند تک الکترون خود را به راحتی از دست داده و دریایی از الکترون‌ها را ایجاد نمایند که یون‌های مثبت در آن‌ها شناور هستند. این الکترون‌ها به مانند کلافی یون‌ها را در بر می‌گیرند و باعث پایداری شبکه‌ای فلزات می‌گردند.

### 1-2-1 مدل الکترون آزاد

همان‌طور که از آزمایش رادرفورد<sup>1</sup> نتیجه گرفته می‌شود سهم اشغال فضایی هسته‌های اتم‌های بلور نسبت به حجم کل بلور بسیار ناچیز است و از طرفی همان‌طور که اشاره شد، الکترون‌هایی که در بالاترین تراز انرژی یک جامد فلزی قرار دارند، اثرات پتانسیل هسته‌ها بر روی آن‌ها بسیار ضعیف‌تر از الکترون‌های مغزی می‌باشند، از این رو با تقریب نسبتاً خوبی طبق نتایج به دست آمده از آزمایش رادرفورد می‌توان هسته‌ها را همراه با الکترون‌های مغزی‌شان را صرف‌نظر نمود و فقط بخش هاشور خورده (شکل (1-1)) را در نظر گرفت که آن مربوط به الکترون‌های بالاترین تراز انرژی است که در این ناحیه آزادانه می‌تواند در بلور جابه‌جا شوند. ساده‌ترین مدلی که برای توصیف این دسته الکترون‌ها به کار برده می‌شود مدل الکترون آزاد در یک جعبه با ابعاد متناهی است. انرژی کل این دسته الکترون‌ها متشکل از انرژی جنبش  $T$  و برهم‌کنش کولنی الکترون  $V_{ee}$  نسبت به یک‌دیگر می‌باشد.

**نکته 1-6:** هرگاه بتوان سهم برهم‌کنشی الکترون‌ها  $V_{ee}$  را در مقایسه با انرژی جنبشی  $T$  صرف‌نظر نمود مجموعه رفتار گاز گونه (گاز الکترونی  $V_{ee} \gg T$ ) و در صورتی که عکس آن برقرار باشد رفتار جامدگونه (بلور ویگنر  $V_{ee} \ll T$ ) و حالت بینابینی رفتار مایع‌گونه ( $V_{ee} \approx T$ ) را به خود می‌گیرد.

1. در این آزمایش، ورقه‌ی طلا را در معرض ذرات آلفا (هلیوم دوبار مثبت) قرار داده و نشان می‌دهد که قسمت عمده این ذرات بدون هیچ‌گونه پراکندگی از ورقه عبور می‌کنند (تقریباً 99 درصد) و قسمت کوچکی پراکنده و سهم بسیار بسیار ناچیز آن‌ها پراکندگی سربه‌سر با یون‌های شبکه (مثلاً به نسبت 1 به 8000) که به عقب رانده می‌شوند. نتیجه این آزمایش این است که یون‌ها سهم فضایی بسیار کوچکی را در بلور اشغال می‌کنند و اعظم فضای بلور خالی است که توسط الکترون‌ها پر شده‌اند.



با استفاده از اصل عدم قطعیت  $\frac{h}{D_r}$  می‌توان نشان داد که انرژی جنبشی متوسط یک گاز الکترونی با عکس توان دوم متوسط فواصل الکترونی متناسب می‌باشد

$$T = \frac{(D_p)^2}{2m} \gg \frac{h^2}{2m} \frac{1}{(D_r)^2} \quad (14-1)$$

و از طرفی پتانسیل برهم‌کنش کولنی الکترون‌ها با عکس متوسط فواصل الکترونی  $U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{D_r}$  متناسب است.

با فرض داشتن بلورهایی با ساختار بلوری بسیار فشرده که سبب افزایش چگالی الکترونی  $n = N/V$  و نزدیک شدن الکترون‌ها به یکدیگر می‌شوند، در این شرایط متوسط انداره‌ی فواصل الکترون‌ها  $\langle D_r \rangle$  بسیار کوچک است که با وجود چنین شرایطی انرژی متوسط پتانسیل الکترون‌ها در مقایسه با انرژی جنبشی آن‌ها قابل صرف‌نظر کردن می‌باشد. از این رو فقط در چگالی‌های الکترونی بسیار بالا است که مدل الکترون آزاد می‌تواند پاسخ مناسبی باشد. با توجه به عناصر یافت شده در کره زمین و شرایط فیزیکی محیطی مانند اثر گرانش بر روی مواد، چنین چگالی الکترونی بالا به طور طبیعی بر روی زمین یافت نمی‌شود و فقط در دل ستارگان نوترونی و سیاه چاله‌ها با توجه به گرانش بالای آن‌ها می‌توان یافت. این تقریب که الکترون‌های رسانش فلزات را می‌توان به مانند گاز الکترونی آزاد تصور نمود در فیزیک حالت جامد I (نظریه الکترون آزاد فلزات) به خوبی پرداخته شده است<sup>1</sup>. با حل معادله شرودینگر یک گاز الکترونی بدون برهم‌کنش در یک جعبه به حجم  $V$ ، دارای ویژه‌مقادیر انرژی  $E(k)$  و ویژه توابع  $y(x)$  به صورت زیر می‌باشد<sup>2</sup>:

$$y(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad E(k) = \frac{h^2 k^2}{2m} \quad (15-1)$$

**نکته 1-7:** یکی از مدل‌های ساده ولی کاربردی که نقش یون‌های مثبت بلور را نیز در معادله شرودینگر یک بلور در نظر می‌گیرد و سبب می‌شود تا به رفتار یک بلور فلزی

1. که به دانشجویان پیشنهاد می‌شود این بخش از کتاب حالت جامد<sup>1</sup> را مروری داشته باشند.

2. یادآوری از فیزیک حالت جامد<sup>1</sup>.

نزدیک شویم، مدل ژلیم<sup>1</sup> است. در این تقریب اثرات یون‌های مثبت هسته‌ها را به صورت یک توزیع یکنواخت از بار یون‌های مثبت در فضای بلور در نظر گرفته می‌شود. این تقریب دور از واقعیت نمی‌باشد زیرا دور بودن الکترون‌های رسانش از یون‌ها، باعث پیوسته مشاهده شدن این توزیع بار مثبت توسط الکترون‌های بلور می‌شود. بنابراین در این مدل، انرژی پتانسیل کل سیستم متشکل است با: برهم‌کنش گاز الکترونی با یک پتانسیل الکتریکی یکنواخت مثبت و برهم‌کنش کولنی الکتروستاتیکی بین الکترون‌ها. از طرفی شرایط مرزی در یک جامد متناهی، تأثیر به‌سزایی در نحوه توزیع الکترونی در نزدیکی سطوح، لبه‌ها و گوشه‌های فلزات می‌گذارد.

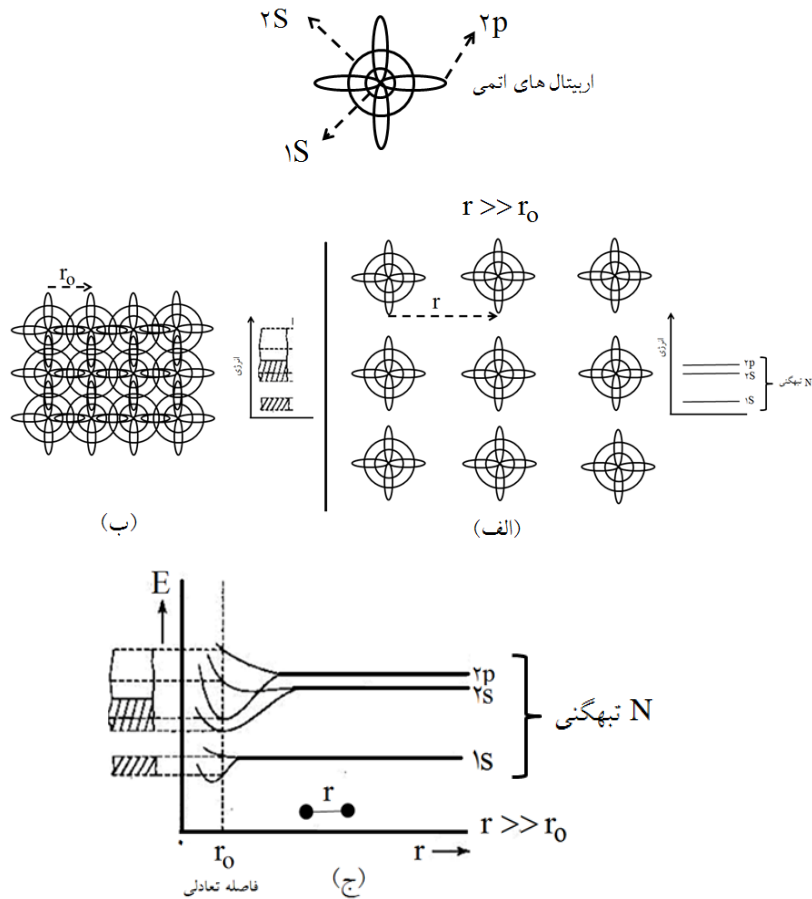
بنابراین خلاصه مطالب بالا را می‌توان این‌طور بیان نمود که با تقریب اول، خواص الکترونی فلزات را با مدل الکترون آزاد می‌توان به مانند یک گاز الکترونی بدون برهم‌کنش که از آمار فرمی - دیراک (به دلیل فرمیون بودنشان) تبعیت می‌کنند، در نظر گرفت. اما این مدل، قادر به پاسخگویی همه سؤالات الکترونی فلزات نمی‌باشد.<sup>2</sup> نظریه نوارهای انرژی، که در ادامه به آن خواهیم پرداخت، ما را به توصیف خواص الکترونی و طبقه‌بندی مواد به رسانای خوب، نیمرسانا و نارسانا قادر می‌سازد.

### 1-2-2 نوارهای انرژی در جامدات

برای درک مفهوم نوارهای انرژی، بهتر است از ترازهای انرژی تک اتم‌های منزوی شروع کنیم. با کنار هم قرار دادن این اتم‌ها با یک نظم شبکه‌ای، یک جامد بلورین تشکیل می‌شود. فاصله ترازمندی  $E_0$  بین اتم‌ها و نوع شبکه طوری است که انرژی کل سیستم حداقل مقدار خود را داراست. حال به طور ذهنی فرض کنیم فاصله بین اتم‌ها خیلی بیش از فاصله ترازمندی  $E_0$  در حالت بلوری باشد (شکل (1-4) الف). در این حالت اربیتال‌های اتمی اتم‌ها هیچ‌گونه هم‌پوشانی با هم ندارند. در نتیجه، هر اتم انرژی اتمی مخصوص به خود را دارد (حالت منزوی).

1. Jellium model

2. مانند: اختلاف رسانندگی در فلزات و ...



شکل 1-4. نمایش طرحواره‌ای الف) اربیتال اتمی  $1s, 2s, 2p$  از اتم‌های بلور بریلیوم با فاصله بین اتمی بسیار بزرگ‌تر از حالت ترازمندی  $r \gg r_0$  که اربیتال‌های اتمی با یکدیگر هم‌پوشانی ندارند و مجموعه دارای انرژی با همان ترازهای اتمی بریلیوم ولی با تبهگنی  $N$  گانه ( $N$  تعداد اتم‌های بلور) می‌باشد. ب) با قرار گرفتن اتم‌ها در فاصله اتمی ترازمندی  $r_0$  بلور هم‌پوشانی اربیتال‌ها اتمی باعث رفع تبهگنی و جدا شدن ترازها از یکدیگر که منجر به پهن‌شدگی ترازهای انرژی (تبدیل به نوار انرژی) می‌شود ج) نمودار اثرات جدایی بین اتمی  $r$  در بلور بریلیوم بر پهن‌شدگی ترازهای انرژی.

بنابراین انرژی‌های الکترونی مجاز در این جامد با فاصله بین اتمی بسیار بزرگ  $r \gg r_0$ ، همان انرژی‌های اتمی اتم‌های منزوی با تبهگنی  $N$  (تعداد کل اتم‌های

بلور<sup>۱</sup> می‌باشد (شکل (4-1) الف). با نزدیک شدن اتم‌ها نسبت به هم و رسیدن به فاصله‌ی ترازمندی<sup>۲</sup>  $r_0$ ، اربیتال‌های اتمی با یکدیگر هم‌پوشانی پیدا کرده و دافعه الکترون ناشی از این هم‌پوشانی باعث رفع تبهگنی در ترازهای انرژی می‌گردد.<sup>۳</sup> از این رو مقادیر انرژی ترازها با فاصله بین اتمی تغییر می‌کنند. از طرف دیگر نحوه‌ی آرایش یونها (نوع شبکه) و هم‌پوشانی اربیتال‌ها در تغییرات ترازهای انرژی اتمی نقش مهمی بازی می‌کند که آن باعث رفع تبهگنی‌ها می‌شود. ترازهای انرژی تبهگن به دسته‌ای از ترازها با پهنای مشخصی  $w$  تبدیل می‌شوند که به آن نوار انرژی گفته می‌شود. نوع ساختاری بلوری که هر جامدی به خود می‌گیرد بستگی به نوع آخرین اربیتال‌های پر شده اتم‌های تشکیل‌دهنده جامد، نحوه‌ی هم‌پوشانی آن‌ها و شرایط ترمودینامیکی محیطی آن بستگی دارد. همیشه طبیعت ساختاری را به خود می‌گیرد که انرژی آزاد سیستم را به حداقل ممکن برساند.

در فاصله ترازمندی یک شبکه بلوری، گاهی دسته ترازهای انرژی پهن شده مربوط به یک اربیتال اتمی با دسته تراز انرژی پهن شده ناشی از اربیتال‌ها دیگر روهم‌افتادگی اتفاق می‌افتد (شکل (4-1) ج) مربوط به اربیتال‌های  $(2s, 2p)$  و گاهی بین شان یک گاف انرژی  $E_g$  (یا منطقه ممنوعه انرژی) ایجاد می‌شود (شکل (4-1) ج) مربوط به اربیتال‌های  $(1s, 2s)$ . در ناحیه گاف انرژی نمی‌توان الکترونی با این انرژی برای چنین سیستمی متصور بود.

سمت راست شکل (4-1) ب) نوارهای انرژی بلور بریلیم با جدایی اتمی  $r_0$  و هم‌پوشانی اربیتال‌های  $1s, 2s, 2p$  که منجر به هیبرید شدن<sup>۴</sup> ترازهای  $2s, 2p$  می‌شود را نمایش می‌دهد. همانطور که در بالا به آن اشاره شد، انرژی الکترون‌ها در یک اتم

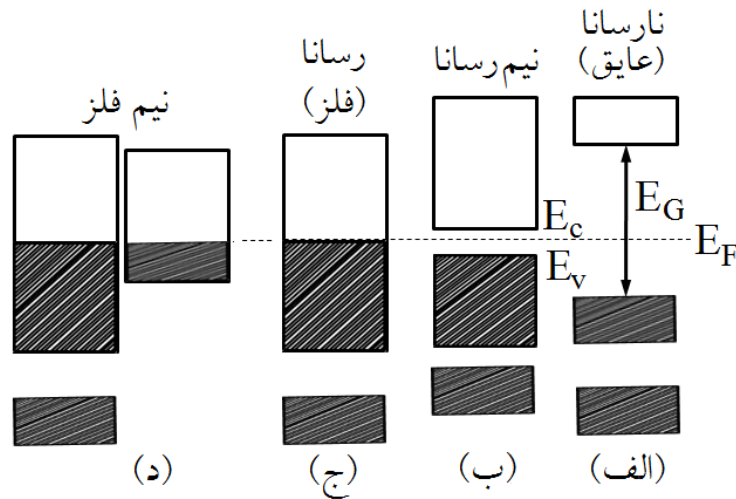
1. برای داشتن یک برآورد عددی از مقدار  $N$ ، اگر یک مول از ماده‌ای داشته باشیم این تبهگنی می‌تواند از مرتبه عدد آووگادرو باشد.

2. فاصله‌ای است که انرژی بلور در آن به حداقل ممکن می‌رسد.

3. با توجه به اصل طرد پائولی و نیز اثرات پتانسیل برهم‌کنشی ابرالکترونی اتم‌های همسایه، جدایی ترازها و توزیع انرژی‌شان به صورت یک دسته تراز اتمی با پهنای  $w$  را حادث می‌شود که به آن نوار انرژی گفته می‌شود (قسمت هاشور خورده شکل (4-1) ب).

4. ترکیب اربیتال‌های هم انرژی اتم‌ها، ناشی از هم‌پوشانی اربیتال‌ها.

منزوی می‌تواند یک سری ترازهای انرژی کوانتیزه باشند در صورتی که در یک بلور الکترون‌ها می‌توانند یک پهنای پیوسته‌ای از انرژی را به خود بگیرند که به آن نوار انرژی گویند. در ادامه این فصل به مدل‌هایی برای به دست آوردن نوارهای انرژی در جامدات اشاره خواهد شد تا به نحوه پهن شدن ترازها آشنا شویم.



شکل 1-5. نمایش طرحواره‌ای از پرشدگی الکترونی نوارهای انرژی برای (الف) نارسانا (عایق) (ب) نیم رسانا (ج) رسانا (د) نیم فلز.

حال با داشتن نوارهای انرژی و سهم پرشدگی هر یک از آن‌ها، می‌توان به نوع ماده (رسانا، نارسانا، نیم رسانا) پی برد. در شکل (1-5) چهار دسته نوار با پرشدگی‌های متفاوت نشان داده شده است که به طور طرحواره‌ای هر نوار را با پهنایی به شکل مستطیل کشیده شده است که با فاصله‌ی (گاف انرژی) از یکدیگر جدا شده است. ناحیه هاشور خورده در مستطیل‌ها به معنی سهم پرشدگی توسط الکترون‌ها می‌باشد. جریان الکتریکی هر نوار کاملاً پر و یا کاملاً خالی در حضور میدان الکتریکی برابر صفر و هر نواری که کاملاً پر نباشد، غیر صفر می‌باشد. از این رو نحوه پرشدگی‌ها هر نوار می‌تواند مواد را حداقل به سه دسته ساده طبقه‌بندی نماید:

**ن رساناها (فلزات)**، شکل (1-5) ج، بالاترین نوار پرشده کاملاً پرنمی‌باشند که به آن نوار رسانش گفته می‌شود و الکترون‌ها به راحتی می‌تواند با جذب فوتون و دما به حالت‌های خالی از نوارشان گذار نمایند.

**ن نیم‌رساناها**، شکل (1-5) ب، نوارها یا کاملاً پرهستند یا کاملاً خالی و فاصله بین بالاترین نوار پر که به آن نوار ظرفیت نامیده می‌شود با پایین‌ترین نوار خالی که به آن نوار رسانش نامیده می‌شود دارای گاف انرژی کوچکی می‌باشند. به این معنی که در دماهای بسیار پایین کلیه نوارها یا کاملاً پر و یا کاملاً خالی از الکترون می‌باشند و با اعمال دما تعدادی از الکترون‌های بالاترین نوار پر به پایین‌ترین نوار خالی گذار نموده و تشکیل نوارهای قسمتی پر (برای نوار رسانش) و قسمتی خالی (برای نوار ظرفیت) می‌شوند که در حضور میدان الکتریکی جریان غیر صفری برای هر دو نوار پدیدار می‌شود (که در فصل 2 به آن خواهیم پرداخت).

**ن نارساناها (عایق‌ها)** شکل (1-5) الف، به مانند نیم‌رساناها می‌باشند با این تفاوت که اندازه گاف انرژی بالاترین نوار پر با پایین‌ترین نوار خالی بسیار بزرگ است که انرژی حرارتی قادر نیست الکترون‌های نوار پر را به نوار خالی گذار دهند.

**ن نیم‌فلز شکل (1-5) د**، موادی هستند به مانند فلزات می‌باشند با دو نوار قسمتی پر که انرژی فرمی هر دو را قطع می‌کنند و هر دو نوار می‌توانند رسانای الکتریکی باشند.

**نکته 1-8:** با در نظر گرفتن یاخته بسیط شبکه مستقیم هر بلور و تعداد الکترون‌های که به هر یاخته نسبت داده می‌شود و با توجه به اینکه هر نوار انرژی با دو الکترون (با اسپین‌های مخالف طبق اصل طرد پائولی) کاملاً پر می‌شود، از این رو تعداد نوارهای پرشده بستگی به تعداد الکترون‌ها در هر یاخته بسیط در شبکه مستقیم دارد.

در این جا وقتی ما صحبت از الکترون در یک جامد بلوری می‌کنیم که فرض می‌شود طول بعدها آن بی‌نهایت است. بنابراین هیچ گونه شرایط مرزی بر الکترون‌های بلور حاکم نیست و کلیه الکترون‌ها در بلور رفتار فیزیکی یکسانی را تجربه می‌کنند. ولی در واقعیت طول ابعاد نمی‌تواند بی‌نهایت باشد. بنابراین سطوح بلور با محیط بیرون در حال تبادل انرژی می‌باشد. از این رو بایستی معادله شرودینگر را با

احتساب شرایط مرزی حل نماییم. شرایط مرزی باعث می‌شود دسته‌ای از الکترون که در مجاورت سطوح جامد قرار دارند رفتارشان با رفتار دسته‌ی دیگری از الکترون‌های که در داخل جامد (دور از سطوح) واقع هستند یکسان نباشند. بنابراین رفتار الکترونیکی یک بلور به سهم هریک از این الکترون‌ها بستگی دارند. ولی در برخی شرایط می‌توان دسته‌ای را نسبت به دسته دیگر صرف‌نظر نمود. مثلاً در شرایطی که سهم الکترون‌های مرزی بسیار کوچک باشد می‌توان سهم آن‌ها را نادیده گرفت و جامد را با طول ابعاد بی‌نهایت تصور نمود.

در فیزیک حالت جامد، نه فقط تعداد و بلکه طول بعدهای یک جامد از اهمیت بسیاری برخوردار است. با در دست داشتن یک جامد با طول ابعاد ماکروسکوپی (مزوسکوپی به بالا  $l > 10^{-6} \text{ m}$ )، ما را به خصوصیات جامدی با ابعاد نامتناهی (جامد حجمی یا توده‌ای<sup>1</sup>) نزدیک می‌سازد. در چنین جامدی، نسبت سطح جامد به حجم آن بسیار کوچک است و سهم تعداد الکترون‌ها در مجاورت سطوح به مراتب کوچکتر از سهم تعداد الکترون‌های داخل حجم جامد می‌باشد. از این رو تأثیر سهم الکترون‌ها در مجاورت سطوح مرزی بر رفتار الکترونی جامدات حجمی (با طول ابعاد بزرگ) نسبت به الکترون‌های حجمی قابل صرف‌نظر کردن است. بنابراین در جامدات حجمی (توده‌ای) و بزرگ شرایط مرزی تعادلی قابل صرف‌نظر کردن می‌باشد. برای محاسبات چنین سیستمی (جامد حجمی) بایستی شرایط مرزی را به گونه‌ای مشخص نماییم که نه تنها مسئله را به سادگی حل نماییم بلکه تأثیری بر خواص واقعی بلور نگذارد.

- **شرایط مرزی با پتانسیل بی‌نهایت:** برای جلوگیری از فرار الکترون از یک بلور متناهی و ثابت نگاه داشتن تعداد الکترون در آن، شرط مرزی با پتانسیل بی‌نهایت را قرار می‌دهیم (مثل یک چاه پتانسیل با دیواره‌های بی‌نهایت که در درس فیزیک کوانتومی با آن آشنا شدیم). پاسخ چنین سیستمی، امواج ایستاده‌ای<sup>2</sup> است که قادر به توصیف خواص رسانندگی بلور نخواهد بود.
- **شرایط مرزی تکرار (تناوبی):** خواص فیزیکی جامدات مانند انتشار جریان الکترونیکی، گرمایی و ... ما را و می‌دارد به دنبال پاسخ موج‌رونده برای الکترون‌ها در

---

1. Bulk

2. سرعت گروه برای امواج ایستاده صفر است، یعنی هیچ جریانی (چه الکترونی و چه گرمایی) نخواهیم داشت.

جامدات باشیم. شرط مرزی تکرار نه فقط ویژه گی موج رونده را به الکترون ها می دهد بلکه تعداد الکترون های جامد را نیز ثابت نگاه می دارد. همچنین این شرط مرزی تکرار، مسئله یک جامد با ابعاد متناهی را به یک جامد با ابعاد نامتناهی تبدیل می نماید که در ادامه توضیح بیشتری داده خواهد شد.

**نکته 1-9:** در ابعاد نانو به علت بالا بودن نسبت سطح به حجم، اثرات سطحی و شرایط مرزی نقش مهمی در رفتار الکترونی بلور بازی می کنند و خواص فیزیکی متفاوت تری نسبت به ابعاد بزرگ از خود نشان می دهد بنابراین خواص الکترونی چنین موادی وابسته به شرایط مرزی می باشد.

### 3-2-1 نظریه بلوخ

از نقطه نظر مکانیک کوانتومی، الکترون ذره ای کوانتومی است که احتمال یافتن آن در فضا توسط تابع موج نسبت داده شده مشخص می شود. برای به دست آوردن تابع موج الکترون، بایستی هامیلتونی سیستم را نوشت و معادله شرودینگر آن را حل نمود. هامیلتونی یک بلور متشکل از یون ها و الکترون ها، از جمع انرژی جنبشی و پتانسیل برهم کنشی در بین آن ها می باشد.

$$H = \hat{\mathbf{a}}_e \frac{P_e^2}{2m_e} + \hat{\mathbf{a}}_p \frac{P_p^2}{2m_p} + V_{ee} + V_{ep} + V_{pp} \quad (16-1)$$

انرژی جنبشی بلور از جمع انرژی جنبشی الکترون ها  $\hat{\mathbf{a}}_e \frac{P_e^2}{2m_e}$  و یون ها  $\hat{\mathbf{a}}_p \frac{P_p^2}{2m_p}$ ، و انرژی پتانسیل برهم کنشی از جمع سه جمله تشکیل می شود که عبارت هستند از: جمع انرژی پتانسیل برهم کنش کولنی الکترون-الکترون  $V_{ee}$ ، جمع پتانسیل الکترون-یون  $V_{ep}$  و جمع پتانسیل یون-یون  $V_{pp}$ . این هامیلتونی یک هامیلتونی بس ذره ای<sup>1</sup> است که قادر به حل دقیق آن نمی باشیم. با استفاده از تقریب های ساده، می توان شکل هامیلتونی بس ذره ای را ساده تر نمود. اولین تقریب برای ساده سازی که کاربردی تر و قابل قبول تر می باشد، تقریب اوپنهایمر (یا آدیاباتیک) است. با توجه به

<sup>1</sup>. Many body



این که جرم الکترون  $m_e$  در مقایسه با جرم یون  $m_p$  بسیار کوچک می‌باشد<sup>1</sup> از این رو تحرک الکترون‌ها خیلی بیشتر از یون‌ها است. با در نظر گرفتن تقریب اوپنهایمر می‌توان سهم انرژی جنبشی یون‌ها را در مقایسه با انرژی جنبشی الکترون‌ها نادیده گرفته و یون‌ها را در بلور فریز شده متصور شد. با این تقریب به دلیل ثابت بودن مکان یون‌ها سهم پتانسیل برهم‌کنش  $V_{pp}$  مقدار ثابتی خواهد بود. اثر این مقدار ثابت در هامیلتونی فقط انرژی نوارها را یکسان جابه‌جا می‌کند که در فیزیک مسئله، هیچ‌گونه تاثیری ندارد. بنابراین با انتخاب یک سطح انرژی صفر مناسب می‌توان آن جمله را نیز کنار گذاشت. فقط جمله‌ای از هامیلتونی که هنوز سیستم را بس ذره‌ای نگاه می‌دارد عبارت برهم‌کنش  $V_{ee}$  است.

$$H = \hat{a} \frac{p_e^2}{2m_e} + V_{ee} + V_{ep} \quad (17-1)$$

پتانسیل  $V_{ee}$  را می‌توان به صورت جمع پتانسیل تبادل - همبستگی  $V_{xc}$  و پتانسیل الکترواستاتیکی  $V_h$  (پتانسیل هارتری) نوشت. محاسبه  $V_{xc}$  از دشواری‌های فیزیک می‌باشد که قادر به حل دقیق آن نمی‌باشیم، ولی با تقریب‌هایی می‌توان به آن نزدیک شویم که بحث آن خارج از ظرفیت این کتاب می‌باشد.

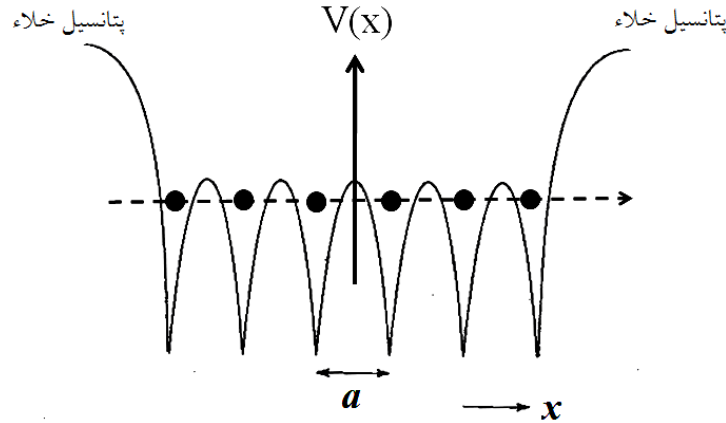
همان‌طور که در نکته (6-1) به آن اشاره شد، با فرض براین که جامد مورد بررسی ما بسیار فشرده می‌باشد، از این رو چگالی‌های الکترونی بسیار بالایی را تجربه می‌کند که می‌توان از اثر سهم برهم‌کنشی  $V_{ee}$  در مقایسه با انرژی جنبشی الکترون‌ها  $\hat{a} p_e^2 / 2m_e$  صرف‌نظر نمود. تنها پتانسیل باقی مانده پتانسیل برهم‌کنشی بین الکترون و شبکه  $V(\mathbf{r})$  می‌باشد.

**نکته 1-10:** این پتانسیل شبکه  $V(\mathbf{r})$  متأثر ساختار بلوری است که به‌ازای هر ساختار بلوری، ساختارهای نواری متفاوتی را نتیجه می‌دهد. این تفاوت می‌تواند مشخصه‌ی تمایز بین جامدات باشد که با استفاده از آن جامدات دسته‌بندی می‌گردد. هامیلتونی

---

1. تقریباً 2000 برابر کوچک‌تر.

نهایی یک هامیلتونی تک الکترونی است از این رو هامیلتونی بس ذره‌ای کل به چندین هامیلتونی تک الکترونی تبدیل می‌گردد<sup>1</sup>.  
در ادامه برای توصیف پتانسیل شبکه  $V(\mathbf{r})$ ، نیازمند به شناخت انواع مختلف سیستم‌های شبکه‌ای در بلور (که در کتاب حالت جامد 1 آمده است) هستیم.



شکل 1-6. نمایش یک بلور متناهی با یک پتانسیل تناوبی یک بعدی با فاصله شبکه  $a$  که در مرزهای بلور به پتانسیل خلاء  $V=0$  می‌رسند، می‌باشد.

در ادامه به حل معادله شرودینگر یک الکترون در حضور یک پتانسیل شبکه‌ای سه بعدی  $V(\mathbf{r})$  با تناوب بردار شبکه  $\mathbf{T}$  خواهیم پرداخت.

$$\mathbf{T} = n\mathbf{a} + m\mathbf{b} + l\mathbf{c}, \quad (n, m, l \in \mathbb{Z}) \quad (18-1)$$

که در آن  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ , و  $\mathbf{c}$  بردارهای شبکه مستقیم می‌باشند.

سوالی که پیش می‌آید این است که شکل تابع موج الکترون در بلور با شرط تناوبی پتانسیل  $V(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = V(\mathbf{r})$  چگونه باید باشد؟ این شرط تناوبی چگونه در تابع موج الکترون ظاهر می‌شود؟ که در ادامه سعی داریم به این سؤالات پاسخ دهیم.

1. حل معادله شرودینگر  $H\psi = E\psi$  با هامیلتونی بس ذره‌ای (رابطه (16-1)) بدون برهم‌کنش  $V_{ee} = 0$  را با در نظر گرفتن تابع موج به صورت  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) = f(\mathbf{r}_1)f(\mathbf{r}_2)\dots f(\mathbf{r}_N)$  (حاصل ضرب تابع موج تک تک ذرات) به  $N$  هامیلتونی تک ذره‌ای به صورت  $H_i f(\mathbf{r}_i) = E_i f(\mathbf{r}_i)$  تبدیل می‌شود. که در این جا  $N$  تعداد ذرات و  $H_i$  هامیلتونی یک تک الکترون که در معرض پتانسیل شبکه  $V(\mathbf{r})$  واقع است، می‌باشند.

بلوخ<sup>1</sup> توانست شکلی برای تابع موج الکترون در یک شبکه پتانسیل یونی کاملاً تناوبی ارائه دهد. برای مثال در یک شبکه یک بعدی (زنجیره اتمی با طول  $L$ ) مانند شکل (6-1) انرژی پتانسیل تناوبی  $V(x+a) = V(x)$  با فاصله شبکه‌ای  $a$  با ابعاد محدود  $L = Na$  را نشان می‌دهد که در لبه‌ها به انرژی پتانسیل مرزی و سپس به انرژی پتانسیل خلاء (انرژی پتانسیل صفر) می‌رسد. شرط تناوبی در نزدیکی مرز برقرار نمی‌باشد. با توجه به ماکروسکوپی بودن طول زنجیره می‌توان فرض نمود، خواص الکترونی الکترون‌های دور از مرزهای زنجیره به مانند خواص الکترونی الکترون‌های یک زنجیره با طول نامتناهی می‌باشد. معادله شرودینگر یک تک الکترون در یک پتانسیل الکترواستاتیک تناوبی  $V(x)$  با بعد نامتناهی به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]y = 0 \quad (19-1)$$

یا به عبارت دیگر  $\frac{d^2y}{dx^2} + f(x)y = 0$  که در آن  $f(x+a) = f(x)$  یک تابع تناوبی است. معادله (19-1) نمایش یک معادله دیفرانسیل مرتبه دوم را دارد که پاسخ عمومی آن به صورت زیر می‌باشد:

$$y(x) = Cg(x) + Dh(x)$$

با توجه به شرط تناوبی در پتانسیل شبکه و برقراری رابطه  $f(x+a) = f(x)$ ، می‌توان نشان داد که جواب‌های  $g(x+a), h(x+a)$  نیز می‌تواند پاسخ‌های دیگر معادله دیفرانسیل (19-1) باشد. از این رو، آن‌ها را می‌توان برحسب پاسخ‌های اولیه  $h(x)$  و  $g(x)$  بسط داد:

$$g(x+a) = A_1g(x) + B_1h(x)$$

$$h(x+a) = A_2g(x) + B_2h(x)$$

با توجه به روابط بالا

---

<sup>1</sup>. Bloch

$$y(x+a) = (CA_1 + DA_2)g(x) + (CB_1 + DB_2)h(x)$$

فقط رابطه قابل قبولی که می‌تواند شرایط بالا را داشته باشد رابطه  $y(x+a) = I y(x)$  است. در اینجا  $I$  بایستی به صورت فاز به  $e^{if}$  تابع موج اضافه شود  $y(x+a) = e^{if} y(x)$  تا خللی در فیزیک مسئله وارد نگردد یعنی احتمال حضور ذرات در فضا  $P(x)$  برای هر دو پاسخ یکسان باشد.

$$P(x) = y(x+a) y^*(x+a) = e^{-if} y^*(x) e^{if} y(x)$$

$$P(x) = y^*(x) y(x)$$

ازاین‌رو:

$$(CA_1 + DA_2)g(x) + (CB_1 + DB_2)h(x) = I [Cg(x) + Dh(x)]$$

از این رابطه می‌توان یک دستگاه معادلات دو تایی بر حسب  $C$  و  $D$  نوشت:

$$C(A_1 - I) + DA_2 = 0$$

$$CB_1 + D(B_2 - I) = 0$$

برای داشتن جواب غیر صفر برای  $C$  و  $D$  باید دترمینان ضرایب صفر شود، یعنی:

$$I^2 - (A_1 + B_2)I + (A_1B_2 - A_2B_1) = 0$$

به دنبال پاسخ‌هایی هستیم که در معادله درجه دوم که  $A_1, A_2, B_1, B_2$  ثابت‌هایی به شکل  $I_1 = e^{ik_1a}, I_2 = e^{ik_2a}$  باشند. در ادامه، دو تابع زیر را تعریف می‌کنیم:

$$u_1(x) = e^{-ik_1x} y(x)$$

$$u_2(x) = e^{-ik_2x} y(x)$$

در اینجا نیز شرط تناوبی شبکه  $u_1(x), u_2(x)$  برقرار می‌باشد.

$$u_1(x+a) = e^{-ik_1(x+a)} y(x+a) = e^{-ik_1(x+a)} y(x) = e^{-ik_1x} e^{ik_1a} e^{-ik_1a} y(x) =$$

$$u_1(x+a) = e^{-ik_1 x} y(x) = u_1(x)$$

به این معنی که می‌توان تابعی یافت که نسبت به انتقال، به اندازه یک بردار انتقال شبکه ناوردا باقی بماند. بنابراین می‌توان کلی‌ترین شکل تابع موج الکترون را در شبکه تناوبی یک بعدی به صورت زیر نوشت:

$$y_k(x) = u_k(x) e^{ikx} \quad (20-1)$$

تابع موج  $y_k(x)$  به تابع موج بلوخ معروف می‌باشد که سهم تناوبی آن با بردار شبکه  $a$  مربوط به  $u_k(x)$  می‌باشد.

$$u_k(x+a) = u_k(x) \quad (21-1)$$

به‌طور مشابه برای یک بلور با بیش از یک بعد نیز می‌توان مسئله را تعمیم داد. شکل سه بعدی تابع موج در یک بلور با بردار انتقال  $\mathbf{T}$  (تناوب شبکه) به صورت رابطه (21-1) می‌باشد.

$$\begin{aligned} y_k(\mathbf{r}) &= u_k(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ u_k(\mathbf{r} + \mathbf{T}) &= u_k(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (22-1)$$

**نکته 1-11:** توابع موج بلوخ (توابع موج رونده) فقط برای الکترون‌های رسانش و ظرفیت که تابع موج آنها در بلور گسترده می‌باشند، به کار می‌روند و برای الکترون‌های مغزی<sup>1</sup>، هر چند که شرط بلوخ را ارضاء می‌کنند ولی چون در فضا جایگزیده هستند و هیچ‌گونه هم‌پوشانی با اتم‌های پیرامون خود ندارند، تابع موج الکترون‌های اتم‌های منزوی را به خود می‌گیرند.

### 1-2-4 شرط بورن- وان کارمن یا شرط مرزی تناوبی<sup>2</sup>

با توجه به اینکه الکترون‌ها در حضور پتانسیل شبکه (با تقارن شبکه‌ای) منتشر یا پراکنده می‌شوند، از این رو، امواج ایستاده<sup>3</sup> نمی‌تواند پاسخ مناسبی برای الکترون‌ها باشد.

1. الکترون‌هایی که به هسته اتم بسیار نزدیک هستند.

2. Born-von Karman or periodic boundary condition

3. ناشی از شرایط مرزی با پتانسیل بی‌نهایت.

بنابراین، باید به دنبال توابع موج متحرکی برای آن‌ها باشیم. شرط بورن - وان کارمن یا شرط مرزی تکرار، یک تابع موج رونده را به الکترون نسبت می‌دهد.

با توجه به متناهی بودن ابعاد جامد بلورین، شرط مرزی تکرار، از اهمیت خاصی برای به دست آوردن حالت‌های سیستم برخوردار است. دلیل استفاده از این شرط، همان گونه که در بالا گفته شده، به دنبال پاسخ موج رونده برای الکترون‌ها در بلور و نیز تبدیل مسئله جامد بلورین با ابعاد متناهی به یک جامد بلورین با ابعاد نامتناهی<sup>1</sup> هستیم که حل مسئله را برای ما آسان‌تر می‌نماید. در ادامه نشان خواهیم داد که متناهی بودن ابعاد بلور باعث کوانتیزه شدن بردار موج الکترون  $k$  می‌شود و نشان خواهیم داد که تعداد حالات مجاز با تعداد یاخته واحد بلور برابر خواهد بود.

**مثال:** مقادیر مجاز بردار موج الکترونی  $k$  در یک شبکه بلورین یک بُعدی با طول  $L_x$  چگونه تعیین می‌شود؟

یک زنجیره به طول  $L_x$  با فاصله اتمی  $a$  را در نظر بگیرید از این رو  $L_x$  برابر است با  $L_x = Na$  که در اینجا  $N$  تعداد اتم یا یاخته می‌باشد. با توجه به تابع موج الکترون در یک شبکه تناوبی  $y_k(x)$  (رابطه (21-1)) و تناوبی بودن عبارت  $u_k(x)$  و اعمال شرایط مرزی تکرار  $y_k(x + L_x) = y_k(x)$ :

$$y_k(x + Na) = u_k(x + Na)e^{ik(x+Na)}$$

$$y_k(x + Na) = u_k(x)e^{ikx}e^{ikNa} = y_k(x) \quad (23-1)$$

که بایستی  $e^{ikNa}$  برابر واحد باشد تا عبارت بالا برقرار گردد.

$$e^{ikNa} = 1 = e^{i2\pi n} \quad (24-1)$$

عبارت (24-1) باعث کوانتیزه شدن بردار موج می‌گردد.

$$k_n = \frac{2\pi n}{Na} \quad n=0, \pm 1, \mathbf{K}, \pm \frac{N}{2} \quad (25-1)$$

فاصله بین دو حالت مجاز متوالی  $\Delta k$  برابر خواهد بود با:

$$\Delta k = \frac{2\pi}{Na} = \frac{2\pi}{L} \quad (26-1)$$

1. یکی از شروط بلوخ، بی‌نهایت بودن ابعاد جامد است.

رابطه‌ی (1-26) نشان می‌دهد، فاصله نقاط متوالی این مقادیر مجاز  $Dk$  با ابعاد بلور نسبت عکس دارد بدین معنی که برای یک سیستم ماکروسکوپی (ابعاد مزوسکوپی به بالا)  $\mathbb{R}^3$  فاصله متوالی نقاط مجاز  $Dk$  به صفر میل می‌کند که به پیوسته شدن مقادیر مجاز  $k_n$  منتهی می‌شود.

می‌توان بیان بالا را برای فضای سه‌بعدی نیز به سادگی تعمیم داد، بنابراین یک بلور متناهی حجمی با طول ابعاد  $L$  با شرط مرزی تناوبی، دارای مقادیر مجاز ناپیوسته در فضای سه‌بعدی  $k$  می‌باشد. با توجه به ماکروسکوپی طول ابعاد بلور، یاخته‌ی ویگنر - سایتز فضای معکوس (فضای  $k$ ) که همان ناحیه اول بریلوئن 1BZ است، دارای حجم بسیار کوچک زیر خواهد بود.

$$W = \frac{\hat{e}_x \hat{e}_y \hat{e}_z (2p)^3}{\hat{e}_x \hat{e}_y \hat{e}_z} = \frac{\hat{u}_x \hat{u}_y \hat{u}_z (2p)^3}{\hat{u}_x \hat{u}_y \hat{u}_z} = \hat{e}_x \hat{e}_y \hat{e}_z V \quad (27-1)$$

در ادامه به مسئله ساده شده یک بلور رسانا می‌پردازیم. یک رسانا با تقریب اول می‌توان به مانند یک گاز الکترونی بدون برهم‌کنش در جعبه‌ای به طول ابعاد  $L$  که دارای مقادیر مجاز گسسته  $k$  است در نظر می‌گیریم. با توجه به رابطه (1-27) چگالی حالت مجاز<sup>1</sup> در فضای اندازه حرکت برابر  $D(k) = V/(2p)^3$  است که در آن  $V$  حجم گاز محبوس در مکعبی به ابعاد  $L$  می‌باشد. با در نظر گرفتن اسپین برای الکترون‌ها، به ازای هر  $k$  مجاز، دو حالت کوانتومی با اسپین‌های مختلف بالا و پایین می‌توان به آن نسبت داد. اگر  $N$  سلول واحد تک اتمی با  $Z$  الکترون، در واحد حجم داشته باشیم، چگالی الکترونی سیستم  $n$  برابر  $ZN$  خواهد شد. در حالت پایه چنین سیستمی، با توجه به اصل طرد پائولی، کلیه حالت‌های مجاز تا بردار موج  $k_F$  (مطابق شکل (1-7)) با الکترون اشغال شده‌اند که در فضای  $k$  سطحی را مشخص می‌شود که حالت‌های اشغال شده را از حالت‌های خالی جدا می‌سازد که آن را سطح انرژی فرمی می‌نامند. در اینجا با توجه به تقریب الکترون آزاد، سطح کاملاً کروی است. بالاترین انرژی مجاز برای گاز الکترونی مربوط به سطح فرمی می‌باشد. از رابطه (1-28) می‌توان تعداد حالت‌های مجاز اشغال شده سیستم را با حاصل ضرب حجم کره فرمی<sup>2</sup> در

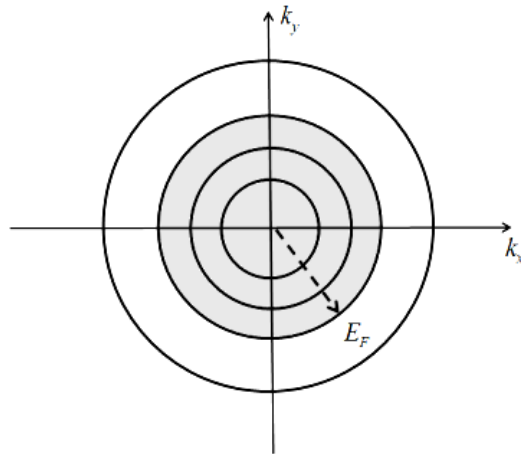
1. تعداد حالات مجاز در واحد حجم در فضای معکوس (فضای اندازه حرکت).

2. در برگیرنده‌ی کلیه حالت‌های اشغال شده.

چگالی حالت‌های مجاز  $D(k)$  در فضای  $k$  به دست آورد. ضریب 2 در رابطه (28-1) نشان دهنده‌ی دو حالت اسپینی برای هر الکترون می‌باشد.

$$N = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 2 \cdot \frac{4}{3} \pi k_F^3 \quad (28-1)$$

$$n = \frac{N}{V} \quad \text{و} \quad k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$



شکل 7-1. سطح فرمی برای الکترون‌های آزاد.

که در آن  $n = N/V$  چگالی الکترونی در جعبه‌ای با طول ابعاد  $L$  و بردار موج الکترون در سطح انرژی فرمی  $k_F$  (رابطه (29-1)) است. این سطح انرژی حالت‌های پر داخل کره را از حالت‌های خالی جدا می‌سازد.

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (29-1)$$

با جایگذاری مقدار عددی چگالی الکترونی فلزات (از مرتبه تقریباً  $10^{22} - 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ ) در معادله (28-1)، انرژی فرمی از مرتبه تقریباً  $15 - 1 \text{ eV}$  به دست می‌آید، که این مقدار در مقایسه با انرژی دمای اتاق  $k_B T = 0.026 \text{ eV}$  بسیار بزرگ می‌باشد.

**نکته 1-12:** برای یک سیستم ماکروسکوپی که ابعاد آن در حد سانتی‌متر و فاصله بین اتمی در حدود چند انگستروم باشد، تعداد یاخته در هر راستا از مرتبه  $10^8$  است که



تعداد کل یاخته بسیط، مجموعه توان سوم آن خواهد بود که از مرتبه عدد آوگادرو  $10^{23}$  خواهد شد. این بدان معنی است، تعداد نقاط مجاز در منطقه اول بریلوئن معادل است با تعداد یاخته‌های بسیط بلور که این تعداد برای یک سیستم ماکروسکوپی تقریباً برابر با عدد آوگادرو می‌باشد. از این رو شبه پیوسته در نظر گرفتن فضای  $k$  دور از واقعیت نیست.

**نکته 1-13:** با توجه به تعریف کره دبی (موج آکوستیکی با ماکزیمم فرکانس نوسانی  $\omega_D = vk_D$ ) که در بخش ارتعاشات شبکه‌ای (فونون) در کتاب فیزیک جامد 1 به آن اشاره شده است، طول موج دبی  $\lambda_D$  از آن استخراج می‌شود که هم ارز فاصله بین یونی در شبکه فلزات می‌باشد. از این رو، می‌توان رابطه (1-30) را که ما بین طول موج دبی و طول موج فرمی است، به دست آورد. یعنی طول موج الکترون‌های سطح فرمی با فاصله بین اتمی در بلور هم ارز می‌باشد.

$$I_F = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \Big|_D \quad (30-1)$$

که در اینجا  $Z$  تعداد الکترون‌های هر اتم می‌باشد.

**نکته 1-14:** در رابطه (1-25)  $k_n$  مقادیر مجاز را در ناحیه منطقه‌ی اول بریلوئن  $1BZ$  در نظر می‌گیریم  $k_n = \frac{p}{a}$  - که بعداً دلیل آن را توضیح خواهیم داد. نشان خواهیم داد که به ازای هر دو بردار موج  $k_1, k_2$  در این منطقه  $1BZ$   $k_1, k_2$  دو تابع موج الکترون مستقل نسبت داده خواهد شد  $y_{k_1}, y_{k_2}$ .

### 1-2-5 الکترون در یک بلور ایده‌آل

در این بخش نشان خواهیم داد بخشی از الکترون‌های یک بلور ایده‌آل در حالت پایه که بردار موج‌شان به مناطق بریلوئن می‌رسند توسط برهم‌کنش کولنی با پتانسیل یون‌های شبکه پراکنده می‌شوند<sup>1</sup>. ویژه حالت‌های این دسته الکترون‌ها از حل معادله شرودینگر با یک پتانسیل تناوبی خارجی (پتانسیل شبکه یونی) محاسبه می‌شود. در

1. این پراکندگی ناشی از پتانسیل شبکه و از نوع کشسان است. در ادامه نشان خواهیم داد متوسط اثرات این پراکندگی در نوارهای انرژی اعمال می‌شود و الکترون‌ها در این نوارهای انرژی تحول یافته دیگر توسط پتانسیل شبکه پراکنده نمی‌شوند. به زبان دیگر در یک بلور ایدآل رسانش نوارهای انرژی بی‌نهایت است. سهم پراکندگی الکترون‌ها با یکدیگر را می‌توان با تقریب الکترون آزاد صرف نظر نمود.

بخش 1-2-1 نشان داده شد که هر چه چگالی الکترون‌ها بالا باشند می‌توان از سهم انرژی پتانسیل برهم‌کنش بین الکترون‌ها  $V_{e-e}$  در مقایسه با انرژی جنبشی آن‌ها صرف‌نظر نمود. از این رو می‌توان با تقریب اول، آن‌ها را به مانند یک گاز بدون برهم‌کنش تصور نمود که فقط با یک پتانسیل شبکه یونی می‌توانند برهم‌کنش داشته باشند. در این فصل با این تقریب و با کمک گرفتن از بسط فوریه برای پتانسیل خارجی (به دلیل تناوبی بودن پتانسیل شبکه) و انتگرال فوریه برای توابع موج بلوخ گونه الکترون (به دلیل عدم تناوبی آن در بلور)، می‌توان به حل معادله شرودینگر با رویکرد امواج تخت پرداخت و ساختار الکترونی چنین سیستمی را مطالعه نمود.

**تمرین 1-1:** نشان دهید توابع موج الکترون در بلور (تابع موج بلوخ)، تناوبی نمی‌باشد. در ادامه سعی داریم، مسئله جامد بلورین را کمی واقع‌بینانه‌تر نگاه کنیم. در فلزات الکترون‌های رسانش و ظرفیت از قید کمتری در مقایسه با الکترون‌های مغزی برخوردار هستند. این دسته الکترون‌های ظرفیت و رسانش، متأثر از کل یون‌های شبکه بلورین هستند. در اینجا، همچنان فرض بر این است که الکترون‌ها با همدیگر برهم‌کنشی ندارند و مانند گاز الکترونی بدون برهم‌کنش در مجاورت یک پتانسیل خارجی (پتانسیل شبکه) می‌باشند. با مفروضات بالا، معادله شرودینگر یک سیستم  $N$  الکترونی به  $N$  معادله تک الکترونی تبدیل می‌شود. بنابراین حالت‌های چنین سیستمی از حل معادله شرودینگر یک تک الکترون به جرم  $m$  در یک پتانسیل تناوبی به صورت زیر به دست می‌آید:

$$H\psi = \hat{e} \frac{\hbar^2 \tilde{N}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \hat{u} \psi = E\psi \quad (31-1)$$

که در آن  $V(\mathbf{r})$  به عنوان انرژی پتانسیل برهم‌کنشی الکترون با پتانسیل شبکه یونی می‌باشد. عبارت انرژی پتانسیل در هر جامد بلورین را به علت تناوبی بودنش  $V(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = V(\mathbf{r})$  (با بردار انتقال شبکه  $\mathbf{T}$ )، می‌توان بسط فوریه داد<sup>1</sup>:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}}^{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \quad (32-1)$$

1. از ریاضیات می‌دانیم هر تابع تناوبی  $f(x+T) = f(x)$  را می‌توان بسط فوریه با دوره تناوب  $T$  داد.

که در اینجا  $\mathbf{G}$  بردار شبکه معکوس<sup>1</sup> است. برای سهولت می‌توان انرژی پتانسیل زمینه را طوری انتخاب نمود که متوسط پتانسیل در کل فضا صفر شود<sup>2</sup>  $V_0 = 0$ .  
 تمرین 1-2: نشان دهید که ضرایب بسط فوریه پتانسیل  $V_G^r$  به ازای  $G=0$  برابر است با متوسط پتانسیل در کل فضا می‌باشد.

از سوی دیگر، همان‌طور که در تمرین (1-1) به آن اشاره شد، به دلیل عدم تناوبی بودن تابع موج الکترون در یک بلور<sup>3</sup> می‌توان تابع موج الکترون را به صورت رابطه‌ی (1-33) بر روی کلیه حالت‌های مجاز<sup>4</sup> در کلیه مناطق بریلوئن  $\mathbf{K} < \mathbf{K} < \mathbf{K} + \mathbf{G}$  جمع بست:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} C_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \quad (33-1)$$

با جایگذاری رابطه‌ی (1-33) در روابطی (1-31)، معادله شرودینگر به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}}^r e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = E \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (34-1)$$

در معادله‌ی (1-34) قسمت انرژی پتانسیل را می‌توان دوباره به صورت زیر بازنویسی نمود.

$$V(\mathbf{r}) \psi = \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{K}} V_{\mathbf{G}}^r C_{\mathbf{K}} e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{K}} V_{\mathbf{G}}^r C_{\mathbf{K}-\mathbf{G}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \quad (35-1)$$

که در رابطه‌ی (1-35) تبدیل  $\mathbf{K} - \mathbf{G} \rightarrow \mathbf{K}'$  صورت پذیرفته است. معادله شرودینگر (1-35) به صورت زیر خلاصه می‌شود:

1.  $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$  بردار انتقال شبکه معکوس (reciprocal lattice) و  $\mathbf{b}_i$  بردارهای شبکه معکوس است. این شبکه از شبکه واقعی (با بردارهای شبکه  $\mathbf{a}_i$ ) و با استفاده از رابطه  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$  به دست آورده می‌شود. با در نظر گرفتن بردار انتقال در شبکه واقعی به صورت  $\mathbf{T} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 + p\mathbf{a}_3$ ،  $n, m, p \in \mathbb{Z}$  می‌توان رابطه‌ی  $(\mathbf{G}\cdot\mathbf{T} = 2\pi n)$  را نتیجه گرفت.

2.  $V_{G=0} = \frac{1}{W} \int_{\text{cell}} V(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0$  حجم بلور  $W$

3. تابع موج الکترون در یک بلور (تابع موج بلوخ  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ ) رفتار تناوبی در بلور ندارد  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}}$ ، از این رو بایستی به صورت انتگرال فوریه آن را بسط داد.

4. که از شرط مرزی تناوبی استخراج می‌شود.

$$\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - E_{\mathbf{k}} + \mathbf{a}_G \cdot \mathbf{V}_G^{\mathbf{r}} C_{\mathbf{k}-G}^{\mathbf{r}} = 0 \quad (36-1)$$

باتوجه به رابطه‌ی (36-1)، کلی‌ترین پاسخ را می‌توان از صفر نمودن عبارت داخل کروشه نتیجه گرفت.

$$\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - E_{\mathbf{k}} + \mathbf{a}_G \cdot \mathbf{V}_G^{\mathbf{r}} C_{\mathbf{k}-G}^{\mathbf{r}} = 0 \quad (37-1)$$

**نکته 15-1:** با توجه به رابطه‌ی (32-1)، اگر  $\mathbf{V}_G^{\mathbf{r}}$  ها همگی صفر باشند به معنی خاموش بودن پتانسیل شبکه یونی است که به نتیجه گاز الکترونی آزاد در یک شبکه خواهیم رسید. یک نکته ظریفی در اینجا وجود دارد که این الکترون را با الکترون آزاد خارج از شبکه متفاوت می‌سازد. نشان خواهیم داد وجود برچسب شبکه باعث می‌شود تا انرژی الکترون نسبت به بردار شبکه معکوس رفتار تناوبی پیدا نماید که در ادامه به آن خواهیم پرداخت (رابطه‌ی (51-1)).

هر نقطه  $\mathbf{K}$  مجاز خارج از منطقه اول بریلوئن توسط یک بردار شبکه معکوس  $\mathbf{G}$  به یک نقطه  $\mathbf{k}$  در منطقه اول بریلوئن می‌توان نسبت داد (رابطه‌ی (38-1)).

$$\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{G} \quad (38-1)$$

$$\frac{\hbar^2 (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2}{2m} - E_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} + \mathbf{a}_G \cdot \mathbf{V}_G^{\mathbf{r}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\mathbf{r}} = 0 \quad (39-1)$$

از طرفی جمع چند بردار شبکه معکوس خود یک بردار شبکه معکوس می‌باشد. از این رو با تبدیل  $\mathbf{G} + \mathbf{G} = \mathbf{G}$  در رابطه‌ی (39-1) می‌توان آن را به صورت عبارت ساده زیر نوشت.

$$\frac{\hbar^2 (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2}{2m} - E_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} + \mathbf{a}_G \cdot \mathbf{V}_G^{\mathbf{r}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\mathbf{r}} = 0 \quad (40-1)$$

در عبارت جمع (40-1) به ازای هر  $\mathbf{k}$  در منطقه اول بریلوئن، می‌توان جملاتی با ضرایب  $C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\mathbf{r}}$  های مختلف داشت.

تعداد جملات جمع در جمله دوم رابطه (40-1) بستگی به پیچیدگی شکل انرژی پتانسیل دارد. هرچه تغییرات انرژی پتانسیل نرم تر<sup>1</sup> باشد عبارت بسط (1-32) و تعداد جملات غیر صفر بسط فوریه پتانسیل  $V_G^{\mathbf{r}} \neq 0$ ، کاهش می یابد. از این رو، برای چنین انرژی پتانسیلی اندازه ضرایب  $V_G^{\mathbf{r}}$  ها به ازای  $\mathbf{G}$  های بزرگ، سریعاً به سمت صفر میل می کند (شکل (1-8) ب) و جمع بالا تا چند بردار شبکه معکوس  $\mathbf{G}$  خلاصه می شود. برای نشان دادن این موضوع، از پتانسیل برهم کنشی الکترون در مکان  $\mathbf{r}$  با جمع تک تک اتم های شبکه که در موقعیت های  $\mathbf{r}_j$  واقعند، شروع می نمایم (رابطه (1-41)).

$$V(\mathbf{r}) = \sum_j V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \quad (41-1)$$

که در آن  $\mathbf{r}_j$  مکان اتم  $j$ ام و  $V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$  پتانسیل برهم کنشی اتم  $j$ ام با الکترونی که در مکان  $\mathbf{r}$  می باشد. که در ادامه می توان مکان اتم  $j$ ام  $(\mathbf{r}_j)$  را برابر با بردار انتقال در شبکه واقعی  $\mathbf{T}$  دانست<sup>2</sup>.

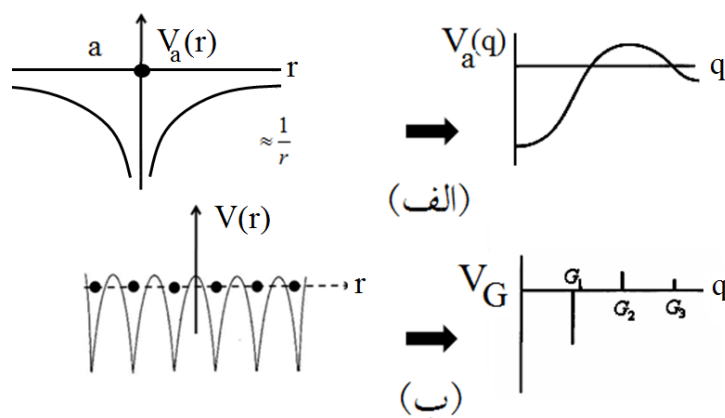
با انتگرال فوریه از انرژی پتانسیل شبکه  $V(\mathbf{r})$  می توان ضرایب فوریه آن را به صورت زیر تعیین نمود.

$$V(\mathbf{q}) = \Omega^{-1} \int_{\Omega} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (42-1)$$

$$V(\mathbf{q}) = \Omega^{-1} \int_{\Omega} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \sum_j V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) d\mathbf{r} = \Omega^{-1} \sum_j \int_{\Omega} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) d\mathbf{r}$$

1. تغییرات پتانسیل خیلی شدید نباشد. برای مثال پتانسیل برهم کنش کولنی در نزدیکی های هسته اتم به شدت تغییر می کند.

2. این برابری  $(\mathbf{r}_j = \mathbf{T})$  را می توان با در نظر گرفتن مبداء مختصات بر روی هر نقطه از شبکه نشان داد. زیرا هر نقطه از شبکه توسط بردار انتقال به نقطه همسان دیگر از شبکه منتقل می سازد.



شکل 8-1. الف)  $V_a(r)$  و  $V_a(q)$  در شکل به ترتیب پتانسیل و عبارت تبدیل فوریه پتانسیل تک اتم منزوی می‌باشد. ب) با کنار هم قرار دادن اتم‌ها و تشکیل یک شبکه بلوری، عبارت ضرایب فوریه پتانسیل شبکه فقط به ازای  $\mathbf{q} = \mathbf{G}$  پاسخ غیر صفر دارند  $V_G \neq 0$ .

در عبارت (42-1)  $\Omega$  حجم بلور و  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$  می‌باشند. عبارت  $\sum_{\mathbf{r}_j} \sum_{\mathbf{r}_i} \mathbf{a} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i}$

در رابطه (42-1) جمع روی کل اتم‌های فضای بلور می‌باشد که این باعث می‌گردد این جمع به دلیل رفتار تناوبی اش  $e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j}$  برابر صفر شود<sup>1</sup>. همانطور که در صفحه قبل به آن اشاره شد می‌توان  $\mathbf{r}_j$  را برابر بردار انتقال در فضای واقعی  $\mathbf{T}$  در نظر گرفت که با اعمال

آن در رابطه  $\sum_{\mathbf{r}_j} \sum_{\mathbf{r}_i} \mathbf{a} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i}$  فقط در شرایطی عبارت جمع  $\sum_{\mathbf{r}_j} \sum_{\mathbf{r}_i} \mathbf{a} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i}$  پاسخ غیر صفر

دارد که  $\mathbf{q}$  ها برابر با بردار شبکه معکوس  $\mathbf{G}$  باشند که در این صورت عبارت تناوبی نمایی به دلیل شرط  $\mathbf{G} \cdot \mathbf{T} = 2\pi n$  به ازای  $\mathbf{z} = n\hat{\mathbf{z}}$  برابر واحد است و حاصل عبارت

1. رفتار تابع  $e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j}$  به ازای  $\mathbf{q} \neq 0$  به صورت توابع سینوسی و کسینوسی می‌باشد که یک تابع نوسانی است. این تابع در قسمتی از فضا  $\mathbf{r}_j$  مثبت و در قسمت دیگری از فضا  $\mathbf{r}_j$  منفی می‌شود که جمع روی کل فضا برابر صفر می‌گردد  $\sum_{\mathbf{r}_j} \mathbf{a} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} = 0$ .

2. رابطه بین بردارهای انتقال در شبکه واقعی و معکوس که از فیزیک حالت جامد<sup>1</sup> به یاد داریم.

جمع، برابر با تعداد یاخته واحد بلور می‌شود<sup>۱</sup> و رابطه (8-1) (43-1) به دست می‌آید (شکل (8-1) ب).

شکل (8-1) نکات جالبی به همراه دارد. شکل (8-1) الف، سمت چپ پتانسیل اتم منزوی و سمت راست تبدیل فوریه آن می‌باشد و شکل (8-1) ب، سمت چپ یک پتانسیل تناوبی شبکه و سمت راست آن تبدیل فوریه آن را نشان می‌دهد. ضریب فوریه‌ای پتانسیلی که الکترون از یک یون منزوی می‌بیند  $\mathbf{q}$  های پیوسته را در بر می‌گیرد در صورتی که همین الکترون در یک شبکه یونی فقط به ازای  $\mathbf{q}$  هایی که با بردار شبکه معکوس برابری می‌کند  $\mathbf{q} = \mathbf{G}$  پاسخ‌های غیر صفر را دارد.

$$\int_{\Omega} V(\mathbf{q}) = \frac{N}{\Omega} \int_{\Omega} V_a(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \frac{N}{\Omega} V_a(\mathbf{q}) \quad \mathbf{q} = \mathbf{G} \quad (43-1)$$

$$\int_{\Omega} V(\mathbf{q}) = 0 \quad \mathbf{q} \neq \mathbf{G}$$

در ادامه با یک مثال به تابع موج الکترون در یک شبکه بلوری که رفتار بلوخ گونه دارد، خواهیم پرداخت. همچنین اعداد کوانتومی را معرفی می‌نماییم که حالت الکترون را در شبکه مشخص می‌نماید.

در ابتدا نشان می‌دهیم تابع موج الکترون در نظر گرفته شده در رابطه‌ی (8-1) (33-1) رفتار تابع بلوخ را دارد. از این رو خواهیم داشت:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} C_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$$

در رابطه بالا جمع روی بردار  $\mathbf{K}$  کل فضای معکوس (اندازه حرکت) می‌باشد که می‌توان به صورت دو جمع یکی روی کلیه نقاط داخل منطقه اول بریلوئن  $\mathbf{k}$  و دیگری روی کلیه بردار انتقال در فضای اندازه حرکت  $\mathbf{G}$  که هر نقطه از منطقه اول را به دیگر مناطق بریلوئن نسبت می‌دهد.

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

۱.  $\sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{T}} \mathbf{a} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{T}} = \sum_{\mathbf{T}} \mathbf{a} 1 = N$

که در آن  $u_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r})$  به صورت  $u_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) = \sum_G C_{k-G}^{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$  در نظر گرفته شده است که به سادگی تناوبی بودن  $u_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = u_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r})$  آن قابل مشاهده می‌باشد. از این رو در ادامه شکل تابع موج الکترون در یک شبکه بلوری به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود که شرط بلوخ<sup>1</sup> را ارضاء می‌کند.

$$\begin{aligned} \psi_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) &= \sum_k u_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_k y_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) \\ \psi_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) &= u_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad \mathbf{k} \in 1\text{BZ} \end{aligned} \quad (44-1)$$

که در این جا  $\mathbf{k}$  بردار موج الکترون در منطقه اول بریلوین در نظر گرفته می‌شود. نکته 1-16: در معادلات بالا هیچ فرضی در بزرگی و شکل پتانسیل به کار برده نشده است و شکل تابع بلوخ به صورت  $y_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) = \sum_k u_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  مستقل از ویژگی شکلی پتانسیل شبکه‌ای است.

با استفاده از شکل ویژه تابع موج معرفی شده در رابطه‌ی (1-44) و قرار دادن آن در معادله شرودینگر (رابطه‌ی (1-31))، شکل جدیدی را برای معادله شرودینگر برحسب  $u_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r})$  (قسمت تناوبی ویژه تابع موج بلوخ) می‌توان نتیجه گرفت.

$$\begin{aligned} H y_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) &= E(\mathbf{k}) y_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) \\ \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) y_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) &= E(\mathbf{k}) y_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) \\ \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \sum_k u_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} &= E(\mathbf{k}) \sum_k u_k^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (45-1)$$

با استفاده از روابط:  $\nabla^2(fg) = f\nabla^2g + 2\nabla f \cdot \nabla g + g\nabla^2f$ ،  $\nabla e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = i\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ ،  $\nabla^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = -k^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  معادله بالا به صورت زیر نوشته می‌شود.

۱.  $y_k(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}} y_k(\mathbf{r})$



$$\frac{-\hbar^2}{2m} [\tilde{N}^2 + 2i\mathbf{k} \times \tilde{N} - k^2] u_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r})$$

$$H_{\mathbf{k}} = \frac{-\hbar^2}{2m} [\tilde{N}^2 + 2i\mathbf{k} \times \tilde{N} - k^2] + V(\mathbf{r})$$

$$H_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) \quad (46-1)$$

معادله شرودینگر (45-1) به معادله شرودینگر (46-1) تبدیل یافته است با این تفاوت که ویژه تابع موج الکترون (معادله‌ی (45-1)) نسبت به بردار انتقال  $\hat{T}$  تناوبی نمی‌باشد در صورتی که ویژه تابع معادله‌ی (46-1) رفتار تناوبی نسبت به بردار انتقال  $\hat{T}$  دارد. به این معنی است که به‌ازای هر  $\mathbf{k}$  در منطقه‌ی اول بریلوئن و به‌ازای هر سلول، معادله (46-1) برقرار می‌باشد. از این رو تابع موج الکترون به‌ازای هر سلول به‌صورت رابطه‌ی (47-1) می‌باشد.

$$\begin{aligned} y_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= u_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \times (\mathbf{r} + \mathbf{R})} = u_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \times \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k} \times \mathbf{R}} \\ y_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= e^{i\mathbf{k} \times \mathbf{R}} y_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (47-1)$$

در رابطه‌ی (47-1) عبارت  $e^{i\mathbf{k} \times \mathbf{R}}$  به صورت فاز در تابع موج الکترون ظاهر شده است که نشان دهنده عدم تناوبی بودن تابع موج الکترون در بلور می‌باشد. با توجه به این که چگالی توزیع الکترون در فضای بلور برابر با اندازه توان دوم تابع موج الکترون می‌باشد که نشان دهنده تناوبی بودن آن می‌باشد.

$$\begin{aligned} r(\mathbf{r}) &= |y_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r})|^2 = |u_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r})|^2 \\ r(\mathbf{r}) &= r(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \end{aligned} \quad (48-1)$$

**نکته 1-17:** می‌توان نشان داد تغییرات هامیلتونی  $H_{\mathbf{k}}$  (معادله‌ی (46-1)) نسبت  $\hat{k}$  به‌ازای تغییرات کوچک  $d\mathbf{k}$  در منطقه اول بریلوئن تغییرات کوچک  $dH_{\mathbf{k}}$  را حادث می‌شود، از این رو انرژی  $E(\mathbf{k})$  در فضای  $\hat{k}$  پیوسته تغییر می‌نماید. معادله‌های (45-1) و (46-1) برای یک شبکه با پتانسیل خاموش نیز برقرار می‌باشد. با پتانسیل شبکه‌ی خاموش  $V(\mathbf{r})=0$ ، پاسخ معادله‌ی (46-1) باید به‌صورت

تابع موج الکترون آزاد  $u_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$  باشد. با قرار دادن این تابع در معادله‌ی (46-1) ویژه مقدار انرژی یک شبکه خاموش به صورت رابطه‌ی (49-1) نتیجه می‌دهد.

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{q}|^2 \quad (49-1)$$

آیا رابطه‌ی (49-1) به ازای هر بردار  $\mathbf{q}$  برقرار است؟ اگر برقرار باشد، معادله شبکه خاموش به نظر می‌رسد به ازای هر بردار  $\mathbf{k}$  از منطقه‌ی بریلوئن بی‌نهایت جواب بایستی داشته باشد! نکته‌ی مهمی که در اینجا فراموش شده است، این است که این الکترون در یک شبکه قرار دارد هر چند که خاموش باشد. به این معنی که تابع موج آن بایستی شرط بلوخ را ارضاء نماید. با استفاده از سهم تناوبی تابع موج الکترون  $u_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = u_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r})$  و نیز پاسخ شبکه خاموش  $u_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$  به رابطه‌ی (50-1) خواهیم رسید:

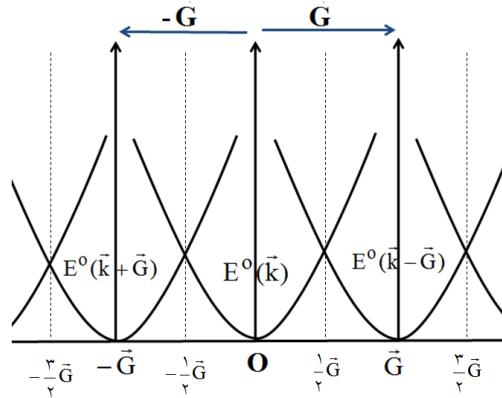
$$e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r} + \mathbf{T})} = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \cdot e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{T}} = 1 \quad \backslash \quad \mathbf{q} = \mathbf{G} \quad (50-1)$$

رابطه‌ی (50-1) نشان می‌دهد، فقط به ازای یک تعداد محدودی از بردار  $\mathbf{q}$  که برابر است با بردارهای شبکه معکوس  $\mathbf{G}$ ، می‌تواند صادق باشد که این تعداد همان تعداد یاخته بسیط در هر بلور می‌باشد.

$$E^o(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \quad (51-1)$$

بنابراین به ازای هر  $\mathbf{k}$  از منطقه اول بریلوئن به تعداد یاخته بسیط (به تعداد  $\mathbf{G}$ )، پاسخ خواهیم داشت. که در آیند با در نظر گرفتن منطقه اول بریلوئن ویژه حالت‌های الکترون با دو اندیس  $\mathbf{k}$  و  $\mathbf{G}$  مشخص می‌گردد که در ادامه به جای اندیس  $\mathbf{G}$  از اندیس  $n$  به عنوان شماره نوار انرژی معرفی می‌گردد. بنابراین ویژه حالت‌ها و ویژه مقادیر هر الکترون در شبکه با دو عدد کوانتومی  $n$  و  $k$  مشخص می‌شود.

$$E_n(\mathbf{k}) \quad , \quad \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (52-1)$$



شکل 9-1. نمودار انرژی الکترون در یک شبکه بلوری خاموش.

**چند نکته در مورد تابع بلوخ:**

- بردار موج  $\mathbf{k}$  در منطقه اول بریلوئن که برای برچسب زدن تابع بلوخ به کار می‌رود چه مفهوم فیزیکی می‌تواند داشته باشد؟ از آنجا که تابع موج بلوخ، ویژه حالت هامیلتونی برای الکترون‌های تقریباً آزاد در یک شبکه بلورین می‌باشد، آیا می‌تواند ویژه حالت مشاهده پذیر اندازه حرکت الکترون  $\mathbf{p}$  نیز باشد؟
- در اینجا برای پاسخ به این سوالات از مفاهیم کوانتومی الکترون استفاده می‌کنیم. برای این کار کافی است عملگر اندازه حرکت را در تابع موج بلوخ اعمال نماییم و ملاحظه کنیم آیا حاصل برابر با حاصل ضرب یک مقدار حقیقی در همان تابع موج بلوخ خواهد شد یا خیر؟

$$\begin{aligned} \hat{P} \psi_{\mathbf{n}\mathbf{k}}^{\mathbf{r}} &= \frac{\hbar \mathbf{k}}{i} \psi_{\mathbf{n}\mathbf{k}}^{\mathbf{r}} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{i} \int d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} u_{\mathbf{n}\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \\ \hat{P} \psi_{\mathbf{n}\mathbf{k}}^{\mathbf{r}} &= \hbar \mathbf{k} \psi_{\mathbf{n}\mathbf{k}}^{\mathbf{r}} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{\hbar \mathbf{k}}{i} \int d\mathbf{r}' u_{\mathbf{n}\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (53-1)$$

باتوجه به رابطه (53-1) می‌توان گفت که تابع موج بلوخ، ویژه توابع اندازه حرکت الکترون نمی‌باشد. از این رو بردار  $\hbar \mathbf{k}$  به عنوان اندازه حرکت الکترون شناخته نمی‌شود، هر چند که در پراکندگی الکترون با فوتون و یا شبه ذراتی مانند فونون،..... بردار  $\hbar \mathbf{k}$  به مانند بردار اندازه حرکت الکترون در فرآیند برخورد از

قوانین پایستگی اندازه حرکت در بلور تبعیت می‌کند ولی هیچ ارتباطی به اندازه حرکت الکترون (حاصل ضرب جرم در سرعت) ندارد. به بردار  $\hbar\mathbf{k}$  اندازه حرکت بلوری الکترون گفته می‌شود. این بردار لزومی ندارد هم راستای سرعت الکترون باشد که در ادامه همین فصل به آن خواهیم پرداخت. همانطور که اشاره شد اندازه حرکت بلوری الکترون در پراکندگی نقش مهمی را بازی می‌کند، به این معنی که یک الکترون با بردار موج  $\mathbf{k}$  در فرآیند جذب می‌تواند فوتونی با بردار موج  $\mathbf{q}$  را جذب نماید (قاعده جذب  $\mathbf{k} + \mathbf{q} = \mathbf{k}' + \mathbf{G}$ ) و آن را از حالت  $\mathbf{k}$  به حالت  $\mathbf{k}'$  پراکنده نماید.

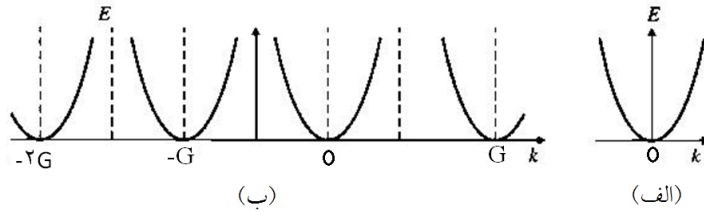
همان‌طور که در نظریه بلوخ به آن اشاره شد می‌توان کلیه بردار موج الکترون‌های  $\mathbf{k}$  خارج از منطقه اول بریلوئن را توسط یک بردار شبکه معکوس  $\mathbf{G}$  با نقطه‌ای در داخل منطقه اول بریلوئن  $\mathbf{k}$  برای الکترون‌های هم انرژی (به‌ازای هر نوار انرژی  $n$ ) هم ارز دانست که توسط یک تابع موج بلوخ نمایش داده می‌شوند  $y_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = y_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r})$ . از طرف دیگر کلیه نقاط مجاز  $\mathbf{k}$  در منطقه اول بریلوئن کاملاً مستقل بوده و نمی‌توانند به‌ازای هر دو نقطه در یک منطقه بریلوئن  $(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{k} + \mathbf{G}')$  تابع موج یکسانی داشته باشند  $y_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \neq y_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r})$ . از این رو می‌توان خواص الکترونی بلور مانند: چگالی الکترونی حالت پایه سیستم، انرژی کل سیستم و غیره را فقط توسط نقاط داخلی یکی از مناطق بریلوئن توصیف نمود<sup>1</sup>.

• الکترون آزاد دارای انرژی  $E^0(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$  و ویژه تابع  $y_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  می‌باشد (شکل (10-1) الف). ولی همین الکترون در یک شبکه حتی خاموش، انرژی مجموعه رفتار تناوبی<sup>2</sup> با بردار شبکه معکوس  $\mathbf{G}$  را به خود می‌گیرد (شکل (10-1) ب). با روشن نمودن پتانسیل یونی و ظهور پتانسیل شبکه بلورین و برهم‌کنش کشسان برخی از الکترون‌ها در بلور با پتانسیل شبکه، تغییراتی را در نوارهای انرژی ایجاد می‌نماید که به‌ازای کلیه بردار شبکه معکوس  $\mathbf{G}$  رابطه

1. در محاسبات منطقه اول بریلوئن را به دلیل یک‌پارچه‌گی و سادگی در نظر گرفته می‌شود.

2. الکترون در شبکه خاموش با الکترون آزاد این تفاوت را دارد که شرط بلوخ بر الکترون‌های شبکه خاموش حاکم می‌باشد که بر الکترون آزاد حاکم نیست. از طرفی رفتار تناوبی که در شبکه خاموش حاکم است در شبکه روشن نیز حاکم می‌باشد.

تناوبی  $E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k} + \mathbf{G})$  هم‌چنان برای تابع انرژی برقرار است. (شکل (9-1) و شکل (10-1) ب).



شکل 10-1. الف) نمودار انرژی برای الکترون آزاد بدون حضور شبکه ب) نمودار انرژی الکترون در یک شبکه بلوری

### 6-2-1 شرط پراش الکترون‌های ظرفیت

از اپتیک می‌دانیم که امواج الکترومغناطیس توسط اشیایی با اندازه‌ی مرتبه طول موج خود پراکنده می‌شوند. به زبان ساده‌تر امواج الکترومغناطیس با یک طول موج خاص می‌توانند آشکارساز خوبی برای اشیایی با همان مرتبه طولی باشند. با این مفهوم و جایگزین کردن امواج الکترونی به جای امواج الکترومغناطیس می‌توان به سادگی رفتار پراکندگی الکترون‌ها را با یک شبکه یونی معادل سازی نمود. طول موج الکترون‌های سطح فرمی، از مرتبه فاصله بین یونی در شبکه بلورین می‌باشد (رابطه (30-1)). بنابراین، این دسته از الکترون‌ها پتانسیل شبکه را دیده و توسط آن‌ها قویاً پراکنده می‌شوند که در این صورت مدل الکترون‌های آزاد نمی‌تواند پاسخ مناسبی برای این دسته الکترون‌ها باشد. برای بهتر نمودن پاسخ‌های مدل الکترون آزاد با روش اختلال<sup>1</sup>، ابتدا به پاسخ‌های اولیه  $|\mathbf{k}\rangle$  این مدل رو می‌آوریم (الکترون آزاد<sup>2</sup>). اختلال تا مرتبه دوم به صورت زیر نوشته می‌شود:

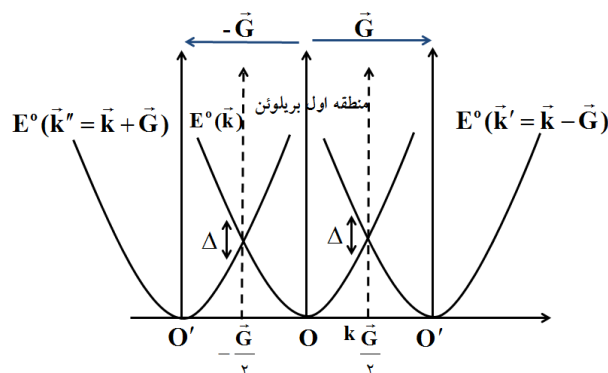
$$E(\mathbf{k}) = E^0(\mathbf{k}) + \langle \mathbf{r} | V | \mathbf{k} \rangle + \sum_{\mathbf{k}\neq\mathbf{k}'} \frac{|\langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k}' \rangle|^2}{E^0(\mathbf{k}) - E^0(\mathbf{k}')} \quad (54-1)$$

1. از مکانیک کوانتومی بخش اختلال به یاد داریم.

$$2. \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

$$E^0(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$$

با محاسبه مقدار چشم‌داشتی عبارت  $V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}}^{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$  نسبت به ویژه برداری‌های الکترون آزاد  $\langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k} \rangle$ ، نشان داده می‌شود که جمله دوم عبارت (1-54) مقدار است ثابت و برابر است با ضریب  $V_{\mathbf{G}=0}^{\mathbf{r}} = V_0$  می‌باشد. که همان‌طور که قبلاً به آن اشاره شد با انتخاب سطح پتانسیل مناسب این جمله را می‌توان برابر با صفر در نظر گرفت. بزرگی اختلال مرتبه دوم (جمله سوم عبارت (1-54)) بستگی به مقادیر عناصر غیر قطری ماتریس پتانسیل در نمایش اندازه حرکت الکترون آزاد  $\langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k} \rangle$  و اندازه اختلاف انرژی  $\Delta = E^0(\mathbf{k}) - E^0(\mathbf{k} \mp \mathbf{G})$  در مخرج به ازای  $\mathbf{k} \pm \mathbf{G}$  دارد (رابطه (1-54)).

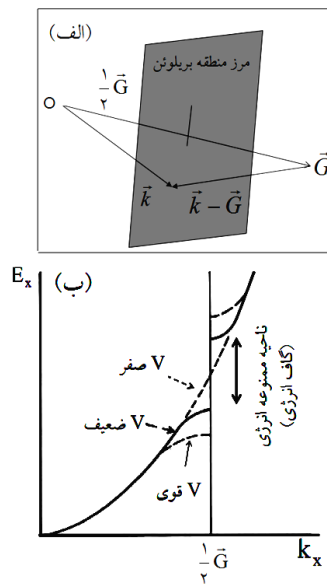


شکل 1-11. نمایش نوار انرژی الکترون آزاد در دو منطقه  $\mathbf{O}$  و  $\mathbf{O}\mathbf{G}$  در شبکه پتانسیل خاموش.

**نکته 1-18:** با یک نگاه به عبارت (1-54)، ملاحظه می‌شود که در حالت  $E^0(\mathbf{k}) = E^0(\mathbf{k} \mp \mathbf{G})$ ، به علت صفر شدن مخرج جمله سوم، سهم جمله اختلال قابل ملاحظه شده که باعث دور ساختن انرژی نواری الکترون  $E(\mathbf{k})$  در شبکه از انرژی نواری الکترون آزاد  $E^0(\mathbf{k})$  می‌شود<sup>1</sup>. با توجه به شکل (1-11) این رفتار برای آن دسته الکترون‌هایی که بردار موج‌شان  $\mathbf{k}$  در اطراف مرزهای بریلوئن و یا در محل‌های که

1. این شرط فقط برای الکترون‌های یک شبکه بلوری (با یک پتانسیل تناوبی) اتفاق می‌افتد شکل (1-13).

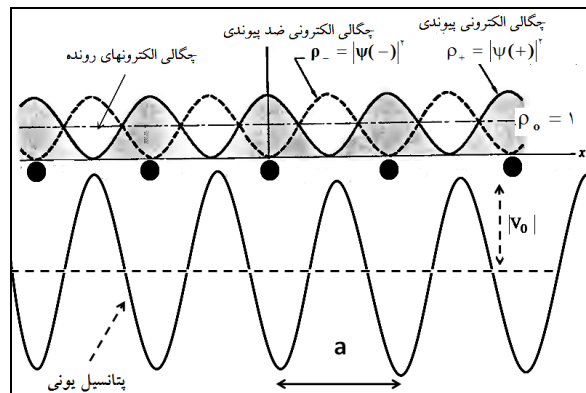
نوارهای الکترون در شبکه خاموش روی هم افتاده‌اند، برقرار است. این دسته الکترون‌ها شرط بلوخ را ارضاء می‌کنند  $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{G}$  و پتانسیل شبکه یونی  $V(\mathbf{r})$  را قویاً می‌بینند و پراکنده می‌شوند و با امواج الکترونی پراکنده شده‌ی خود تداخل پیدا کرده و امواج ایستاده‌ای را تشکیل می‌دهند که در کریستال منتشر نمی‌شوند (سرعت گروه این امواج الکترونی تداخلی صفر می‌باشد) و در فضا جایگزیده هستند. این اختلال باعث رفع تبهگنی نوارهای انرژی الکترون آزاد در شبکه خاموش در مرز مناطق بریلوئن به اندازه یک گاف انرژی می‌شود (شکل (12-1)ب).



شکل 12-1. الف). آن دسته الکترون‌هایی که پتانسیل شبکه یونی را می‌بینند و توسط آن پراکنده می‌شوند، شرط پراش را ارضاء می‌نمایند بر روی مرزهای مناطق بریلوئن واقع هستند. ب) تغییر انرژی سیستم، هنگام حضور پتانسیل شبکه و ایجاد ناحیه ممنوعه در سه حالت پتانسیل ضعیف، قوی و صفر.

هر چه از مرزهای مناطق دور می‌شویم به دلیل جدایی دو نوار انرژی  $E^0(\mathbf{k})$  و  $E^0(\mathbf{k} \neq 0)$  (مطابق شکل (11-1) این جدایی با  $D$  نمایش داده شده است) و عدم تبهگنی، سهم جمله دوم اختلال رابطه (1-54) بسیار ناچیز بوده و با حذف سهم جمله دوم و صفر شدن جمله اختلال مرتبه اول  $\langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k} \rangle$  (به دلیل صفر در نظر گرفتن عبارت  $V_0 = 0$ ،

فقط سهم بدون اختلال باقی می ماند که همان رفتار الکترون آزاد می باشد  $E^0(k)$ . مسئله 1-1: در تکمیل نکته (18-1)، تداخل دو موج تخت الکترونی رونده  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  و  $e^{i(\mathbf{k}-\frac{\mathbf{G}}{2})\cdot\mathbf{r}}$  مربوط به بردار موج  $\mathbf{k}$  در مرز منطقه بریلوئن به ازای  $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{G}}{2}$  که هر کدام به تنهایی دارای سرعت فاز یکسان ولی در جهت عکس هم دیگر می باشند  $e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}/2}$  و  $e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}/2}$ ، تداخل آن ها، دو موج ایستاده با سرعت گروه صفر را نتیجه می دهد. احتمال یافتن چنین الکترون هایی در فضای اطراف یون ها برابر با توان دوم تابع موج ایستاده شان است. بنابراین تابع چگالی توزیع الکترون، ناشی از تداخل دو موج رونده در فضای یونی به دو صورت تبدیل می یابند: یکی با انرژی پایین تر و دیگری با انرژی بالاتر که به ترتیب نقش پیوندی و ضد پیوندی را بازی می نماید. این اختلاف انرژی در مرز مناطق بریلوئن، ناحیه ممنوعه ای را مابین انرژی پیوندی و ضد پیوندی ایجاد می نماید که باعث می شود الکترون ها در یک پتانسیل شبکه یونی نتوانند مانند الکترون های آزاد هر انرژی دلخواهی را به خود بگیرند. این ناحیه به صورت یک گاف انرژی در بین نوارهای انرژی، ایجاد می گردد (شکل (12-1) ب).



شکل 13-1. یک زنجیره اتمی با فاصله شبکه  $a$  و پتانسیل کسینوسی را نشان می دهد. چگالی الکترونی در سه حالت تابع موج الکترون بدون برهم کنش، با برهم کنش با پتانسیل شبکه (پیوندی و ضد پیوندی).

برای درک کمی مطالب بالا، یک شبکه یک بعدی با فاصله اتمی  $a$  را در نظر می گیریم. برای حل تقریبی، پتانسیل شبکه ای حاصل از یون ها را در این جا کسینوسی با دامنه  $|V_0|$  به کار می بریم (مطابق شکل (13-1)). الکترون با بردار موج



در حال انتشار پتانسیل شبکه را دیده و پراکنده می شود و به بردار موج  $\mathbf{k}$  تغییر می یابد (شرط پراش برای این دسته الکترون ها برقرار است).

$$\begin{aligned} \mathbf{k} &= \mathbf{k} - \mathbf{G} \\ \mathbf{k} &= \mathbf{G}/2 - \mathbf{G} \\ \mathbf{k} &= -\mathbf{G}/2 = -\hat{i}(p/a) \end{aligned}$$

تابع موج رونده الکترون  $y \gg \exp(iPx/a)$  به تابع موج  $y \gg \exp(-iPx/a)$  پراکنده می شود.

با تداخل این دو موج الکترونی ( $y \gg \exp(iPx/a)$  و  $y \gg \exp(-iPx/a)$ ) که نسبت به هم اختلاف فاز  $p$  دارند، دو موج الکترونی ایستاده جدیدی به صورت  $y(\pm) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\exp(iPx/a) \pm \exp(-iPx/a)]$  ایجاد می گردد. امواج ایستاده حاصله عبارت هستند از  $y(+)=\sqrt{2} \cos(Px/a)$  و  $y(-)=\sqrt{2} i \sin(Px/a)$ . چگالی الکترون ها یا احتمال حضور الکترون ها در فضا از مجذور قدر مطلق تابع موج الکترون نتیجه می شود. از این رو در شکل (13-1) می بینیم چگالی الکترونی در حالت بدون برهم کنش با چگالی  $r_0$  و با برهم کنش با پتانسیل شبکه با چگالیهای  $r_{\pm}$  نشان داده شده است که عبارت هستند از:

$$r_0 = |y|^2 \gg \exp(iPx/a) \times \exp(-iPx/a) = 1 \quad (55-1)$$

$$r_- = |y_-|^2 = 2 \sin^2(Px/a) \quad (56-1)$$

$$r_+ = |y_+|^2 = 2 \cos^2(Px/a) \quad (57-1)$$

در رابطه های (56-1) و (57-1) اندیس های  $\pm$  در خصوص زوج و فرد بودن تابع توزیع می باشند. برای الکترون هایی که بردار موج آن ها  $\mathbf{k}$  دور از مرز مناطق بریلوئن هستند، به دلیل ندیدن پتانسیل شبکه (عدم برقراری شرط پراش) پراکنده نمی شوند و مانند الکترون های تقریباً آزاد رفتار می کنند.

برای محاسبه انرژی الکترون در مرز بریلوئن با تقریب اول اختلال (رابطه ی (1-54)) فقط به انرژی پتانسیل این دسته الکترون ها می پردازیم. سرعت گروه امواج

الکترونی در مرز مناطق بریلوئن به دلیل ایستاده بودن آن‌ها صفر می‌باشند و هیچ‌گونه سهمی برای انرژی جنبشی متصور نیستیم. از این‌رو انرژی الکترون برابر با مقدار چشمداشتی پتانسیل با ویژه حالت‌های  $y(\pm)$  در مرز بریلوئن خواهد بود. اختلاف این دو مقدار چشمداشتی به‌ازای دو ویژه حالت  $y(+)$  و  $y(-)$ ، اختلاف انرژی الکترون در این دو حالت را نتیجه می‌دهد.

با توجه به شکل (1-13) پتانسیل شبکه را تقریباً کسینوسی به صورت

$$V(x) = V_0 \cos\left(\frac{2p}{a}x\right) \quad \text{به کار می‌بریم (که در اینجا } V_0 < 0 \text{ می‌باشد).}$$

$$E_+ = \langle y_+ | V(x) | y_+ \rangle = \frac{1}{a} \int_0^a V_0 \cos\left(\frac{2p}{a}x\right) \times 2 \cos^2\left(\frac{px}{a}\right) dx \quad (58-1)$$

$$E_- = \langle y_- | V(x) | y_- \rangle = \frac{1}{a} \int_0^a V_0 \cos\left(\frac{2p}{a}x\right) \times 2 \sin^2\left(\frac{px}{a}\right) dx \quad (59-1)$$

از تفاضل این دو عبارت خواهیم داشت:

$$DE = (E_+ - E_-) = \frac{2V_0}{a} \int_0^a \cos\left(\frac{2p}{a}x\right) \times [\cos^2\left(\frac{px}{a}\right) - \sin^2\left(\frac{px}{a}\right)] dx = V_0 \quad (60-1)$$

منفی بودن  $V_0$  باعث می‌شود که نتیجه  $E_- > E_+$  حاصل گردد. از این‌رو اختلاف انرژی این دو حالت در مرز مناطق بریلوئن باعث پدیدار شدن گاف انرژی با اندازه‌ی  $|V_0|$  می‌گردد. بنابراین حالت پایه<sup>۱</sup> چنین سیستمی با توزیع فضایی  $r_+ = |y_+|^2 = 2 \cos^2\left(\frac{px}{a}\right)$  با انرژی  $E_+$  می‌باشد و الکترون‌ها با این توزیع فضایی تمایل دارند بر روی اتم‌های شبکه متمرکز یابند که دقیقاً مراکز چاه پتانسیل‌ها مطابق شکل (1-13) می‌باشند و با برهم‌کنش الکترواستاتیکی‌شان با یون‌های مثبت شبکه (جمله منفی هامیلتونی)، انرژی سیستم را به حداقل ممکن برسانند. حالت  $y(+)$  را حالت پیوندی و  $y(-)$  را حالت ضد پیوندی گویند.

**نکته 1-19:** با اعمال اثرات پتانسیل شبکه بر روی نوارهای انرژی شبکه خاموش، شکل نوار انرژی آن‌ها از حالت الکترون آزاد تغییر می‌کند و الکترون‌ها در این نوارهای تغییر یافته دیگر یون‌های شبکه را نمی‌بیند و پراکنده نمی‌شوند. این نتیجه ما را به رسانندگی

۱. کمترین انرژی که مجموعه می‌تواند به خود بگیرد.

بی نهایت به ازای هر نوار انرژی در یک بلور فلزی ایده آل خواهد رساند. سوالی که پرسیده خواهد شد پس چه چیز باعث پراکندگی الکترون ها و ایجاد مقاومت الکتریکی در فلزات می باشد؟ عواملی را که باعث کاهش در رسانندگی فلزات می توان اشاره نمود، عبارت هستند از: ناخالصی ها، ناکاملی ها، درفتگی ها ... در شبکه بلوری است که آن ها باعث می شود تا فلزات از حالت ایده آل خارج شوند.

**نکته 1-20:** دما باعث ارتعاشات شبکه ای (یا ایجاد فونون) در بلور<sup>1</sup> می شود. از این رو دما نیز از دیگر عواملی است که باعث افزایش پراکندگی الکترون ها و کاهش در رسانندگی الکتریکی مواد می شود.

در ادامه قصد داریم بحث انرژی الکترون در یک شبکه بلورین با هر پتانسیل شبکه ای متناوبی تعمیم دهیم.

### 1-2-7- برهم کنش الکترون با پتانسیل تناوبی ضعیف (مدل الکترون تقریباً آزاد)

مدل الکترون تقریباً آزاد، برای آن دسته از الکترون هایی است که در معرض یک پتانسیل تناوبی نسبتاً ضعیف قرار گرفته اند. با استفاده از نکات بخش (1-2-5) و رابطه ی (1-40)، با حل معادله شرودینگر برای این دسته الکترون ها با یک پتانسیل شبکه دوره ای (رابطه ی (1-32)) و انتخاب پتانسیل زمینه صفر  $V_{G\phi} = V_0 = 0$  رابطه زیر را خواهیم داشت:

$$\frac{\hbar^2 (\mathbf{k} - \mathbf{G}\phi)^2}{2m} - E_k^0 C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}\phi} + \sum_{\mathbf{r}} \frac{\hbar^2 \mathbf{r}}{G\phi} V_{\mathbf{r}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}\phi} = 0 \quad (61-1)$$

که با تبدیل  $\mathbf{G}\phi = 0$  و  $\mathbf{G}\phi \otimes \mathbf{G}$  به رابطه ساده تر زیر می رسیم:

$$(E_k^0 - E) C_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G}\phi} V_{\mathbf{r}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}\phi} = 0 \quad (62-1)$$

که در اینجا عبارت  $E_k^0$  به صورت  $E_k^0 = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$  تعریف می گردد و  $\mathbf{k}$  بردار موج در

1. با نگاه کوانتومی، با افزایش دما تعداد فونون ها افزایش یافته و احتمال پراکندگی الکترون توسط فونون ها افزایش می یابد.

ناحیه اول منطقه بریلوئن می باشد.

• پتانسیل صفر

با در نظر گرفتن نقطه‌ای ناتبهن<sup>1</sup> از فضای  $k$  (در شرایط پتانسیل شبکه خاموش)، ضرایب پتانسیل در رابطه‌ی (32-1) برابر است صفر  $V_G = 0$  که حاصل آن تابع موج الکترون آزاد می باشد، بنابراین رابطه‌ی (63-1) را به صورت زیر داریم.

$$(E_k^0 - E) C_k^r = 0 \quad \text{و} \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_k^0 C_k^r = 0 \quad (63-1)$$

با توجه به رابطه‌ی (63-1)، به ازای  $C_k^r \neq 0$ ، بایستی ضریب عبارت (63-1) صفر شود که عبارت انرژی الکترون آزاد  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  به دست می آید و از طرفی کلیه ضرایب  $C_k^r - G^r$  به ازای  $G^r \neq 0$  برابر صفر هستند که در نهایت به تابع موج الکترون آزاد خواهیم رسید. (عبارت  $u_k^r(\mathbf{r})$  در تابع موج بلوخ به ازای  $k$  ثابت برابر با مقدار ثابت  $C_k$  است).

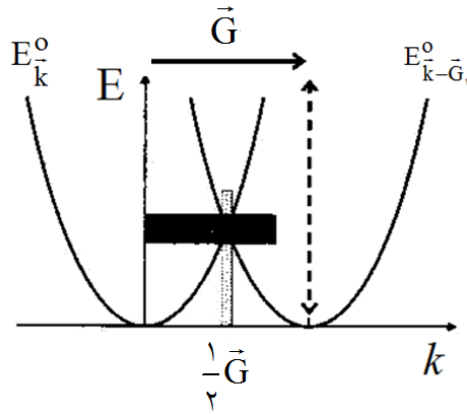
$$\psi \mu e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (64-1)$$

در ادامه رفتار رابطه‌ی (64-1) در نواحی تبهن<sup>2</sup> از فضای  $k$  (نواحی مرز مناطق بریلوئن)، می پردازیم (شکل (14-1)).

در ادامه به نواحی خاصی از مناطق بریلوئن توجه می کنیم که سهم جمله دو اختلال (رابطه‌ی (54-1)) افزایش پیدا می یابد و الکترون در این نواحی از حالت الکترون آزاد خارج می شود. این پدیده زمانی اتفاق می افتد که مخرج کسر  $D = E^0(\mathbf{k}) - E^0(\mathbf{k} \cdot \mathbf{0})$  در رابطه‌ی (54-1) کوچک باشد یعنی در نواحی که نوارها به یکدیگر نزدیک می شوند و یا روی هم افتادگی نواری اتفاق می افتد که در شکل (14-1) با ناحیه هاشور خورده نشان داده شده است.

1. نقاطی که نوارهای انرژی الکترون آزاد (در یک شبکه خاموش) روی هم نمی افتند (دور از مرزهای مناطق بریلوئن که مطابق شکل (10-2)  $D \neq 0$ ).

2. نواحی که در آن مطابق شکل (4-2)  $D = 0$ .



شکل 1-14. نمودار تداخل نوار انرژی الکترون آزاد در مرز مناطق بریلوئن

• نوارهای انرژی تبهگن (نوار الکترون با تبهگنی دوگانه)

با در نظر گرفتن شکل (14-1) و هم پوشانی دو منحنی پاشندگی الکترون آزاد، در فضای  $k$  با منحنی پاشندگی  $E_k^0$  در منطقه اول و  $E_{k-G}^0$  از مناطق همسایه که اختلاف انرژی آنها کمتر از برهم کنش کولنی  $|V|$  می باشند  $(|E_{k-G}^0 - E_k^0| \ll |V|)$  سهم اختلال مرتبه دوم در رابطه (1-54) قابل ملاحظه و در مقابل به ازای  $|V| \gg |E_{k-G}^0 - E_k^0|$  سهم اختلال مرتبه دوم قابل صرف نظر کردن می باشد. در ادامه از مدل الکترون تقریباً آزاد برای مناطقی که سهم مرتبه دوم اختلال آنها مهم می باشد  $|V| \gg |E_{k-G}^0 - E_k^0|$ ، می توان استفاده نمود (ناحیه هاشور خورده در شکل (14-1)). به این معنی که تابع موج الکترون در این مناطق می تواند مطابق شکل (14-1) از برهم نهی دو موج تخت به صورت رابطه (1-65) در نظر گرفت<sup>1</sup>.

$$\psi_k(\mathbf{r}) = C_k^{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + C_{k-G}^{\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} \quad (65-1)$$

با این تابع موج، معادله (1-62) را برای اطراف نقاط تبهگن بازنویسی می کنیم. با توجه به نزدیک شدن دو نوار انرژی  $E_k^0$  و  $E_{k-G}^0$  در مرز بریلوئن رابطه (1-62) را

<sup>1</sup> سهم بقیه ضرایب  $C_{k-G}$  ها به ازای  $G_1 \gg G$  به دلیل  $|V| \gg |E_{k-G}^0 - E_k^0|$  قابل صرف نظر کردن می باشد.

برای این دو نوار به صورت معادله (66-1) برای نوار انرژی  $E_k^r$  و معادله (67-1) برای نوار  $E_{k-G_1}^r$  نوشت (شکل (14-1)).

$$(E - E_k^r) C_k^r = V_{G_1}^r C_{k-G_1}^r + \sum_{G_1, G_2} \hat{a}_{G_1, G_2}^r V_G^r C_{k-G}^r \quad (66-1)$$

$$(E - E_{k-G_1}^r) C_{k-G_1}^r = V_{-G_1}^r C_k^r + \sum_{G_1, G_2} \hat{a}_{G_1, G_2}^r V_G^r C_{k-G}^r \quad (67-1)$$

با توجه به تابع موج الکترون  $y_k(\vec{r})$  (رابطه (65-1))، در رابطه‌های (66-1) و (67-1) ضرایب  $C_k^r$  و  $C_{k-G_1}^r$  که سهم مهمی از بسط (62-1) دارد را جدا می‌کنیم. از طرفی مطابق از شکل (8-1) ب ضرایب  $V_{G_1}^r$  و  $V_{-G_1}^r$  بزرگ‌ترین ضریب بسط جمع پتانسیل می‌باشد و بقیه ضرایب جملات جمع به دلیل کوچک بودن ضرایب که از عبارت‌های (66-1) و (67-1) جدا کرده‌ایم.

$$(E - E_k^r) C_k^r = V_{G_1}^r C_{k-G_1}^r \quad (68-1)$$

$$\sum_{\vec{e}} \frac{\partial}{\partial \vec{e}} (E - E_{k-G_1}^r) \frac{\partial}{\partial \vec{e}} C_{k-G_1}^r = V_{-G_1}^r C_k^r = V_{G_1}^* C_k^r \quad (69-1)$$

از آنجا که انرژی پتانسیل یک کمیت حقیقی است پس خواهیم داشت<sup>۲</sup>  $V_{-G_1}^r = V_{G_1}^*$ . شکل ماتریسی عبارت‌های (68-1) و (69-1) به صورت زیر بانویسی می‌شود.

$$\sum_{\vec{e}} \frac{\partial}{\partial \vec{e}} (E - E_k^r) \frac{\partial}{\partial \vec{e}} C_k^r - \sum_{\vec{e}} \frac{\partial}{\partial \vec{e}} V_{G_1}^* C_{k-G_1}^r = 0 \quad (70-1)$$

۱. امروزه با داشتن رایانه می‌توان جملات بیشتری از توابع موج تخت و ضرایب بسط پتانسیل  $V_G$  در محاسبات به کار برد.

۲. با استفاده از رابطه‌ی (32-1) و تساوی  $V(r) = V^*(r)$  رابطه  $V_{-G_1}^r = V_{G_1}^*$  را می‌توان نتیجه می‌گرفت.

دترمینان ضرایب رابطه‌ی (70-1) بایستی صفر باشد تا پاسخ‌های غیر صفر برای  $C_k^r$  و  $C_{k-G_1}^r$  داشته باشیم.

$$\begin{vmatrix} E - E_k^0 & V_{G_1}^r \\ V_{G_1}^{r*} & E - E_{k-G_1}^0 \end{vmatrix} = 0$$

نتیجه دترمینان بالا انرژی الکترون  $E$  را در نزدیکی‌های مرز منطقه بریلوئن برابر است با:

$$E = \frac{1}{2} \left( E_k^0 + E_{k-G_1}^0 \right) \pm \sqrt{\frac{(E_k^0 - E_{k-G_1}^0)^2}{4} + |V_{G_1}^r|^2} \quad (71-1)$$

طبق معادله (71-1) به دست آمده و تصحیح انرژی، مشاهده می‌شود که با تقریب الکترون تقریباً آزاد، تبهگنی انرژی (ویا رویهم افتادگی نواری) توسط پتانسیل شبکه در مرز منطقه رفع می‌شود (رابطه‌ی (72-1)). که با توجه به شکل (12-1) ب در مرز منطقه بریلوئن  $k = \frac{G_1}{2}$  و رابطه‌ی  $k = -\frac{G_1}{2}$  (ناشی از شرط براگ  $k = k - G_1$ ) و رابطه  $E_k^r = E_{k-G_1}^r = \frac{\hbar^2 G_1^2}{2m} \pm \frac{\hbar^2 G_1^2}{2m}$  برقرار می‌باشد.

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left( E_k^0 + E_{k-G_1}^0 \right) \pm \sqrt{\frac{(E_k^0 - E_{k-G_1}^0)^2}{4} + |V_{G_1}^r|^2} \quad (72-1)$$

$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2 G_1^2}{2m} \pm |V_{G_1}^r|$$

ملاحظه می‌شود درست در مرز منطقه بریلوئن  $k = \frac{G_1}{2}$  یک گاف انرژی با مقدار  $2|V_{G_1}^r|$  به وجود می‌آید که می‌توان این روند را برای بقیه مناطق تبهگن به کاربرد که نتیجه آن در شکل (15-1) نشان داده شده است. با قرار دادن ویژه مقدار به دست آمده (رابطه‌ی (72-1)) در معادله (70-1)، ضرایب توابع

موج در مرز منطقه بریلوئن  $k = \frac{G_1}{2}$  به دست می آید. به ازای  $E_+$  ضریب تابع عبارت است از  $\frac{C_k^r}{C_{k-G_1}^r} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\ddot{\phi}}{\ddot{\phi}_1}$  و به ازای  $E_-$  ضریب تابع عبارت است از  $\frac{C_k^r}{C_{k-G_1}^r} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\ddot{\phi}}{\ddot{\phi}_1}$ . که با توجه به شکل تابع موج (رابطه ی (1-65)) به ازای  $k = \frac{G_1}{2}$  خواهیم داشت:

$$y_+(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{C_{i\frac{G_1}{2}}^r}{C_e} e^{i\frac{G_1}{2} \cdot \mathbf{r}} + e^{i\frac{G_1}{2} \cdot \mathbf{r}} \frac{\ddot{\phi}}{\ddot{\phi}_1} = \sqrt{2} \frac{C_{G_1}^r}{C_e} \frac{\ddot{\phi}}{\ddot{\phi}_1} \cos \frac{\mathbf{r}}{2} \quad (73-1)$$

$$y_-(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{C_{i\frac{G_1}{2}}^r}{C_e} e^{i\frac{G_1}{2} \cdot \mathbf{r}} - e^{i\frac{G_1}{2} \cdot \mathbf{r}} \frac{\ddot{\phi}}{\ddot{\phi}_1} = \sqrt{2} i \frac{C_{G_1}^r}{C_e} \frac{\ddot{\phi}}{\ddot{\phi}_1} \sin \frac{\mathbf{r}}{2} \quad (74-1)$$

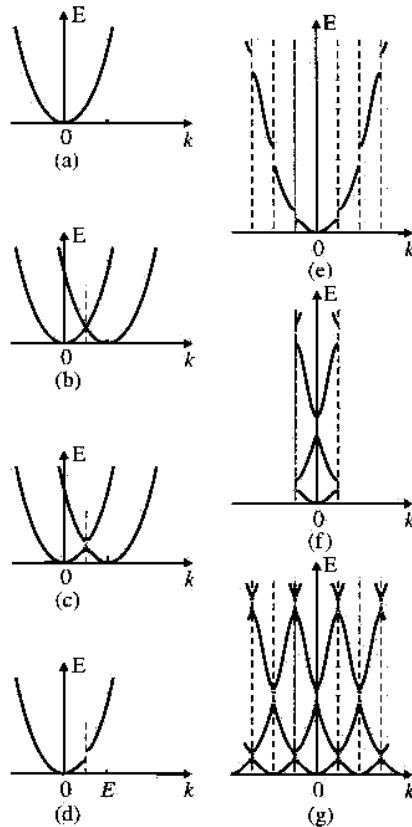
که دقیقاً همان نتایجی که قبلاً در مسئله (1-1) و شکل (1-13) بازگو شد که حاصل دو موج ایستاده خواهد بود.

در شکل (1-15) دیده می شود که الکترون آزاد در خلاء (بدون در نظر گرفتن هرگونه شرط شبکه ای) می تواند طیف پیوسته ای از انرژی ها را به صورت یک سهمی بر حسب  $k$  در اختیار داشته باشد. حال اگر خلاء را به مانند یک شبکه با پتانسیل یونی خاموش در نظر گرفته شود (با شرط شبکه ای)، پاسخ همان انرژی الکترون آزاد سهمی گون می باشد که فقط در مناطق دیگر بریلوئن تکرار می گردد (شکل (1-15) b). با روشن شدن پتانسیل نقاط شبکه، در مرز بریلوئن به علت وجود تبهگنی انرژی  $E_{k-G_1}^r = E_k^r$  در آن مناطق، گاف انرژی به وجود می آید (شکل (1-15) c). با در نظر گرفتن بقیه مناطق به یک نمایش دوره ای منطقه ای در فضای  $k$  خواهیم رسید (شکل (1-15) g).

سؤالی که شاید پرسیده شود این است که آیا این مدل به درستی می تواند دسته بندی مواد و تفاوت های موجود بین فلزات را توصیف نماید. در این روش هیچ گونه صحبتی از ساختار الکترونی اتم های تشکیل دهنده بلور نمی شود. این مدل می تواند توصیف کیفی خوبی برای فلزاتی باشد که الکترون های آخرین تراز انرژی شان از قید کمتری برخوردار است و در مورد الکترون های مقید ظرفیت فلزات این مدل



پاسخ مناسبی ارائه نمی‌دهد.



شکل 15-1. (a) انرژی الکترون آزاد می‌باشد، (b) تکرار یک طیف انرژی الکترون آزاد ناشی از تکرار در فضای  $k$  برای یک شبکه پتانسیل تقریباً خاموش، (c) باز شدگی گاف انرژی در مرز منطقه بریلوئن ناشی از روشن شدن پتانسیل شبکه جایی که دو منحنی انرژی الکترون آزاد همدیگر را قطع می‌کنند. شکل های e, f, g, همگی نوار انرژی را به صورت‌های مختلف نشان می‌دهند که به قرار زیر نامیده می‌شود: (e) یک نوار انرژی در منطقه اول بریلوئن که در مناطق مختلف دیگر بریلوئن گسترده شده است (نمایش منطقه‌ای گسترده) (f) رسم کلیه نوارها در ناحیه اول (نمایش منطقه‌ای تحویل یافته) (g) نمایش کلیه نوارها در کلیه مناطق (به نمایش منطقه‌ای دوره‌ای).

همان‌طور که در ابتدای این فصل به آن اشاره شد، الکترون‌های یک بلور را به سه دسته طبقه‌بندی شدند (مغزی، ظرفیت و رسانش).

**نوار الکترون‌های مغزی** کاملاً اتمی است و الکترون‌های مغزی نقش بسیار کمی در ساختار الکترونی و شیمیایی جامد دارند. به این معنی که پتانسیل شبکه تأثیری در ساختار الکترونی آن‌ها نمی‌گذارد و همچنان در تمام نقاط شبکه معکوس (فضای  $k$ )

دارای مقدار انرژی ثابتی هستند که به مانند یک نوار انرژی با پهنای نسبتاً باریک (به مانند تراز انرژی اتم منزوی) خیلی پایین تر از انرژی فرمی قرار می گیرند.

**نوار الکترون‌های رسانش** گسترده بوده و الکترون‌هایشان قید کمی با یون‌های شبکه دارند. فلزاتی که آخرین تراز انرژی قسمتی پر آن‌ها اربیتال‌های s,p باشند به دلیل هم‌پوشانی گسترده آن‌ها با اربیتال‌های اتم‌های همسایه خود، نوارهای انرژی با پهنای زیادی را ایجاد می‌کنند که در آینده نشان خواهیم داد پهنای نوار انرژی، سهم انرژی جنبشی الکترون (و یا احتمال پرش الکترون از اتمی به اتم‌های همسایه) می‌باشد.

**الکترون‌های ظرفیت**، آن دسته از الکترون‌هایی هستند که نقش مهمی در خصوص ساختار پیوندی و خواص اپتیکی در بلورها را بازی می‌کنند.

مدل الکترون تقریباً آزاد که به مدل امواج تخت نیز معرف می‌باشد، مدلی مناسب برای الکترون‌های رسانش که قید کمتری نسبت به اتم‌های شبکه دارند که در مقابل برای الکترون‌های مغزی این مدل کاربرد مناسبی نخواهد داشت. برای این دسته از الکترون‌ها روش تنگ‌بست می‌تواند روش مناسبی برای توصیف الکترونی آن‌ها باشد که در ادامه به آن خواهیم پرداخت

### 1-3 رویکرد دیگر در ساختار الکترونی جامدات برای الکترون‌های مغزی

تاکنون به دسته الکترون‌هایی که مانند الکترون‌های آزاد قید کمتری نسبت به اتم‌های شبکه دارند و به راحتی می‌توانند از اتمی به اتم‌های همسایه پرش نمایند، پرداخته شد (الکترون‌های رسانش). این دسته از الکترون‌ها دارای انرژی بالاتری نسبت به دیگر الکترون‌ها بلور دارند که انرژی‌شان حول و حوش انرژی فرمی می‌باشند. همانطور که قبلاً اشاره شد با صرف نظر کردن سهم برهم‌کنشی الکترون‌ها با یکدیگر سیستم بس‌ذره‌ای را به  $N$  معادله تک‌الکترونی تبدیل نمودیم. حل دقیق سیستم‌های بس‌ذره‌ای نه تنها به‌طور تحلیلی، بلکه به‌طور عددی نیز امکان‌پذیر نمی‌باشد. بنابراین در این کتاب رویکردهایی را معرفی کرده‌ایم که حذف برهم‌کنشی الکترون‌ها با یکدیگر  $V_{ee} = 0$  به عنوان اصلی‌ترین تقریب آن می‌باشد. با توجه به ظرفیت این کتاب به عنوان یک درس سه واحدی برای دانشجویان کارشناسی، نمی‌توان به کلیه رویکردهای موجود پرداخته شود و فقط به رویکرد تنگ‌بست خواهیم پرداخت.

### 1-3-1 مدل تنگ‌بست<sup>1</sup>

از فیزیک کوانتومی به یاد داریم که اربیتال‌های اتمی، پایه‌های یک فضای کامل  $\langle nml \rangle$  را تشکیل می‌دهند<sup>2</sup>. بنابراین این پایه‌ها در هر نقطه از شبکه بلوری به صورت  $\langle nml, j \rangle$  گسترده شده است که در آن  $m, n$  و  $l$  نشان دهنده عدد کوانتومی اربیتال‌های متعامد اتمی و  $j$  مشخص کننده مکان قرار گیری هر پایه در هر نقطه از شبکه می‌باشد. شکل تابعی این ویژه حالت‌های اتمی به صورت  $\langle r | nml, j \rangle = \psi_{nlm}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$  برای هر جایگاه اتمی  $\mathbf{R}_j$  نمایش داده می‌شود. از این رو هر تابع موج الکترونی شبکه را می‌توان برحسب این دسته پایه‌ها بسط داد که نمونه آن را در روش تنگ‌بست در ادامه به‌کار خواهیم برد.

پایه‌های اربیتالی را به دو دسته تقسیم می‌نماییم: الف) دسته اول از اربیتال‌هایی که به هسته اتم نزدیک‌ترند، (اربیتال‌های مغزی) ب) دسته دوم اربیتال‌هایی که از هسته اتم دورترند، اربیتال‌های غیرمغزی نامیده می‌شوند. جمع تمام پایه‌های اربیتالی به صورت  $\sum_{nml,j} \langle nml, j | \hat{a}_{nml,j} | nml, j \rangle$  برابر با عملگر واحد است که در اینجا  $N$  تعداد کل جایگاه‌های اتمی در شبکه می‌باشد. با توجه به دسته‌بندی انجام شده در بالا می‌توان عملگر تصویر روی فضای دسته پایه‌های اربیتال‌های مغزی در شبکه را با رابطه (1-75) نشان داد.

$$P_C = \sum_C \langle nml, j | \hat{a}_{nml,j} | nml, j \rangle \quad (75-1)$$

در عبارت جمع (رابطه (1-75))،  $C$  نشان‌دهنده کلیه اربیتال‌های که به هسته اتم نزدیک هستند (اربیتال‌های مغزی). مابقی پایه‌های فضایی (اربیتال‌های غیرمغزی) را با عملگر تصویر  $P_C - 1$  مشخص می‌نماییم.

**نکته 1-21** از دیگر دسته پایه‌های متعامد می‌توان به توابع امواج تخت اشاره نمود که برای توصیف الکترون‌های تقریباً آزاد استفاده می‌شود که در بخش (1-2) به آن اشاره شد.

1. Tight binding

2. هماهنگ‌های کروی  $Y_{lm}(q, j)$

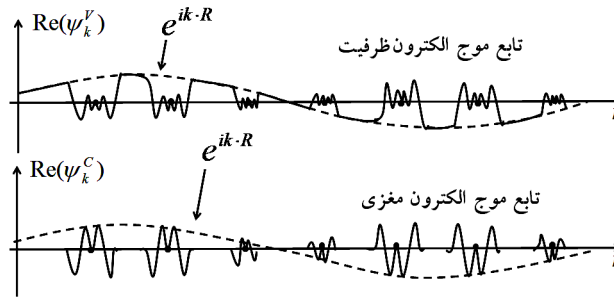
**نکته 1-22:** الکترونی‌هایی که به هسته نزدیک‌ترند (الکترون‌های مغزی)، جایگزیده و هم‌پوشانی کمی با اربیتال‌های اتم‌های همسایه دارند و از انرژی منفی‌تری برخوردارند<sup>1</sup>. در این محدوده‌ی انرژی (پایین‌ترین انرژی) تقریباً تنگ‌بند TB برای به‌دست آوردن توابع موج بلوخ‌شان، مناسب‌تر می‌باشد که در ادامه به آن خواهیم پرداخت. این الکترون‌ها نقش کمی در خواص پیوندی و تراپرد در جامدات بازی می‌کنند.

**نکته 1-23:** دسته‌ی دیگر، الکترون‌هایی هستند که از هسته اتم‌ها دورترند (الکترون‌های ظرفیت و رسانش) و با همسایگان‌شان هم‌پوشانی اربیتالی دارند و تابع موج‌شان در فضا گسترده (غیرجایگزیده) می‌باشند. این دسته از الکترون‌های غیرجایگزیده، پتانسیل هر یون را با توجه به استتار هسته توسط الکترون‌های داخلی‌تر (مغزی) به شدت الکترون‌های مغزی، نمی‌بینند. در نزدیکی یون‌ها تابع موج این دسته از الکترون به دلیل بالا بودن انرژی‌شان سهم انرژی جنبشی بالایی دارند که آن باعث بالا بودن نوسانات در نزدیک‌های هسته اتم‌ها است. احتمال حضور چنین الکترون‌هایی در نزدیکی هسته اتم‌ها کم می‌باشد از این‌رو دامنه نوسانات در ناحیه مغزی بسیار کم می‌باشد (شکل 1-16). به دلیل کشیده شدن تابع موج این دسته از الکترون‌ها به همسایگان، ساختار الکترونی جامدات توسط آن‌ها توصیف می‌شوند.

**نکته 1-24:** انتخاب مناسب پایه‌ها برای هر دسته از الکترون‌ها برای بسط توابع موج الکترون در بلور براساس فیزیک مسئله و سادگی آن در حل مسئله می‌باشد. در بخش (1-2) آن دسته فلزات ساده که الکترون آخرین تراز هر اتم وابستگی کمی با اتم دارد، در نوار رسانش بلور قرار می‌گیرند که تابع موج‌شان دور از هسته بسیار شبیه تابع موج امواج تخت می‌باشد. از این‌رو پایه‌های امواج تخت می‌تواند انتخاب مناسبی برای بسط توابع موج الکترون‌های رسانش باشند.

---

1. برای مثال اتم هیدروژن که پایین‌ترین تراز انرژی آن برابر با  $13/6$  - الکترون ولت می‌باشد.



شکل 1-16. امواج اتمی بردار موج بلوخ برای هر دو دسته الکترون: مغزی  $\text{Re}(\psi_k^C)$  و ظرفیت  $\text{Re}(\psi_k^V)$

در حد انرژی‌های پایین (الکترون‌های مغزی) چه پایه‌های مناسب می‌باشد؟ همانطور که از شکل (1-16) استخراج می‌شود الکترون‌های مغزی شکل اتمی خود را حفظ کرده و تابع موج آن‌ها فقط در ناحیه‌ی مغزی واقع هستند. از این رو، توابع متعامد اتمی  $\psi_{nlm}(r)$  بهترین پایه برای بسط توابع موج این دسته از الکترون‌ها می‌باشند. روش تنگ‌بست TB دقیقاً از این نکته الهام گرفته است. کاربرد این روش برای آن دسته از الکترون‌هایی است که به هسته اتم نزدیک هستند (الکترون‌های مغزی)<sup>2</sup>. زیرا الکترون‌های مغزی اتم‌های بلور با یکدیگر هم‌پوشانی بسیار کمی دارند. از این رو پایه‌های اربیتال‌های اتمی  $\psi_{nlm}(r)$  می‌تواند انتخاب خوبی برای این دسته الکترون‌ها باشند.

روش TB برای طیف گسترده‌ای از جامدات غیر فلزی که دارای پیوند کوالانسی هستند، استفاده می‌شود. در اغلب موارد این مدل نتایج خوب کیفی در اختیار ما قرار می‌دهد. تقریب به‌کار برده شده در روش TB این است که تابع موج الکترون در شبکه براساس جمع اربیتال‌های اتم‌های منزوی که در جایگاه‌های مختلف شبکه قرار داده شده‌اند، می‌باشد. به دلیل هم‌پوشانی بسیار کم اربیتال‌های اتمی الکترون‌های مغزی،

1. که قسمت فضایی آن همان هماهنگ‌های کروی  $Y_{lm}(q, f)$  است.

2. برای به‌کار بردن این روش برای الکترون‌های غیرمغزی بایستی از توابع متعامد دیگری به جای توابع اتمی استفاده نمود که به توابع واینر (Wannier functions) معروف می‌باشند. برای مطالعه‌ی بیشتر در این خصوص می‌توان به کتاب فیزیک حالت جامد (Ashcroft-Mermin) مراجعه نمود.

اثرات این هم‌پوشانی در تغییر شکل اربیتال‌شان ناچیز بوده که آن، جزء فرض این روش می‌باشد. روش TB بسیار نزدیک به روش LCAO<sup>1</sup> است که در شیمی مورد استفاده می‌باشد.

**نکته 1-25:** اگرچه مدل TB بر اساس مدل تک الکترونی بنا گردیده است ولی این قابلیت را دارد که در روند محاسبات پیشرفته‌تر نقش مهمی را بازی نماید.

**نکته 1-26:** در مدل الکترون آزاد، تصور بر آن است که اتم‌ها، بسیار به هم نزدیک بوده و توابع موج الکترونی آن‌ها با اتم‌های همسایه هم‌پوشانی بسیار گسترده‌ای را ایجاد می‌نمایند و الکترون‌ها می‌توانند به راحتی در کل فضا بدون محدودیتی آزادانه حرکت نمایند. در مدل تنگ‌بست، همان‌طور که از نامش پیداست الکترون‌ها محکم به اتم‌هایشان مقید شده و با تقریب اول، هم‌پوشانی اربیتالی بسیار کمی با اتم‌های پیرامون خود دارند. از این رو احتمال حضور الکترون در هر نقطه‌ای از فضا، به سهم توابع موج الکترونی هر اتم  $\phi_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)$  پیرامون آن نقطه از فضا بستگی دارد، که می‌توان آن را با جمع خطی روی این توابع موج الکترونی همسایگان  $\psi_k(\mathbf{r}) = \sum_n C_n \phi_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)$  بیان نمود.

برای توصیف روش TB، ابتدا با یک اتم منزوی شروع می‌کنیم. در یک اتم منزوی، انرژی پتانسیلی که یک الکترون از بار مثبت هسته‌ای با  $Z$  پروتون (بدون احتساب اثرات پوششی<sup>2</sup> الکترون‌های مغزی) می‌بیند برابر با  $V_a(\mathbf{r}) = -ze^2/r$  است. با کنار هم قرار دادن اتم‌ها و ایجاد یک شبکه بلورین و نیز با انتخاب مبدا مختصات، می‌توان موقعیت اتم  $n$ ام  $\mathbf{r}_n$  را توسط بردار انتقال  $\mathbf{T}$  مشخص نمود. در شکل (1-17) ب نمودار انرژی پتانسیل اتم منزوی  $n$ ام  $V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)$  و شکل (1-17) الف نمودار انرژی پتانسیلی که الکترون از شبکه در هر نقطه از فضای  $\mathbf{r}$  دریافت می‌کند که برابر با جمع خطی انرژی پتانسیل اتم‌های منزوی است (رابطه‌ی (1-76)).

$$V(\mathbf{r}) = \sum_n V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \quad (76-1)$$

1. Linear combination of atomic orbitals

2. Screening

همانطور که در نکته (1-26) به آن اشاره شد، تقریب به کار رفته در روش TB، معرفی تابع موج الکترون به صورت جمع خطی اربیتال‌های اتمی شبکه بلوری پیرامون هر نقطه از فضا می‌باشد. ولی جمع مورد نظر بایستی شرط بلوخ را نیز برآورده نماید<sup>1</sup> از این رو، با ضرب یک عبارت فازی به صورت  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n}$  به هر اربیتال اتمی منزوی (رابطه 1-77) می‌توان نشان داد شرط بلوخ برآورده خواهد شد. در رابطه‌ی (1-77)  $\varphi_a(\mathbf{r})$  اربیتال اتم منزوی (ویژه تابع اتمی) می‌باشد که در ادامه برای سادگی، اتم‌ها را تک اربیتالی در نظر می‌گیریم.

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_n \mathbf{a} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n} \varphi_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \quad (77-1)$$

**نکته 1-27:** در رابطه‌ی (1-77) جمع بر روی کلیه اتم‌های شبکه است ولی با توجه به سریع شدن دنباله توابع موج اتمی الکترون‌های مغزی در هر اتم منزوی، تابع موج الکترون در بلور  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  به ازای هر نقطه از فضا فقط با جمع روی توابع موج الکترون اتمی پیرامون آن نقطه (نزدیک‌ترین اتم‌ها) معادل خواهد بود.

**نکته 1-28:** اگر چند اربیتال به هر اتم نسبت داده شود عبارات جمع دیگری در رابطه‌ی (1-77) روی اربیتال‌های اتمی اضافه خواهند شد (جمع روی  $s, p, d, f, \dots$ ) که آن فقط مسئله را کمی پیچیده‌تر خواهد نمود که بایستی هم‌پوشانی هر اربیتال از هر اتم را با اربیتال‌های اتم‌های دیگر نیز در نظر گرفته شود (شکل (1-18)).

در ادامه قصد داریم هامیلتونی مجموعه را با استفاده از تقریب‌های اساسی<sup>2</sup>، تا حد قابل قبولی ساده نموده و با استفاده از ویژه توابع بلوخ گونه تعریف شده در رابطه‌ی (1-77)، نوارهای انرژی مجموعه را به دست آوریم.

هامیلتونی کلی یک بلور، عبارت هستند از: انرژی جنبشی الکترون‌ها  $T_e$  و یون‌ها  $T_p$ ، انرژی پتانسیل بین یون‌ها  $V_{pp}$ ، انرژی پتانسیل بین الکترون‌ها  $V_{ee}$ ، انرژی پتانسیل بین الکترون‌ها و یون‌های شبکه  $V_{ep}$  (که در ادامه  $V_{ep}$  را پتانسیل شبکه نامیده‌ایم).

1. شرط تابع موج الکترون در بلور  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ، که در این جا  $\mathbf{T} = \mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m$  است.  
 2. تقریب اوپنهایمر و تقریب الکترون‌های بدون برهم‌کنش.

$$H = T_p + T_e + V_{ep}(\vec{r}) + V_{ee}(\vec{r}) + V_{pp}(\vec{r}) \quad (88-1)$$

**تقریب‌ها:** به دلیل سنگینی جرم پروتون نسبت به جرم الکترون (تقریباً 2000 برابر)، می‌توان یون‌ها را در شبکه ثابت فرض نمود (تقریب اوپنهایمر یا آدیاباتیک). این تقریب در دمای صفر کلوین، دور از انتظار نیست و حذف انرژی جنبشی یون‌ها در مقابل انرژی جنبشی الکترون تأثیر قابل ملاحظه‌ای در ساختار الکترونی در بلور نخواهد گذاشت. انرژی پتانسیل برهم‌کنش یون‌ها  $V_{pp}$  با فرض غیر متحرک بودن یون‌ها، مقدار ثابتی را به هامیلتونی تحمیل می‌کند که همانطور که می‌دانیم با اضافه یا کم کردن یک مقدار ثابت به هامیلتونی در فیزیک مسئله تأثیری نخواهد داشت که با انتخاب یک سطح پتانسیل مناسب می‌توان این مقدار را برابر صفر در نظر گرفت. از جمله‌ی پتانسیل برهم‌کنش بین الکترون‌ها  $V_{ee}$ ، نیز با تقریب اول صرف‌نظر می‌کنیم<sup>1</sup>.

**نکته 1-29:** پتانسیل برهم‌کنشی مابین الکترون‌ها  $V_{ee}$ ، از اساسی‌ترین قسمت‌های یک سیستم بس ذره‌ای است که وجودش حل دقیق مسئله را برای ما غیر ممکن ساخته است. در این عبارت، مباحثی همچون پتانسیل تبادل - همبستگی و پتانسیل هارتری  $V_h$  از آن استخراج می‌شود که در این سطح از کتاب مجاللی به پرداختن آن‌ها نیست.

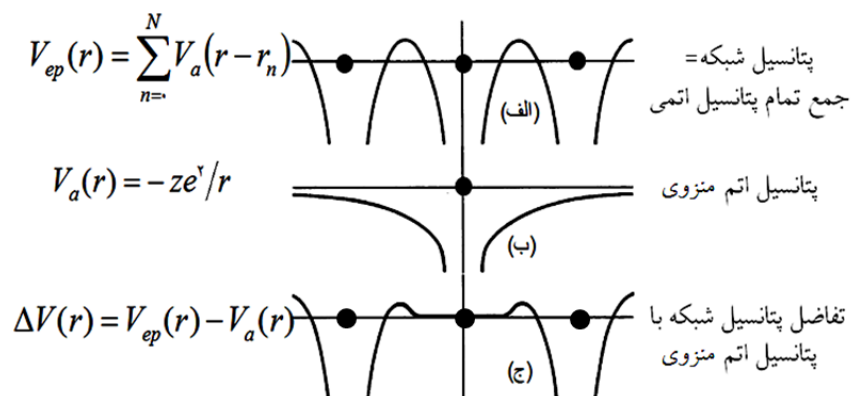
بنابراین هامیلتونی یک شبکه بلورین با تقریب‌های گفته شده در بالا به هامیلتونی زیر تبدیل خواهد شد:

$$H = T_e + V_{ep}(\vec{r}) \quad (79-1)$$

---

1. با حذف این جمله هامیلتونی بس ذره‌ای ما به  $N$  هامیلتونی تک ذره‌ای قابل حل تبدیل خواهد شد.





شکل 17-1. الف) یک زنجیره اتمی با پتانسیل شبکه (جمع پتانسیل یونی اتم‌های منزوی در شبکه) ب) پتانسیل اتم منزوی ج) تفاضل پتانسیل شبکه با پتانسیل اتم منزوی.

فرض مسئله در روش تنگ‌بست این است که اطلاعات اتمی مربوط به اتم‌های تشکیل دهنده شبکه بطور مجزا را به خوبی می‌دانیم. با دانستن ویژه حالت‌ها و ویژه مقادیر اتم‌های منزوی  $H_a \phi_a(\vec{r}) = E_a \phi_a(\vec{r})$  و حضور این ویژه حالت‌ها در تابع موج الکترون تعریف شده در روش تنگ‌بست  $\psi_k(\vec{r})$  (رابطه‌ی (1-77))، سعی شده است که هامیلتونی واقعی سیستم را برحسب ویژه مقادیرهای اتم‌های منزوی بازنویسی نماییم. برای این کار به هامیلتونی یک شبکه بلوری (رابطه‌ی (1-79))، پتانسیل اتم منزوی  $V_a(\vec{r})$  را اضافه و کم می‌نماییم.

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{p^2}{2m} + V_a(\vec{r}) + [V_{ep}(\vec{r}) - V_a(\vec{r})] \\
 H &= H_a + [V_{ep}(\vec{r}) - V_a(\vec{r})] \\
 H &= H_a + \Delta V
 \end{aligned}
 \tag{80-1}$$

که در رابطه بالا  $V_{ep}(\vec{r})$  پتانسیل ما بین الکترون و شبکه که برابر با جمع تمامی پتانسیل اتمی در بلور  $V_{ep}(\vec{r}) = \sum_n V_a(\vec{r} - \vec{r}_n)$  است (شکل (17-1) الف).  $\Delta V$  تفاضل پتانسیل شبکه با پتانسیل اتم منزوی می‌باشد (شکل (17-1) ج).

در عبارت (80-1)  $H_a$  عملگر هامیلتونی اتم منزوی است که به صورت  $H_a = \frac{p^2}{2m} + V_a(\mathbf{r})$  می‌باشد. اگر  $H_a$  بر ویژه حالت اتم منزوی  $\phi_a(\mathbf{r})$  عمل نماید ویژه مقدار اتمی  $E_a$  را نتیجه خواهد داد (رابطه (81-1)). در این جا دانستن دقیق این ویژه مقادیر و ویژه توابع از مفروضات مسئله می‌باشد.

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} + V_a(\mathbf{r}) \phi_a(\mathbf{r}) = E_a \phi_a(\mathbf{r})$$

$$H_a \phi_a(\mathbf{r}) = E_a \phi_a(\mathbf{r}) \quad (81-1)$$

در اینجا  $H_a$ ،  $E_a$ ،  $\phi_a(\mathbf{r})$  و  $V_a(\mathbf{r})$  همگی مربوط به یک اتم منزوی می‌باشند. با در نظر گرفتن هامیلتونی (80-1) به صورت  $H = H_a + \Delta V$  و تابع موج الکترون تعریف شده (رابطه (77-1))، می‌توان انرژی الکترون را به‌ازای هر مقدار از  $k$  از منطقه اول بریلوئن به‌دست آورد.

$$H \psi_k(\mathbf{r}) = E(k) \psi_k(\mathbf{r}) \quad (82-1)$$

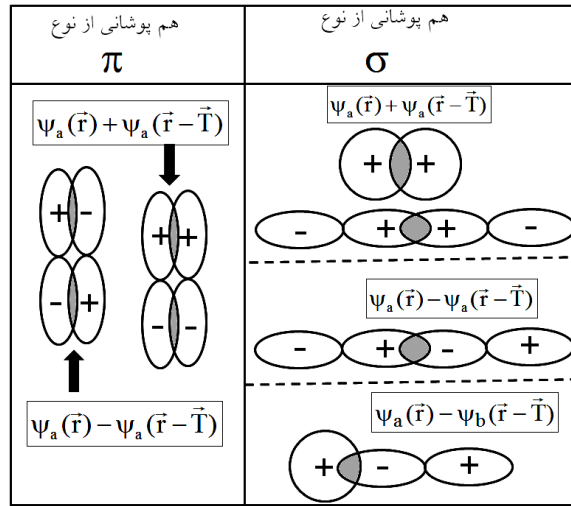
رابطه (82-1) معادله شرودینگر یک شبکه بلورین با تابع موج  $\psi_k(\mathbf{r})$  می‌باشد:

$$H \hat{a}_{\mathbf{T}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}} \phi_a(\mathbf{r} - \mathbf{T}) = E(k) \hat{a}_{\mathbf{T}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}} \phi_a(\mathbf{r} - \mathbf{T})$$

$$H_a \hat{a}_{\mathbf{T}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}} \phi_a(\mathbf{r} - \mathbf{T}) + [V(\mathbf{r}) - V_a(\mathbf{r})] \hat{a}_{\mathbf{T}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}} \phi_a(\mathbf{r} - \mathbf{T})$$

$$= E(k) \hat{a}_{\mathbf{T}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}} \phi_a(\mathbf{r} - \mathbf{T}) \quad (83-1)$$

بردار مکان هر اتم  $\mathbf{r}_n$  را در رابطه (83-1) می‌توان معادل با بردار انتقال شبکه  $\mathbf{T}$  دانست. با ضرب طرفین رابطه (83-1) در  $\hat{a}_a^*(\mathbf{r})$  و انتگرال گرفتن طرفین روی کل فضای  $\mathbf{r}$  به رابطه (84-1) می‌رسیم.



شکل 1-18. سهم هم پوشانی دو اتم همسایه که با بردار انتقال  $\vec{T}$  از یکدیگر فاصله دارند به صورت هاشور خورده در آن نمایش داده شده است. هم پوشانی می تواند از نوع s و p باشد. رابطه  $\psi_a(\vec{r}) \pm \psi_a(\vec{r} - \vec{T})$ ، علامت + هم پوشانی از نوع پیوندی و علامت منفی هم پوشانی از نوع ضدپیوندی را نشان می دهد و اندیس a و b مربوط به اربیتال های اتمی که در شکل فقط از اربیتال های s و p استفاده شده است.

$$\begin{aligned} & \int d^3r \phi_a^*(\vec{r}) H_a \hat{a}_T e^{i\vec{k} \cdot \vec{T}} \phi_a(\vec{r} - \vec{T}) \\ & + \int d^3r \phi_a^*(\vec{r}) [V(\vec{r}) - V_a(\vec{r})] \hat{a}_T e^{i\vec{k} \cdot \vec{T}} \phi_a(\vec{r} - \vec{T}) \quad (84-1) \\ & = \int d^3r \phi_a^*(\vec{r}) E(k) \hat{a}_T e^{i\vec{k} \cdot \vec{T}} \phi_a(\vec{r} - \vec{T}) \end{aligned}$$

عبارت (84-1) از سه انتگرال تشکیل شده است که بایستی سهم هر کدام را محاسبه نمود.

عبارت  $H_a \phi_a(\vec{r} - \vec{T}) = E_a \phi_a(\vec{r} - \vec{T})$  برای هر اتم منزوی در مکانی که با بردار انتقال  $\vec{T}$  مشخص می گردد، برقرار می باشد. کلیه توابع موج  $(\phi_a(\vec{r}), j_a(\vec{r} + \vec{T}))$  بهنجار می باشند که عبارت اول از رابطه (84-1) در هر نقطه از شبکه، رابطه (85-1) نتیجه می شود.

$$\begin{aligned} \int d^3r \varphi_a^*(\mathbf{r}) H_a \int d^3r' \varphi_a(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} &= E_a \int d^3r \varphi_a^*(\mathbf{r}) \varphi_a(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\ &= E_a + \int d^3r \varphi_a^*(\mathbf{r}) \varphi_a(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (85-1)$$

در رابطه‌ی (85-1)، عبارت هم‌پوشانی ما بین دو اتم که توسط بردار شبکه  $\mathbf{T}$  از یکدیگر فاصله دارند، توسط عبارت انتگرال هم‌پوشانی  $S$  به صورت زیر معرفی شده است.

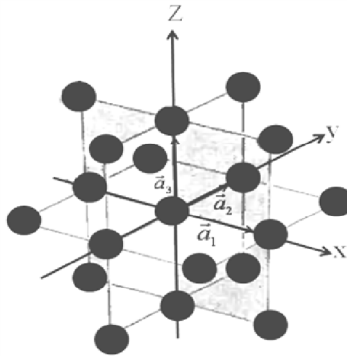
$$S = \int d^3r \varphi_a^*(\mathbf{r}) \varphi_a(\mathbf{r} - \mathbf{T}) \quad (86-1)$$

همان‌طور که در بالا به آن اشاره شد، سهم این هم‌پوشانی‌ها برای الکترون‌های مغزی بسیار ناچیز و قابل صرف‌نظر کردن می‌باشند  $S \gg 0$ . شکل (18-1) نمایش هم‌پوشانی اربیتال دو اتم همسایه که با بردار انتقال  $\mathbf{T}$  از یکدیگر جدا شده است. با در نظر گرفتن عبارت‌های (84-1) و (85-1) تا همسایگان مرتبه اول می‌توان نوار انرژی مجموعه را بر حسب برخی از کمیت‌های که در ادامه آن‌ها را معرفی خواهیم کرد، استخراج می‌نماییم

برای فهم مطالب بالا به یک مثال ساده می‌پردازیم. یک شبکه با پارامترهای شبکه  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  به صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$\mathbf{a}_1 = a \hat{e}_1 \quad \mathbf{a}_2 = b \hat{e}_2 \quad \mathbf{a}_3 = c \hat{e}_3$$

$\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3$  بردارهای یکه در جهت بردارهای شبکه  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  می‌باشند.



شکل 1-19. یک شبکه مکعبی ساده

برای محاسبه دومین انتگرال از رابطه (85-1) برای یک شبکه مکعبی، به ازای  $\hat{T}=0$  و اولین همسایگان که عبارت هستند از  $\hat{T}=\pm a\hat{i}\pm b\hat{j}\pm c\hat{k}$  و نیز فرض یکسان بودن تابع موج اتمی در هر نقطه شبکه  $\varphi_a(\hat{r}) = \varphi_a(\hat{r} + \hat{a}_1) = \varphi_a(\hat{r} - \hat{a}_1)$  (برای مثال اربیتال s)، عبارت‌های زیر را خواهیم داشت.  
 $\hat{u}$  به ازای  $\hat{T}=0$ :

$$\hat{T}=0 \Rightarrow \int \hat{u}^3 \varphi_a^*(\hat{r}) [V(\hat{r}) - V_a(\hat{r})] \varphi_a(\hat{r}) dV = \langle DV \rangle \quad (87-1)$$

که  $\langle DV \rangle$  مقدار چشمداشتی عبارت  $DV = V(\hat{r}) - V_a(\hat{r})$  بر حسب ویژه حالت اتمی است، که مقداری مشخص و ثابت است.

$\hat{u}$  به ازای 6 همسایه اول که عبارت هستند از:  $\hat{T}=\pm a\hat{i}$ ،  $\hat{T}=\pm b\hat{j}$  و  $\hat{T}=\pm c\hat{k}$  و با در نظر گرفتن هر بردار اندازه حرکت  $\hat{k}$  از منطقه اول بریلوئن:

$$\begin{aligned} & (e^{ik_x a} + e^{-ik_x a}) \int \hat{u}^3 \varphi_a^*(\hat{r}) DV \varphi_a(\hat{r} + \hat{a}_1) + \\ & (e^{ik_y b} + e^{-ik_y b}) \int \hat{u}^3 \varphi_a^*(\hat{r}) DV \varphi_a(\hat{r} + \hat{a}_2) + \\ & (e^{ik_z c} + e^{-ik_z c}) \int \hat{u}^3 \varphi_a^*(\hat{r}) DV \varphi_a(\hat{r} + \hat{a}_3) = \\ & (e^{ik_x a} + e^{-ik_x a}) g_x + (e^{ik_y b} + e^{-ik_y b}) g_y + (e^{ik_z c} + e^{-ik_z c}) g_z \end{aligned} \quad (88-1)$$

در رابطه‌ی (88-1) پارامترهای  $g_x$ ،  $g_y$ ،  $g_z$ ، به صورت رابطه‌ی (89-1) تعریف شده است.

$$\begin{aligned} g_x &= \int \hat{u}^3 \varphi_a^*(\hat{r}) DV \varphi_a(\hat{r} + \hat{a}_1) \\ &= \int \hat{u}^3 \varphi_a^*(\hat{r}) DV \varphi_a(\hat{r} - \hat{a}_1) \\ g_y &= \int \hat{u}^3 \varphi_a^*(\hat{r}) DV \varphi_a(\hat{r} + \hat{a}_2) \\ &= \int \hat{u}^3 \varphi_a^*(\hat{r}) DV \varphi_a(\hat{r} - \hat{a}_2) \\ g_z &= \int \hat{u}^3 \varphi_a^*(\hat{r}) DV \varphi_a(\hat{r} + \hat{a}_3) \\ &= \int \hat{u}^3 \varphi_a^*(\hat{r}) DV \varphi_a(\hat{r} - \hat{a}_3) \end{aligned} \quad (89-1)$$

در روابط (89-1) با توجه به تقارن‌های موجود در شبکه مکعبی ساده تعداد انتگرال‌های هم‌پوشانی تعدیل می‌یابند. پارامترهای تعریف شده  $g_x, g_y, g_z$ ، را انتگرال انتقال<sup>1</sup> (یا پرش) می‌نامند. این پارامترها مشخصه‌ای است که اندازه آن‌ها نشان دهنده قدرت و یا احتمال پرش الکترون از اتمی به اتم‌های همسایگان می‌باشند.

**نکته 1-30:** هر چند انتگرال هم‌پوشانی‌ها (رابطه‌ی (86-1)) برای کلیه همسایگان ناچیز و قابل صرف‌نظر کرن می‌باشند ولی انتگرال‌های پرش به واسطه وجود عبارت  $\Delta V = [V(\vec{r}) - V_a(\vec{r})]$  در داخل انتگرال (رابطه (89-1)) مقدار انتگرال را قابل ملاحظه می‌نماید که نمی‌توان از آن صرف‌نظر نمود.

با در نظر گرفتن همسایگان اول عبارت (88-1) و رابطه‌های (89-1)، مقادیر انرژی چنین سیستم را می‌توان تابعی از مؤلفه‌های بردار موج  $k_x, k_y, k_z$  به صورت رابطه (90-1) نوشت.

$$E(k) = E_a + \langle DV \rangle + 2g_x \cos(k_x a) + 2g_y \cos(k_y b) + 2g_z \cos(k_z c) \quad (90-1)$$

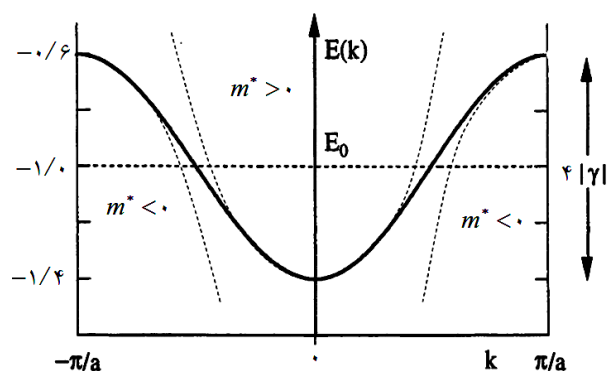
**نکته 1-31:** مسئله سه بعدی بالا را می‌توان به یک زنجیره اتمی تک بعدی در جهت محور x تبدیل نمود. با این نگاه که پارامترهای شبکه (b و c) در دو راستا y و z را می‌توان بسیار بزرگ تصور نمود. این عمل باعث می‌شود که سهم هم‌پوشانی و انتگرال‌های پرش ( $g_y$  و  $g_z$ ) در آن دو راستا بسیار ناچیز و قابل صرف‌نظر کردن باشند. در شکل (20-1) عبارت انرژی در فضای k (یا رابطه پاشندگی انرژی  $E(k)$ ) برای یک زنجیره تک اتمی به ازای  $E_0 = (E_a + DV) = -1 \text{ eV}$  و  $\gamma = -0.2 \text{ eV}$  در منطقه اول بریلوین  $[-\pi/a, \pi/a]$  ترسیم شده است. با توجه به شکل (20-1)، عبارت  $w = 4|\gamma|$  نشان دهنده پهنای نوار انرژی است و  $E_0$  انرژی مربوط به هر مکان اتمی<sup>2</sup> در شبکه می‌باشد.

$$E(k) \approx E_0 + 2\gamma \cos(ka) \quad (91-1)$$

**سوال:** چرا انتگرال‌های انتقال  $g_x, g_y, g_z$ ، بایستی مقادیرشان منفی داشته باشند؟

1. Transfer integrals (Hopping).

2. On-site energy



شکل 1-20. ترسیم رابطه پاشندگی (91-1) به دست آمده از روش تنگ‌بست به‌زای  $E_0 = -1 \text{ eV}$  و  $\gamma = -0.2 \text{ eV}$ .

**نکته 1-32:** همان‌طور که در بالا به آن اشاره شد هر چه فاصله اتمی افزایش یابد، انتگرال انتقال (رابطه (91-1)) کاهش می‌یابد که به معنی کاهش پهنای نوار انرژی می‌باشد. کاهش انتگرال انتقال، کاهش انرژی جنبشی انتقالی و سنگینی جرم مؤثر حاملین بار را نیز نتیجه می‌دهد. در ادامه رابطه‌ی جرم مؤثر نسبت به پارامتر انتگرال انتقال (که نسبت به هم نسبت عکس دارند) را نشان خواهیم داد.

نوار انرژی استخراج شده از رابطه‌ی (85-1) برای هر نوع ساختار را می‌توان به صورت رابطه‌ی (92-1) خلاصه نمود که به آن رویکرد تنگ‌بست گفته می‌شود. عبارت جمع اول مربوط به مجموعه همسایگان اول  $T_1$  با انتگرال انتقال  $g_1$  (یا احتمال پرش) و عبارت جمع دوم مربوط به مجموعه همسایگان دوم  $T_2$  با انتگرال انتقال  $g_2$  و ... به این صورت برای همسایگان بالاتر ادامه پیدا می‌کند. همان‌طور که قبلاً با آن اشاره شد مرتبه‌های بالاتر به دلیل کوچک بودن احتمال پرش قابل صرف‌نظر کردن می‌باشند.

$$E(\mathbf{k}) = E_0 + g_1 \hat{\mathbf{a}}_{T_1} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{T_1}} + g_2 \hat{\mathbf{a}}_{T_2} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{T_2}} + \mathbf{L} \quad (92-1)$$

$$g_i = \int \phi_a^*(\mathbf{r}) \phi_a(\mathbf{r} + \mathbf{T}_i) dV$$

#### • جرم مؤثر حاملین بار

از نکته نظر رفتار موجی الکترون، سرعت گروه یک بسته موج الکترونی (یا سرعت ذره‌ای الکترون) برابر است با گرادیان تابع پاشندگی  $w(\mathbf{k})$  آن که با در دست داشتن

نوار انرژی یک بلور  $E(\mathbf{k})$  و هم‌ارزی آن با رابطه پاشندگی به صورت  $\mathbf{w}(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k})/\hbar$ ، سرعت الکترون از رابطه (93-1) نتیجه می‌شود

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \quad (93-1)$$

با اعمال یک میدان الکترومغناطیسی خارجی به بلور، نیروی  $\mathbf{f}_{\text{ext}}$  به هر الکترون در نوار انرژی، اعمال می‌گردد که باعث دینامیک آن می‌شود.

$$dE = \mathbf{f}_{\text{ext}} \times \mathbf{v} dt \quad (94-1)$$

به‌ازای تغییرات زمانی  $dt$  و تغییرات انرژی  $dE = \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \times d\mathbf{k}$  می‌توان به رابطه (95-1) رسید.

$$dE = \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \times d\mathbf{k} = \mathbf{f}_{\text{ext}} \times \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) dt \quad (95-1)$$

$$dE = \mathbf{f}_{\text{ext}} \times \mathbf{v} dt \quad \Rightarrow \quad \mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$$

برای به‌دست آوردن جرم مؤثر الکترون، با استفاده از قانون دوم نیوتون  $\mathbf{f}_{\text{ext}} = m^* \frac{d\mathbf{v}}{dt}$  و رابطه‌ی سرعت که از عبارت انرژی  $E(\mathbf{k})$  مشتق گرفته می‌شود (رابطه‌ی (95-1))، می‌توان رابطه‌های زیر را نوشت. برای سادگی فضا را یک بعدی در نظر می‌گیریم.

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{1}{\hbar} \frac{dE(\mathbf{k})}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E(\mathbf{k})}{dk^2} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E(\mathbf{k})}{dk^2} \frac{d(\hbar k)}{dt} \quad (96-1)$$

$$\mathbf{f}_{\text{ext}} = m^* \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{d(\hbar k)}{dt}$$

که با استفاده از رابطه‌های بالا، جرم مؤثر الکترون به صورت زیر نتیجه می‌شود.

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2 E(\mathbf{k})/dk^2} \quad (97-1)$$

در شرایط دینامیکی، ناشی از یک میدان خارجی، انرژی الکترون در هر نوار انرژی به واسطه تغییرات  $k$  الکترون تغییر می‌یابد. از این‌رو، با وجود ثابت و مثبت بودن



جرم الکترون در خلاء، در بلور نه تنها جرم مؤثر الکترون ثابت نمی‌باشد، بلکه می‌تواند علامت‌های متفاوتی نیز به خود بگیرد. بنابراین جرم الکترون در مواد (متغیر در علامت و مقدار) با جرم الکترون آزاد (مثبت و ثابت) یکسان نمی‌باشد.

**نکته 1-33:** در مرز مناطق بریلوئن مشتق اول و مشتق دوم انرژی به ترتیب برابر صفر و غیر صفر می‌باشند که به معنی صفر بودن سرعت الکترون و متناهی بودن جرم مؤثر الکترون در مرز مناطق خواهد بود. از طرفی شاید این تصور ایجاد شود که الکترون‌های در مرز مناطق ساکن هستند، ولی این درست نمی‌باشد، زیرا از نگاه ذره‌ای می‌توان گفت احتمال حرکت این دسته الکترون‌ها در مرز مناطق در جهت‌های مثبت و منفی برابر هستند و از نقطه نظر موجی، الکترونی که بردار موج آن به مناطق بریلوئن برسد شرط پراش را ارضاء می‌کند و پراکنده می‌شود که با تداخل این دو موج، امواج ایستاده پدید می‌آورد که دارای سرعت گروه صفر می‌باشد (بخش (1-2-7)).

با توجه به شکل (1-20) می‌توان نمودار پاشندگی انرژی را به ازای  $k$ ‌های نزدیک به صفر (نقطه‌ی  $G$ ) و یا  $k$ ‌های نزدیک به مرزهای مناطق بریلوئن را سهمی‌گون<sup>1</sup> در نظر گرفت (منوط به اینکه مشتق در آن نقاط تعریف شده باشد) که با استفاده از نمودار سهمی‌گون به دست آمده، جرم مؤثر الکترون محاسبه می‌شود.

**مسئله:** جرم مؤثر الکترون در یک زنجیره تک اتمی و تک اربیتالی به‌ازای نقطه‌ی  $k \ll 0$  در فضای اندازه حرکت را به دست آورید.

با استفاده از عبارت پاشندگی (رابطه‌ی (1-91)) و با در نظر گرفتن نکته (1-31)، نوار انرژی (عبارت پاشندگی انرژی) به صورت  $E(k) \approx E_0 + 2g \cos(kx)$  تبدیل خواهد شد که با بسط آن به‌ازای  $k \ll 0$  کوچک  $k \ll 0$  رابطه‌ی (1-98) را خواهیم داشت.

$$k \ll 0 \quad E(k) \approx E_0 + 2g \left[ 1 - \frac{(ka)^2}{2} \right] = E_0 + 2g - ga^2 k^2 \quad (98-1)$$

با توجه به منفی بودن عبارت انتگرال انتقال (پرش)  $g = -|g|$  و مقایسه‌ی ضریب قسمت توان دوم  $k^2$  از رابطه‌ی (1-98) با تابع پاشندگی انرژی الکترون آزاد  $E = (\hbar^2/2m^*) \times k^2$ ، جرم مؤثر الکترون  $m^*$  را می‌توان نتیجه گرفت (رابطه‌ی (1-99)).

1. رابطه پاشندگی الکترون آزاد.

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2|g|a^2} \quad (99-1)$$

بنابراین همان‌طور که قبلاً به آن اشاره شد با توجه به رابطه (99-1) با افزایش اندازه انتگرال انتقال  $|g|$  (یا پرش) جرم مؤثر الکترون کاهش می‌یابد.

بطور خلاصه، دو رویکرد در این فصل برای توصیف دو دسته الکترون اشاره شده: رویکرد الکترون تقریباً آزاد، برای آن دسته از الکترون‌های که قید کمتری با یون‌های شبکه دارند (الکترون‌های رسانش) و رویکرد تنگ‌بست برای آن دسته از الکترون‌های که قید بیشتری با اتم‌های خود دارند (الکترون‌های مغزی)، پرداخته شد. **نکته 1-34:** روش تنگ‌بست را نیز می‌توان برای توصیف الکترون‌های ظرفیت نیز مورد استفاده قرار داد با این ملاحظات که بتوان توابع جایگزیده دیگری را به جای توابع جایگزیده اتمی به کار برد که مفروضات مدل تنگ‌بست را نداشته باشد. یکی از این توابع می‌تواند همان توابع وانیر حداکثر جایگزیده باشد.

**نکته 1-35:** امروزه روش‌ها و رویکردهای متنوعی برای توصیف درست ساختار الکترونی جامدات ارایه شده است که در این کتاب مجالی برای معرفی کامل آن‌ها نمی‌باشد و فقط در حد آشنایی با نام آن‌ها اکتفا کرده‌ایم که عبارت هستند: روش سلول ویگنر-سایتز<sup>1</sup>، روش موج تخت به‌ساخته<sup>2</sup> (APW) و روش تابع گرین<sup>3</sup> (KKR)، روش امواج تخت متعامد (OPW)<sup>4</sup>، روش شبه پتانسیل، نظریه تابعی چگالی<sup>5</sup> (DFT) و غیره.

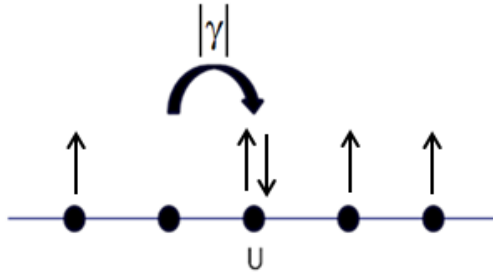
#### 4-1-1 سطح فرمی

اگر بخواهیم به‌طور ساده تعریفی ارایه دهیم که فلزات را از غیرفلزات متمایز نماید، می‌توان به تقابل بین تمایل پرش هر الکترون روی هر اتم شبکه و عدم تمایل به واسطه

---

1. Wigner-Seitz  
 2. Augmented Plane-Wave  
 3. Korringa-Kohn-Rostoker  
 4. Orthogonalized Plane Waves Methods  
 5. Density Functional Theory

برهم کنش کولنی ایجاد شده ناشی از پرش نام برد<sup>1</sup>. از نگاه رویکرد تنگ‌بست، هم‌پوشانی اربیتال‌های اتمی هر اتم با همسایگانش، احتمال پرش (یا تمایل پرش) الکترون از اتمی به اتم‌های همسایگانش را نشان می‌دهد (که اندازه‌ی این احتمال با  $|g|$  که توسط رابطه‌ی (1-89) مشخص می‌شود). در مقابل در اثر این پرش یک پتانسیل دافعه‌ی  $U$  پدیدار می‌شود که ناشی از برهمکنش کولنی الکترون‌های مهمان (از طرف همسایگان) با الکترون‌های میزبان بر روی هر اتم می‌باشد. تقابل این دو کمیت  $U$ ،  $|g|$  نوع ماده از نظر ساختار الکترونی (رسانا یا نارسانا) مشخص می‌کند. در شرایط حدی به‌ازای  $|g| \gg U$  و  $|g| \ll U$  به ترتیب مجموعه نارسانا و رسانا می‌باشند. شکل (1-21)). در حالت بینابینی  $|g| \approx U$  سیستم در حالت گذار رسانا به عایق می‌باشد.



شکل 1-21. توصیف رسانا و نارسانا بودن مواد براساس تقابل  $|g|$  و  $U$ .

با توجه به جدول تناوبی و دسته‌بندی مواد، گروه فلزات عبارت هستند از: فلزات قلیایی مانند Na، فلزات واسطه با اربیتال d قسمتی پر مانند Cu و Ag، فلزات چند ظرفیتی مانند Al، فلزات کمیاب زمینی<sup>2</sup> که دارای اربیتال f قسمتی پر (لانتانیدها و اکتانیدها) هستند.

در ادامه می‌خواهیم به سطح فرمی به عنوان یکی از ویژگی مهم فلزات<sup>3</sup> بپردازیم. کلیه خواص فلزات از جمله رسانش، مغناطش ... به شکل و هندسه این سطح بستگی پیدا می‌نماید. همان‌طور که در بخش‌های قبل به آن اشاره شد نوارهای انرژی در هنگام

1. به دلیل حضور دو الکترون در یک موقعیت با اسپین‌های متفاوت که دافعه‌ی الکترونی را حادث می‌شود.

۲. rare earth

3. به عنوان جامدی با یک سطح فرمی

رسیدن به مرزهای بریلوئن از حالت الکترون آزاد<sup>1</sup> خارج می‌شود. در آنجا اشاره شد الکترون‌های مربوط به حالت‌های نزدیک به مرزهای بریلوئن، پتانسیل شبکه را دیده و پراکنده می‌شوند (پراکندگی کشسان). بنابراین می‌توان این نتیجه را گرفت که برهم‌کنش الکترون با شبکه شکل هندسی سطح فرمی را تغییر می‌دهد. در ادامه نحوه‌ی اثرات برهم‌کنش الکترون‌ها با یک شبکه تناوبی یونی بر روی سطح فرمی را مورد بررسی قرار خواهیم داد.

**نکته 1-36:** با برهم‌کنش الکترون-شبکه هرچند هندسه این سطح تغییر می‌یابد، ولی حجم در برگیرنده سطح که معرف تعداد الکترون‌های سیستم می‌باشد ثابت می‌ماند. در بخش (1-2-6) نشان داده شد، الکترون‌های تقریباً آزاد که بردار موجشان  $\mathbf{k}$  دور از مناطق بریلوئن باشند به مانند الکترون‌های آزاد<sup>2</sup> (با تقارن کروی) عمل می‌کنند. ولی آن دسته از الکترون‌های که بردار موجشان  $\mathbf{k}$  به نواحی مناطق بریلوئن می‌رسند (که برای‌شان شرط براگ برقرار است) توسط پتانسیل شبکه پراکنده شده و تغییر شکل سطح فرمی از حالت کروی را حادث می‌شود. برای به‌دست آوردن توپولوژی سطح فرمی و ترسیم آن، می‌توان از سطح کروی الکترون آزاد در یک شبکه با پتانسیل خاموش استفاده نمود که با روشن شدن پتانسیل شبکه، بایستی تغییراتی را بر روی سطح کروی شکل فرمی در نواحی مرز مناطق بریلوئن اعمال نمود. تناوبی بودن تابع انرژی (رابطه (1-100)) نسبت به بردار شبکه معکوس  $\mathbf{G}$ ، ما را به معرفی نمایش‌هایی از مناطق وا می‌دارد که عبارت هستند از: نمایش منطقه‌ای دوره‌ای، نمایش منطقه تعدیل یافته و نمایش منطقه گسترده که در بخش (1-2-7) به آن اشاره شد (شکل (1-15)). تمام این نمایش‌ها از این واقعیت نشأت می‌گیرند که در یک نوار انرژی، هر دو بردار موج  $\mathbf{k}$  و  $\mathbf{k} + \mathbf{G}$  از فضای  $k$  که اختلافشان برابر با یک بردار شبکه وارون  $\mathbf{G}$  به یک الکترون نسبت داده می‌شود (رابطه‌های (1-100) و (1-101)).

$$e_n(\mathbf{k}) = e_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \quad (100-1)$$

$$y_n(\mathbf{k}) = y_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \quad (101-1)$$

1. سهمی گون  $e = \hbar^2 k^2 / 2m$   
 2. انرژی الکترون آزاد به صورت  $e = \hbar^2 k^2 / 2m$  است.

نکات بالا ما را به این نتیجه می‌رساند که فقط یکی از مناطق بریلوئن کافی است تا بتوان هر کمیت مشاهده پذیر را محاسبه نمود<sup>1</sup>. در بخش‌های قبل بارها اشاره شد که خواص الکترونی جامدات توسط الکترون‌های ظرفیت و رسانش مشخص می‌شود که انرژی‌هایی نزدیکی به سطح فرمی دارند. شکل و هندسه سطح فرمی تأثیر به‌سزایی در خواص الکترونی این دسته الکترون‌ها می‌گذارد. بنابراین اهمیت شناخت هندسه سطح فرمی از اولویت خاصی برای مطالعه ساختار الکترونی جامدات برخوردار است. روش‌های تجربی متفاوتی برای بررسی هندسه سطح فرمی وجود دارد که شامل: اثر مقاومت مغناطیسی<sup>2</sup>، تشدید سیکلوترونی<sup>3</sup>، اثر پوستی بی‌هنجار<sup>4</sup>، آثار هندسی اکوستیک مغناطیسی<sup>5</sup>، اثر شوبینکوف دوهااس<sup>6</sup>، دوهااس-ون‌الفن<sup>7</sup> و نمایه کامپتون<sup>8</sup>.

نکات و تغییرات که بایستی به سطح فرمی کروی شکل اعمال نماییم تا سطح فرمی فلز واقعی سیستم به‌دست آید عبارت هستند از:

الف) برهم‌کنش الکترون با پتانسیل دوره‌ای بلور، باعث ایجاد شکاف انرژی در مرزهای منطقه بریلوئن می‌شود.

ب) سطح فرمی، بایستی در هنگام عبور از مرزهای مناطق بریلوئن، مرزها را عمودی قطع کند. محل برخورد سطح فرمی بستگی به اندازه برهم‌کنش الکترون با پتانسیل شبکه دارد (شکل 1-21 ب).

ج) پتانسیل شبکه یونی باعث گرد شدن گوشه‌های تیز سطوح می‌شود.

د) حجم کل محصور شده به وسیله‌ی سطح فرمی فقط به تراکم الکترون‌ها بستگی دارد و مستقل از جزئیات برهم‌کنش شبکه است.

برای درک این مسئله یک شبکه مربعی دو بعدی با طول  $a$  با یک نوع اتم تک الکترونی در سلول واحد را در نظر بگیرید. طول ابعاد منطقه اول بریلوئن  $2p/a$  است.

1. از این رو، منطقه اول بریلوئن برای این منظور به‌کار برده می‌شود (به دلیل سادگی شکل و یکپارچه‌گی).

۲. Magneto resistance

۳. Cyclotron resonance

۴. Anomalous skin effect

۵. Magneto acoustic effect

۶. Shubnikov-de Haas effect

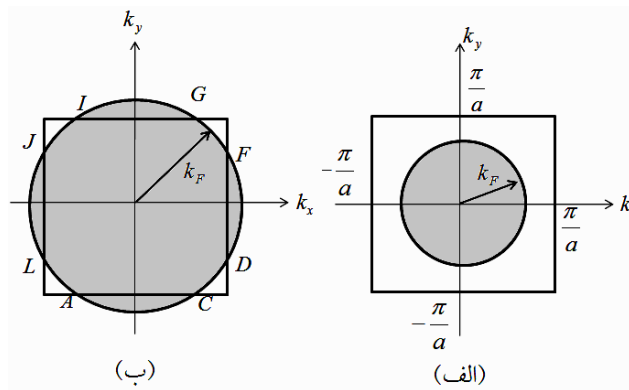
۷. de Haas-Van Alphen effect

۸. Compton profile

با در نظر گرفتن اسپین برای الکترون‌ها و اصل طرد پائولی<sup>1</sup> به‌ازای هر  $k$  مجاز دو الکترون می‌تواند قرار گیرد. از این رو نصف  $k$  های مجاز در منطقه اول بریلوین پر خواهد شد. کل  $k$  های مجاز تا شعاع  $k_F$  پر می‌شوند (شکل (22-1) الف).

$$pk_F^2 = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 p^2}{\epsilon a^3}$$

$$k_F = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar p}{\epsilon a} = 0.399 \frac{\hbar p}{\epsilon a} \quad (102-1)$$



شکل 22-1. سطح فرمی کروی الکترون آزاد برای یک بلور دو بعدی با سلول واحد: الف) تک الکترونی ب) دو الکترونی.

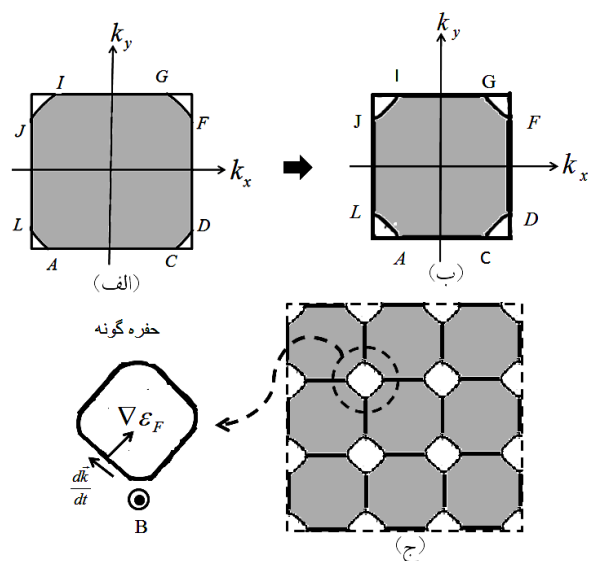
مطابق شکل (22-1) الف، سطح فرمی دور از مرز مناطق بریلوئن و کاملاً در داخل منطقه قرار می‌گیرد و شکل کروی خود را حفظ کرده است. حال اگر از اتم دو ظرفیتی به جای تک ظرفیتی استفاده شود، رابطه‌ی (102-1) نشان دهنده عبور بردار  $k_F$  از مرز مناطق بریلوئن می‌باشد (شکل (22-1) ب).

$$pk_F^2 = \frac{2}{2} \frac{\hbar^2 p^2}{\epsilon a^3}$$

1. هیچ دو فرمیونی نمی‌توانند در یک حالت کوانتومی یکسان قرار گیرند و بایستی حداقل در یک عدد کوانتومی اختلاف داشته باشند. از این رو در یک حالت انرژی فقط دو الکترون با اسپین‌های متفاوت می‌توانند واقع شوند.

$$k_F = \frac{1}{\sqrt{p}} \frac{\hbar p_0}{\epsilon a} = 0.564 \frac{\hbar p_0}{\epsilon a} \quad (103-1)$$

با توجه به شکل (22-1) برای یک بلور دو بعدی با سلول واحد دو الکترونی و اعمال تغییرات گفته شده در بالا در مورد هندسه سطح فرمی و حذف سهم مناطق بالاتر از کره فرمی و استفاده از شرط تناوبی در انرژی (رابطه (1-100)) باعث می‌گردد تا شکل (22-1) ج، حاصل شود. در شکل (22-1) ناحیه هاشور خورده نشان دهنده حالت‌های پر و ناحیه سفید حالت‌های خالی می‌باشد.



شکل 23-1. الف) سطح فرمی الکترون آزاد واقع در منطقه اول ب) تصحیح سطح فرمی الکترون برای یک سیستم با برهم‌کنش با پتانسیل شبکه‌ای ج) اعمال شرط تناوبی انرژی (رابطه (1-100))، نمایش دوره‌ای سطوح فرمی.

انرژی حالت پر از انرژی حالت خالی کمتر است. بنابراین، بردار گرادیان انرژی  $\vec{\nabla} \epsilon$  از سمت هاشور خورده (حالات پر) به سمت سفید (حالات خالی) خواهد بود. با استفاده از رابطه سرعت الکترون (رابطه (1-93))، بردار سرعت الکترون در جهت بردار گرادیان انرژی می‌باشد. از آنجا که بردار گرادیان انرژی  $\vec{\nabla} \epsilon$  عمود بر سطح با انرژی ثابت، در جهت افزایش انرژی می‌باشد، الکترون در بالاترین سطح انرژی (انرژی

فرمی) طوری حرکت می‌کند که انرژی خود را در فضای  $k$  ثابت نگاه دارد<sup>1</sup> و از طرفی دیگر با توجه به رابطه (4-104) تغییرات بردار  $\mathbf{k}$  بر میدان مغناطیسی  $\mathbf{B}$  همواره عمود می‌باشد.

بدیعی است که الکترون در یک جامد با الکترون آزاد رفتاری متفاوت دارند. زیرا الکترون آزاد دارای جرم ثابت است، در صورتی که الکترون در بلور از نظریه نواری تبعیت می‌کند که دارای جرم وابسته به هندسه نواری می‌باشد (1-97).

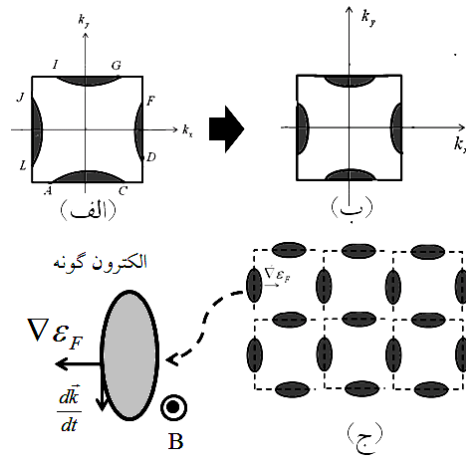
با توجه به مثال زده شده در بالا سطح فرمی متعلق به منطقه اول (سطوح GF، AL، CD و II) حفره گونه می‌باشد. دلیل حفره گون بودن آن چیست؟ متناوب بودن انرژی در فضای  $k$  با بردار شبکه معکوس  $\mathbf{G}$  (رابطه (1-100))، باعث می‌شود که سطوح فرمی بسته یا بازی تشکیل می‌شوند (نمایش دوره‌ای سطح فرمی). الکترون‌ها بر روی این سطوح در حضور میدان مغناطیسی به مانند ذراتی با بار مثبت و یا منفی رفتار می‌کنند (شکل (1-22) ج). در صورتی که مانند یک ذره با بار منفی حرکت نمایند به آن سطوح الکترون گونه و در صورتی که به مانند یک ذره مثبت حرکت نمایند، حفره گونه نامیده می‌شوند.

برای سطوح فرمی که در مناطق بالاتر واقع هستند (در مثال بالا برای یک سیستم دو الکترونی آخرین سطح فرمی تا منطقه دوم می‌رسد)، توسط بردارهای شبکه معکوس  $\mathbf{G}$  می‌توان آن‌ها را به منطقه اول انتقال داده و با تکرار آن با بردارهای انتقال شبکه معکوس  $\mathbf{G}$  و اعمال تغییرات گفته شده در بالا بر روی سطح فرمی در نواحی مرزهای بریلوئن، نمایش دوره‌ای منطقه دوم سطح فرمی ساخته می‌شود (شکل (1-23) ج) که یک سطح الکترون گونه می‌باشد.

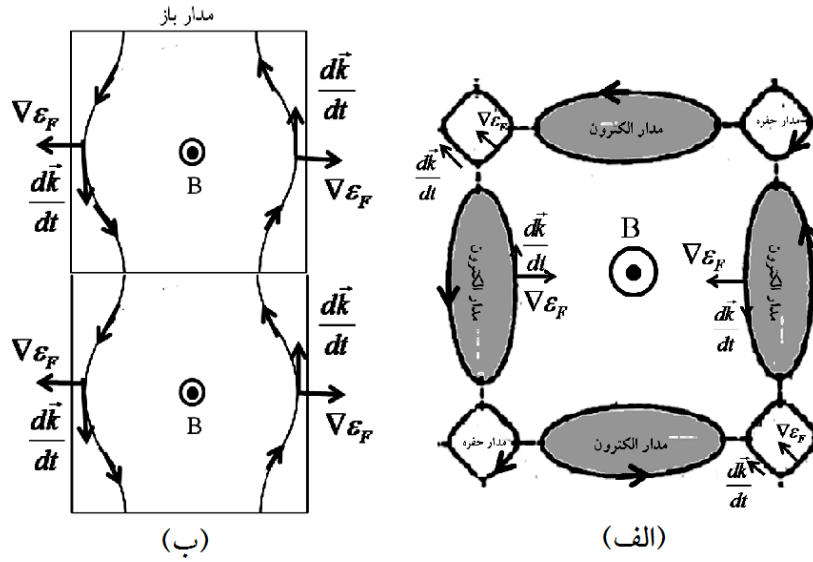
با تلفیق کلیه سطوح در منطقه اول بریلوئن می‌توان هر دو گونه سطوح (حفره گونه و الکترون گونه) را مشاهده نمود شکل (1-23) و با تکرار آن توسط بردارهای شبکه معکوس می‌توان نمایش دوره‌ای آن را ترسیم نمود.

1. زیرا نیروی مغناطیسی هیچ‌گونه کاری بر روی الکترون‌ها انجام نمی‌دهد.





شکل 1-24. الف) سطح فرمی الکترون آزاد واقع در منطقه دوم که به منطقه اول انتقال یافته ب) تصحیح سطح فرمی الکترون آزاد برای یک سیستم برهم‌کنش با پتانسیل شبکه ج) اعمال شرط تکرار انرژی (رابطه 1-100)، نمایش دوره‌ای سطوح فرمی.

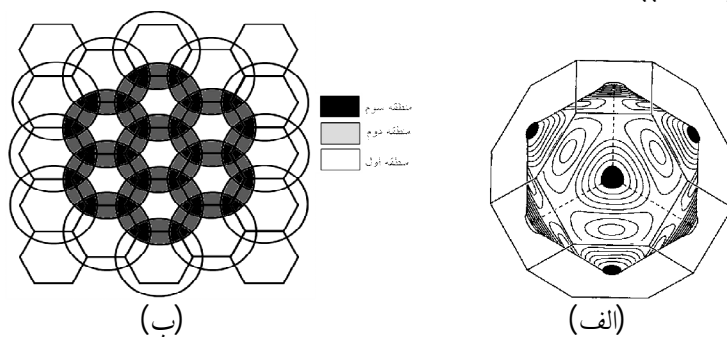


شکل 1-25. الف) نمایش مدار الکترون گونه و حفره گونه ب) نمایش مدار باز.

هر دو گونه (الکترون و حفره گونه) در مثال بالا مدارهای بسته را تشکیل می‌دهد بدین معنی که با اعمال میدان مغناطیسی الکترون یک مسیر بسته را در فضای  $k$  طی می‌کند. با افزایش الکترون در سلول واحد سطح فرمی تا مناطق بالاتر کشیده می‌شود که می‌تواند علاوه بر مدار بسته مدار باز نیز داشته باشیم (شکل (1-25)ب).

به‌طور خلاصه ساده‌ترین روش برای به‌دست آوردن سطوح فرمی در کلیه مناطق بهتر است که ابتدا با توجه به منطقه اول بریلوئن به عنوان یک یاخته بسیط ویگنر-سایتز در فضای  $k$  و تکرار آن منطقه توسط بردار شبکه معکوس  $\mathbf{G}$  و نیز با فرض خاموش بودن پتانسیل شبکه، کره‌های سطح فرمی در تمامی یاخته‌های ویگنر-سایتز را ترسیم می‌کنیم. درجه هم‌پوشانی کره‌ها (تعداد فصل مشترک کره‌ها) شماره منطقه بریلوئن است که سهم فضایی فصل مشترک در آن قرار می‌گیرد. بدین معنی که اگر در قسمتی از فضای  $k$  هم‌پوشانی ناشی از سه کره صورت گیرد درجه آن هم‌پوشانی 3 و به ناحیه سوم از مناطق بریلوئن تعلق دارد (شکل (1-26)).

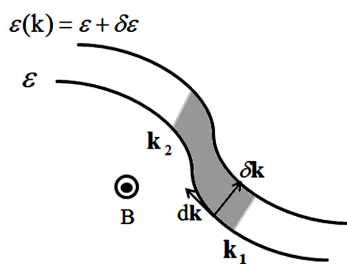
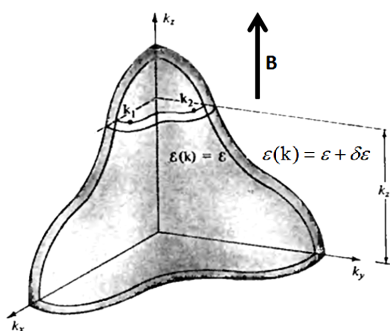
چگونه می‌توان سطوح فرمی را به‌طور تجربی اندازه‌گیری نمود؟ نشان خواهیم داد که انرژی الکترون‌ها در حضور میدان مغناطیسی ثابت باقی می‌ماند و بر روی سطحی با انرژی ثابت در فضای  $k$  حرکت می‌کنند. در بخش قبل با استفاده از نظریه نواری نشان داده شد که تغییرات بردار اندازه حرکت بلوری الکترون  $k$  متناسب است با نیروهای اعمالی بر آن (رابطه (1-96)) که در این‌جا همان نیروی لورنتس می‌باشد (رابطه (1-104)).



شکل 1-26 الف) سطح فرمی جامد مس که در جهت (111) بر سطح بریلوئن تماس دارد. ب) یک شبکه شش‌گوشی با سهم پر شده بالاتر مناطق بریلوئن.

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B} \quad (140-1)$$

که در آن سرعت الکترون و  $\dot{\mathbf{B}}$  میدان مغناطیسی است. با در نظر گرفتن یک میدان  $\dot{\mathbf{B}}$  یکنواخت و انتگرالگیری از رابطه (1-104) به تناظر یک به یک ما بین فضای  $\mathbf{k}$  و فضای واقعی به صورت  $D\mathbf{k} = -e(D\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{B}})/\hbar$  خواهیم رسید. به ازای عنصر خط  $D\mathbf{r}$  در صفحه‌ی عمود بر میدان مغناطیسی  $\dot{\mathbf{B}}$  توسط عبارت  $D\mathbf{k} = eB(Dr)/\hbar$  بر عنصر خطی  $D\mathbf{k}$  مربوط می‌شود، در نتیجه مساحت  $S_n$  مربوط به مدار  $n$ ام در فضای  $\mathbf{k}$  (فضای اندازه حرکت) با رابطه  $A_n = (\hbar/eB)^2 S_n$  با مساحت مدار الکترون  $A_n$  در فضای  $r$  (فضای حقیقی) مربوط می‌باشد.



شکل 1-27. نمایش دو سطح انرژی با انرژی‌های  $e + de$ ، با جابه‌جایی دو سطح انرژی در فضای اندازه حرکت  $d\mathbf{k}$  در صفحه‌ی عمود بر میدان  $\dot{\mathbf{B}}$  می‌باشد.

با توجه به رابطه (104-1) تغییرات اندازه حرکت بلوری الکترون  $\dot{\mathbf{Dk}}$  بر سرعت الکترون  $\dot{\mathbf{V}}$  و میدان  $\dot{\mathbf{B}}$  عمود می‌باشد که با استفاده از تعریف سرعت الکترون به صورت  $\dot{\mathbf{V}} = (1/\hbar)\dot{\mathbf{N}}_k \mathbf{e}(k)$  می‌توان عبارت حاصل ضرب (105-1) را نوشت:

$$\dot{\mathbf{N}}_k \mathbf{e}(k) \times \frac{d\mathbf{k}}{dt} = 0 \quad (104-1)$$

$$\dot{\mathbf{N}}_k \mathbf{e}(k) \times \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \frac{\partial k_x}{\partial t} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial k_x} + \frac{\partial k_y}{\partial t} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial k_y} + \frac{\partial k_z}{\partial t} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial k_z} \circ \frac{d\mathbf{e}}{dt} = 0 \quad (105-1)$$

رابطه (105-1) نشان دهنده ثابت ماندن انرژی الکترون در حضور میدان  $\dot{\mathbf{B}}$  است. نکته 1-37: از رابطه (104-1) می‌توان به سادگی این نتیجه را گرفت که در اثر میدان  $\dot{\mathbf{B}}$  مؤلفه بردار اندازه حرکت  $k$  در راستای میدان  $\dot{\mathbf{B}}$  ثابت باقی می‌ماند که به معنی حرکت الکترون در فضای اندازه حرکت در صفحه‌ای عمود بر میدان  $\dot{\mathbf{B}}$  با یک انرژی ثابت می‌باشد.

با توجه به شکل (27-1) الکترون در فضای  $k$  بر روی یک سطح با انرژی ثابت در حضور میدان  $\dot{\mathbf{B}}$  حرکت می‌کند. مدت زمانی  $t_2 - t_1$  که الکترون از نقطه  $k_1$  به نقطه  $k_2$  می‌رسد برابر است با:

$$t_2 - t_1 = \int_{k_1}^{k_2} \frac{dk}{\dot{k}} \quad (106-1)$$

در اینجا  $\dot{k} = \frac{dk}{dt}$ . با توجه به رابطه (104-1) و  $\dot{\mathbf{v}} = \hbar^{-1} \dot{\mathbf{N}}_k \mathbf{e}(k)$

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -e \hbar^{-1} \dot{\mathbf{N}}_k \mathbf{e} \cdot \dot{\mathbf{B}} \quad (107-1)$$

$$\left| \frac{dk}{dt} \right| = -e \hbar^{-2} \left| \dot{\mathbf{N}}_k \wedge \mathbf{e} \right| B \quad (108-1)$$

$\dot{\mathbf{N}}_k \wedge \mathbf{e}$  مؤلفه بردار  $\dot{\mathbf{N}}_k \mathbf{e}$  در صفحه عمود بر میدان  $\dot{\mathbf{B}}$  واقع است. با استفاده از (108-1) می‌توان رابطه (106-1) را به صورت رابطه (109-1) بازنویسی نمود نوشت.

$$t_2 - t_1 = \int_{k_1}^{k_2} \frac{\hbar^2}{eB} \frac{dk}{|\mathbf{N}_k \wedge \mathbf{e}|} \quad (109-1)$$

در رابطه بالا  $dk$  جابه‌جایی در سطحی با انرژی  $e$  است که بردار اندازه حرکت از نقطه  $k_1$  به نقطه  $k_2$  می‌رسد. عبارت  $|\mathbf{N}_k \wedge \mathbf{e}|$  به نظر کمی نامشخص می‌باشد که می‌تواند در صفحه عمود بر میدان  $\mathbf{B}$  در هر جهتی باشد. از طرفی با در نظر گرفتن دو سطح انرژی  $e$  و  $e+de$ ، در فضای  $k$  و در نظر گرفتن  $dk$  مطابق شکل (27-1) جابه‌جایی این دو سطح انرژی در صفحه‌ای که بر میدان  $\mathbf{B}$  عمود می‌باشد و نیز با استفاده از تعریف دیفرانسیل  $de$  به صورت حاصل ضرب داخلی گرادیان انرژی با بردار  $dk$  محاسبه می‌گردد (رابطه (110-1)).

$$de = \mathbf{N}_k \cdot \mathbf{e} dk = |\mathbf{N}_k \wedge \mathbf{e}| dk \quad (110-1)$$

با جایگذاری آن در رابطه‌ی (110-1)، مدت زمان طی شده به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$t_2 - t_1 = \int_{k_1}^{k_2} \frac{\hbar^2}{eB} \frac{1}{de} dk \quad (111-1)$$

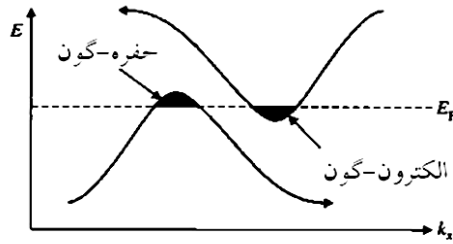
عبارت انتگرالی مساحت سطح جاروب شده  $S_{1,2}$  در فضای  $k$  ما بین دو سطح با انرژی  $e$  و  $e+de$ ، در صفحه‌ی عمود بر میدان  $\mathbf{B}$  (مطابق شکل (27-1)) را نشان می‌دهد. با میل دادن  $de$  به سمت صفر عبارت (111-1) را به صورت رابطه (112-1) بازنویسی می‌شود.

$$t_2 - t_1 = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{dS_{1,2}}{de} \quad (112-1)$$

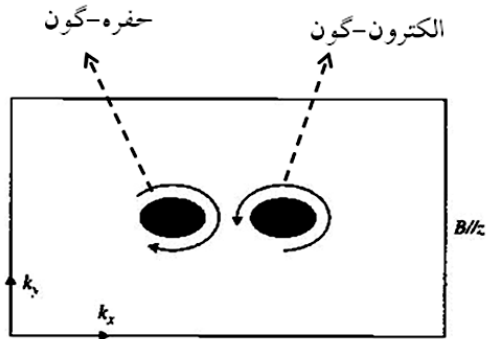
با توجه به شکل (27-1) این سطح جاروب شده نه تنها بستگی به مقدار انرژی  $e$  دارد بلکه به مقدار مؤلفه‌ی اندازه حرکت  $k$  در راستای موازی با میدان  $\mathbf{B}$  (که این‌جا همان راستای محور  $z$  در نظر گرفته می‌شود  $k_{||}$ ) دارد. با در نظر گرفتن مسیر بسته‌ای (با برابر گرفتن  $k_1$  با  $k_2$  در عبارت (112-1))، زمان دوران یک دور چرخش

کامل الکترون  $t_c$  به دست می آید. از این رو حاصل عبارت (112-1) معادل با سطح جاروب شده ما بین دو سطح انرژی  $e$  و  $e+de$  می باشد (113-1).

$$t_c = \frac{\hbar^2 dS(E, k_{||})}{eB de} \quad (113-1)$$



(الف)



(ب)

شکل 1-28. الف) نوارهای انرژی یک نیم فلز که توسط انرژی فرمی قطع می گردد. ب) تصویر سطح مقطع نوار انرژی در صفحه  $k_x$  و  $k_y$ .

با توجه به تعریف فرکانس سیکلوترونی به صورت  $\omega_c = eB/m_c^*$  و رابطه به دست آمده (113-1) برای زمان دوران یک چرخش  $t_c$  و ارتباط آن دو به صورت  $\omega_c = 2\pi/t_c$  می توان جرم سیکلوترونی الکترون  $m_c^*$  (یا جرم مؤثر سیکلوترونی) را

به دست آورد. این جرم مؤثر به نمودی تغییرات سطح بر روی صفحه‌ی عمود بر میدان  $\mathbf{B}$ ، بستگی دارد.

$$m_c^* = \frac{\hbar^2}{2p} \frac{dS(\mathbf{e}, k_{\parallel})}{d\mathbf{e}} \quad (114-1)$$

**نکته 1-38:** در فلزات نوارهای انرژی رسانش توسط انرژی فرمی قطع می‌شوند. بنابراین این دسته نوار (نوار رسانش) کاملاً پر نیستند و می‌توانند جریان غیر صفری را در نوار ایجاد نمایند. قطع نوار انرژی به دو صورت مطابق شکل (1-28) امکان پذیر است. شکل (1-28) نوار انرژی سیستمی را نشان می‌دهد که انرژی فرمی قسمتی از دو نوار مجزا را قطع نموده است. در نوار سمت چپ شکل (1-28) الف نوری با رفتاری حفره‌گونه و نوار سمت راست الکترون‌گونه در حضور میدان پیدا می‌نمایند. دلیل آن این است با توجه به شکل و عبارت (1-114) که با افزایش انرژی فرمی تغییرات سطح مقطع انرژی برای هر دو نوار متفاوت است، این تغییرات برای نوار سمت چپ، منفی (کاهش سطح) و برای سمت راست، مثبت (افزایش سطح) می‌باشد که به ترتیب جرم مؤثر منفی و مثبت را حادث می‌شود که معادل حفره و الکترون می‌باشند. در ادامه قصد داریم، بحث نیمه کلاسیکی-کوانتومی حرکت الکترون در مدار را توسط رابطه‌ی بور-زومرفلد کوانتومی دنبال کنیم.

$$\oint \mathbf{p}^{\mathbf{r}} \times d\mathbf{r} = (n+g)2\pi\hbar \quad (114-1)$$

که در آن  $n$  عدد درستی است و  $g$  تصحیح فازی است که برای الکترون‌های آزاد برابر  $1/2$  است. در حضور میدان مغناطیسی  $\mathbf{B}$  بردار اندازه حرکت الکترون  $\mathbf{p}$  به  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla + e\mathbf{A}$  تبدیل می‌گردد که  $\mathbf{A}$  پتانسیل برداری است که با رابطه  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  داده می‌شود. در این صورت رابطه‌ی (114-4) برای الکترون آزاد  $\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  در حضور میدان مغناطیسی  $\mathbf{B}$ :

$$\oint \mathbf{p}^{\mathbf{r}} \times d\mathbf{r} = \oint \hbar \mathbf{k} \times d\mathbf{r} + e \oint \mathbf{A} \times d\mathbf{r} = (n+g)2\pi\hbar \quad (115-1)$$

با انتگرالگیری از رابطه‌ی (115-1)، رابطه‌ی (116-1) حاصل می‌گردد:

$$\begin{aligned} \mathbf{k} &= \frac{e}{\hbar} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{B}) \\ |\mathbf{k}| &= \frac{eB}{\hbar} r \end{aligned} \quad (116-1)$$

این رابطه نشان می‌دهد که مدار حرکتی الکترون در فضای اندازه حرکت  $k$  به اندازه  $eB/\hbar$  بزرگتر از مدار در فضای واقعی  $r$  می‌باشد که هم‌ارز آن (توان دوم رابطه‌ی (116-1)) می‌توان رابطه‌ی مساحت جاروب شده‌ی در این دو فضا را نتیجه گرفت (رابطه‌ی (117-1)).

$$S = (eB/\hbar)^2 A \quad (117-1)$$

که مساحت مدار جاروب شده در فضای واقعی  $r$  و اندازه حرکت  $k$  به ترتیب برابر است با  $A$  و  $S$ . با به‌کارگیری رابطه (116-1) و عبارت انتگرالی رابطه (115-1) برای گاز الکترونی آزاد  $g=1/2$  به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\begin{aligned} \oint \mathbf{p} \times d\mathbf{r} &= \oint \frac{e}{\hbar} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{B}) \times d\mathbf{r} + e \oint \mathbf{A} \times d\mathbf{r} = (n+g)2\pi\hbar \\ \oint \frac{e}{\hbar} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{B}) \times d\mathbf{r} + e \oint \mathbf{A} \times d\mathbf{r} &= (n+g)2\pi\hbar \\ - e \oint (\mathbf{r} \cdot d\mathbf{r}) \times \mathbf{B} + e \oint \mathbf{A} \times d\mathbf{r} &= (n+g)2\pi\hbar \\ - e2F_n + eF_n &= (n+g)2\pi\hbar \\ - eF_n &= (n+g)2\pi\hbar \end{aligned} \quad (118-1)$$

روابط بالا از سه عبارت تشکیل شده است:

الف) عبارت  $\oint (\mathbf{r} \cdot d\mathbf{r})$  برابر با مساحت مداری است که الکترون در فضای واقعی  $r$  طی می‌کند.

ب) تعریف شار مغناطیسی عبوری از مدار  $r$  که با حاصل ضرب نرده‌ای میدان  $\mathbf{B}$  با سطحی که میدان از آن عبور می‌کند برابر است.

$$\begin{aligned} F &= \oint \mathbf{B} \times d\mathbf{a} \\ F &= (1/2) \oint (\mathbf{r} \cdot d\mathbf{r}) \times \mathbf{B} \end{aligned} \quad (119-1)$$

ج) با استفاده از قانون استوکس که انتگرال سطحی را به انتگرال مداری تبدیل می‌نماید.



$$F = \oint_S \mathbf{r} \times d\mathbf{a} = \oint_S \mathbf{v} \times \mathbf{A} \times d\mathbf{a} = \oint_C \mathbf{r} \times d\mathbf{r} \quad (120-1)$$

نکته قابل توجه بالا، این است که حرکت الکترون‌ها در فضای  $\mathbf{r}$  مدارهایی را تشکیل می‌دهند که شار عبوری از آن‌ها کوانتیده باشند. واحد شار کوانتیده در سیستم SI برابر  $2\pi\hbar/e = 4/14 \cdot 10^{-7} \text{ Tm}^2$  است.

با استفاده از رابطه (4-117) و تعریف شار مغناطیسی می‌توان رابطه مساحت مدارهای کوانتیده را در فضای اندازه حرکت  $S$  به دست آورد (رابطه (1-119)).

$$S_n = \frac{2\pi e B}{h} (n + g) \quad (121-1)$$

نکته 1-39: با مشاهده رابطه (4-121)، اختلاف سطح به‌ازای دو مدار متوالی ( $S_n$ ) و ( $S_{n+1}$ ) مقداری است ثابت و برابر  $2\pi e B/h$  است. این رابطه یک رفتار تناوبی را به سیستم تحمیل می‌کند که در ادامه به آن خواهیم پرداخت. این رابطه به شرط آزاگر-لیفشیتز<sup>۱</sup> شناخته شده است که در ادامه پایه بحث اثر دوهااس-ون‌آلفن<sup>۲</sup> می‌باشد.

#### • اثر دوهااس-ون‌آلفن

این اثر در سال 1931 توسط دوهااس و ون-آلفن کشف شد. با اندازه‌گیری پذیرفتار مغناطیسی بیسموت خالص در دمای پایین، در معرض میدان مغناطیسی، رفتار تناوبی با تغییر میدان  $B$  مشاهده می‌شود شکل (1-29). در دمای بالاتر باید میدان قوی‌تری را اعمال نمود تا قادر به دیدن رفتار تناوبی را در مغناطش سیستم باشیم.

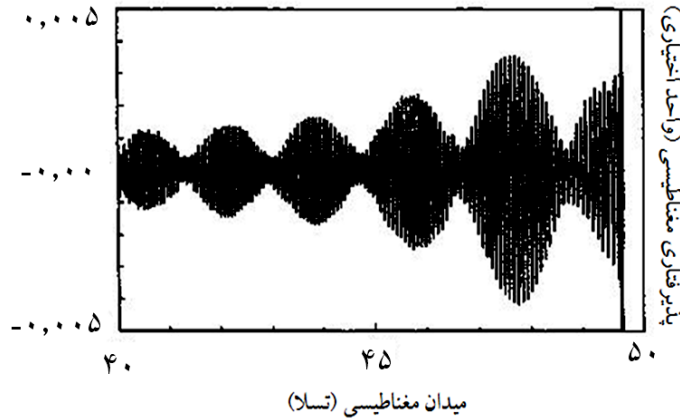
در فصل خواص مغناطیسی مواد نشان داده می‌شود که در اثر اعمال میدان مغناطیسی بر روی یک فلز، ترازهای لاندائو پدید خواهد آمد که باعث مغناطیسی شدن سیستم می‌گردد که با تغییرات شدت میدان، مغناطش سیستم رفتار تناوبی در کمیت‌های فیزیکی سیستم از خود نشان می‌دهد. با توجه به عبارت (1-121) به‌ازای دو تراز متوالی ( $n+1, n$ ) مربوط به سطح جاروب شده  $S_0$  (در فضای  $k$ )، میدان مغناطیسی متناسب به آن دو تراز عبارت هستند از:

$$\frac{1}{B_1} = (2\pi e/hS_0)[n + g] \quad (122-1)$$

<sup>۱</sup>. Onsager-Lifshitz

<sup>۲</sup>. de Haas-Van Alphen effect

$$\frac{1}{B_2} = (2pe/hS_0)[n+1+g] \quad (123-1)$$



شکل 1-29. رفتار تناوبی پذیرفتار مغناطیسی در حضور میدان مغناطیسی

با تفاضل روابط (122-1) و (1231-1) به عبارت مهم (124-1) خواهیم رسید که در آن رفتار تناوبی در میدان مغناطیسی دیده می‌شود. بدین معنی که به ازای نمودهای مساوی  $1/B$  مدارهای همانند به وجود می‌آورند. به طور تجربی این اثر را می‌توان در دماهای پایین در پذیرفتاری مغناطیسی، ظرفیت گرمایی و مقاومت ویژه دید. رفتار تناوبی این اثر در جمعیت تعداد ترازها در سطح فرمی خواهیم پرداخت.

$$D_C \frac{\partial \phi}{\partial B} = (2pe/hS_0) \quad (124-1)$$

با توجه به رابطه (124-1) رفتار تناوبی در تغییرات عکس میدان مغناطیسی نسبت به اکستریم  $S_0^1$  دیده می‌شود که  $S_0$  تلاقی سطح فرمی با سطح عمود بر میدان  $B$  می‌باشد. با توجه به شکل (1-27) بسته به این که مقدار  $k_z$  الکترون‌های سطح فرمی چه باشد مقدار  $S_0$  دارای یک کمینه یا بیشینه خواهد بود که بر روی دامنه تغییرات عبارت (124-1) اثر می‌گذارد.

پیوست 1-1 چگالی حالت انرژی برای یک ساختار نواری

از فیزیک حالت جامد 1 به یاد داریم، عبارت  $dN = D(E)dE$  تعداد حالات انرژی از سیستم، ما بین  $E$  و  $E + dE$  را نشان می‌دهد که در آن چگالی حالت انرژی  $D(E)$  سیستم است. با در دست داشتن رابطه پاشندگی  $E(k)$ ، در فضای اندازه حرکت (فضای  $k$ ) می‌توان مکان هندسی نقاطی از  $k$  را مشخص نمود که دارای انرژی یکسانی باشند (شکل (1-30)). با توجه به مفهوم گرادیان در ریاضیات، گرادیان تابع پاشندگی  $E(k)$ ، تغییرات انرژی در فضای  $k$  به صورت زیر نشان داده می‌شود.

$$\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k} = dE \quad (125-1)$$

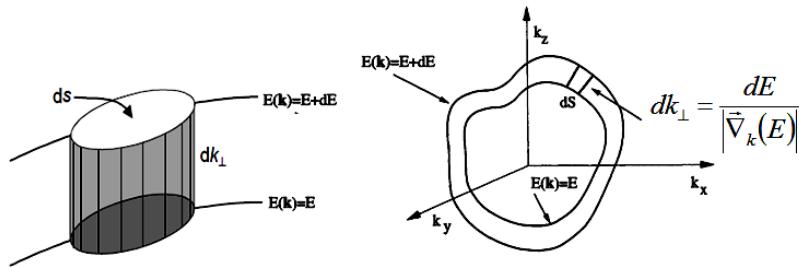
حداکثر تغییرات انرژی در فضای  $k$  در جهتی است که بردار گرادیان انرژی در راستای بردار موضعی  $\hat{n}$  عمود بر سطح انرژی (هم جهت با بردار سطح) باشد.

$$\left| \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \right| dk_{\perp} = dE \quad \text{و} \quad dk_{\perp} = \frac{dE}{\left| \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \right|} \quad (126-1)$$

برای محاسبه چگالی حالات انرژی برحسب انرژی  $D(E)$  ما بین دو سطح انرژی  $E$  و  $E + dE$  که در شکل (1-30) نشان داده شده است، کافی است حجم محصور ما بین دو سطح انرژی را محاسبه و در چگالی حالت  $D(k)$  در فضای  $k$  ضرب نماییم تا تعداد حالت‌ها انرژی  $dN$  که مابین انرژی  $E$  و  $E + dE$  به دست آید. برای محاسبه این حجم محصور شده، می‌توان حجم واقع در بین دو سطح هم انرژی را با استوانه‌های بسیار کوچک با سطح مقطع  $dS(E)$  و ارتفاع  $dk_{\perp}$ ، پر نماییم. در رابطه (1-127)  $dk_{\perp}$  فاصله عمودی دو سطح انرژی  $E$  و  $E + dE$  است.

$$dV = \int_{E < E(\mathbf{k}) < E + dE} d^3k = \int_{S(E)} dS_E dk_{\perp} \quad (127-1)$$

1. چگالی حالت در فضای اندازه حرکت برای گاز الکترونی محصور در واحد حجم برابر است با  $D(k) = V/8\pi^3$ .



شکل 1-30. نمایش سطوح انرژی برای به دست آوردن چگالی حالت انرژی.

با توجه به عبارت (1-127)، انتگرال سه گانه روی قسمتی از فضای  $k$  که انرژی حالت های آن ها مابین  $E$  و  $E + dE$  واقع است، معادل است با یک انتگرال سطحی با انرژی  $E$  و انتگرال طولی عمود بر روی همان سطح انرژی  $dk_{\perp}$ . با به دست آوردن حجم محصور  $dV$  در فضای  $k$  مابین دو سطح انرژی  $E$  و  $E + dE$  (رابطه (1-127)) و حاصل ضرب آن در چگالی حالت  $D(k)$  در فضای  $k$ ، به تعداد حالت انرژی  $dN$  که انرژی آن ها مابین  $E$  و  $E + dE$  خواهیم رسید که آن طبق تعریف برابر است  $D(E)dE$  که در اینجا  $D(E)$  چگالی حالت انرژی مجموعه می باشد. با در نظر گرفتن اسپین الکترون بایستی تعداد حالت را در عدد 2 نیز ضرب نمود.

$$\begin{aligned}
 dN &= D(k)d^3k = D(E)dE \\
 &= D(k)d^3k = 2 \cdot \frac{\omega_L}{c} \frac{\omega^3}{2\pi\omega} \int_{E < E(k) < E+dE} d^3k \\
 &= 2 \cdot \frac{\omega_L}{c} \frac{\omega^3}{2\pi\omega} \int_{S(E)} \omega dS_E dk_{\perp} \quad (128-1) \\
 &= 2 \cdot \frac{\omega_L}{c} \frac{\omega^3}{2\pi\omega} \int_{S(E)} \omega dS_E \frac{1}{|v_{\perp E}(k)|} dE
 \end{aligned}$$

**نکته 1-40:** مؤلفه ی اول انتگرال بر روی سطح  $S(E)$  با انرژی ثابت  $E$  در فضای  $k$  و مؤلفه ی دیگر انتگرال روی کلیه انرژی هایی که در بازه ی  $E < E(k) < E + dE$  قرار

دارند، گرفته می‌شوند. بنابراین می‌توان از رابطه (1-128)، رابطه (1-129) را برای تابع چگالی حالت به دست آورد.

$$D(E) = 2 \int_{E_0}^E \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})|} dS_E \quad (129-1)$$

**نکته 1-41:** در رابطه (1-129) انتگرال روی سطح با انرژی ثابت گرفته می‌شود. به ازای برخی نقاط در فضای  $k$  که در آن گرادیان انرژی صفر می‌شود<sup>1</sup>، چگالی حالت انرژی  $D(E)$  در آن نقاط دارای تکینه‌گی‌هایی است که به تکینه‌گی‌های وان-هو<sup>2</sup> معروف است. از این رو به ازای برخی انرژی‌های خاص، تراکم حالات انرژی بسیار زیاد می‌باشد. این تکینه‌گی‌ها جایی صورت می‌پذیرد که  $\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$  برابر با صفر می‌گردد که در آن نقاط با توجه به تعریف نواری سرعت الکترون  $\mathbf{v}_g = (1/\hbar)\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$  سرعت گروه الکترون نیز صفر می‌گردد و هیچ موج رونده‌ای در این نقاط تولید نمی‌شود و انرژی الکترون‌ها در این مناطق جایگزیده هستند. از طرفی می‌دانیم در مرز مناطق بریلوئن سرعت گروه الکترون صفر است بنابراین نقاط تکینه‌گی در چگالی حالت می‌تواند مشخصه بلوری سیستم نیز باشند.

**نکته 1-42:** نقاط اکسترمم و زین‌اسبی در سطوح هم انرژی می‌تواند محل تراکم حالت‌ها باشند. بنابراین در این نقاط معادله پاشندگی انرژی به صورت زیر می‌باشد.

$$E(\mathbf{k}) = E_0 + \frac{\hbar^2}{2m^*} (\pm k_x^2 \pm k_y^2 \pm k_z^2) \quad (130-1)$$

به ازای تمامی علامت‌ها مثبت در رابطه (1-130) ما یک مینیموم و به ازای کلیه علامت‌ها منفی یک نقطه‌ی ماکزیمم موضعی خواهیم داشت. در غیر این حالت‌ها، با علامت‌های مختلف مثبت و منفی، با نقاط زین‌اسبی موضعی سرکار داریم.

1. روی مرزهای بریلوئن.

مسائل:

- 1-1. نشان دهید که رابطه (1-29) بین طول موج فرمی و طول موج دبی برقرار است.
- 2-1. چگالی جریان الکترونی حاصل از توابع موج بلوخ را به دست آورید.
- 3-1. نشان دهید تابع موج الکترون در جعبه‌ای مکعبی به اضلاع  $L$  به صورت زیر می‌باشد.

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{\sqrt{8}}{L^3} \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi z}{L}\right) \quad (131-1)$$

ب) ترازهای انرژی الکترون در جعبه را به دست آورید و نشان دهید چرا ضریب  $n_i$  در معادله (131-1) نمی‌تواند صفر و یا اعداد منفی باشند.

- 4-1. با در نظر گرفتن یک گاز  $N$ -الکترونی در داخل جعبه‌ای به حجم  $V$  می‌توان پارامتر  $r_s$  را به عنوان شعاع فضای کروی شکلی که به هر یک از الکترون‌های داخل جعبه نسبت داده می‌شود، تعریف نمود. نشان دهید  $r_s$  بر حسب چگالی الکترون  $n$  به صورت زیر می‌باشد.

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{1/3} \quad n = \frac{N}{V} \quad (132-1)$$

با تقسیم  $r_s$  بر شعاع بور  $a_0 = \frac{\hbar^2}{mc^2} = 0.529 \times 10^{-8} \text{ cm}$  می‌توان کمیتی بی‌بعدی را مشخص نمود  $r_s/a_0$ . با توجه به گاز الکترونی بدون برهم‌کنش نشان دهید بردار موج و انرژی الکترون در سطح فرمی بر حسب  $r_s$  به صورت زیر می‌باشد.

$$k_F = \frac{3/63}{(r_s/a_0)} \text{ \AA}^{-1} \quad (133-1)$$

$$e_F = \frac{50/1}{(r_s/a_0)^2} \text{ eV} \quad (134-1)$$

- 5-1. چگالی حالت انرژی  $D(E)$  یک گاز الکترونی بدون برهم‌کنش دو بعدی (در یک فضای دو بعدی به ابعاد  $L$ ) را به دست آورید.

6-1. نشان دهید کسر الکترون‌ها در پهنای انرژی  $k_B T$  حول تراز فرمی برابر با  $\frac{3}{2}(k_B T/E_F)$  است.

7-1. با استفاده از رابطه فشار به صورت  $P = (\nabla E / \nabla V)_N$  نشان دهید رابطه زیر برای یک گاز الکترونی بدون برهم‌کنش برقرار است.

$$PV = \frac{2}{3}E \quad (135-1)$$

8-2. با استفاده از رابطه  $u_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$ ، تناوبی بودن عبارت  $u_{\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r})$  نسبت به بردار انتقال  $\mathbf{T}$  را نشان دهید.

9-2. نشان دهید با توجه به صفر در نظر گرفتن جمله  $V_0 = 0$  در بسط فوریه پتانسیل شبکه  $V(\mathbf{r})$ ، جمله اول اختلال در رابطه (54-1)  $\langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k} \rangle$  برابر صفر می‌شود.

10-2. پتانسیل برهم‌کنشی کولنی الکترون با یک یون منزوی  $V_a(\mathbf{r}) = -ze^2/r$ ، نشان دهید ضرایب فوریه آن  $V_a(q)$  در واحد حجم برابر با  $V_a(q) = -\frac{4\pi z e^2}{q^2}$  است. برای حل این مسئله کافی پتانسیل یک اتم منزوی را به جای  $V(\mathbf{r}) = -ze^2/r$  به صورت  $V(r) = (-ze^2/r)e^{-br}$  در نظر بگیرید. با گرفتن انتگرال فوریه از آن و استفاده از روش انتگرال‌گیری جزیه‌جز ضرایب فوریه آن را به دست آورید و سپس  $b$  را به سمت صفر میل دهید.

11-2. با استفاده از رابطه (37-1) و با توجه به شکل (15-1)  $g$  انرژی گاف دوم را در مرز منطقه اول بریلوئن برحسب ضرایب فوریه پتانسیل  $V_G$  به دست آورید.

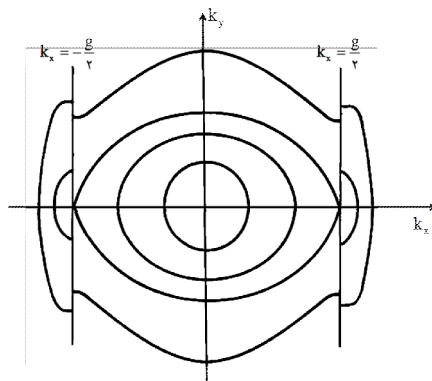
12-2. ساده‌ترین شکل یک شبکه سه‌بعدی با پتانسیلی یک بعدی به شکل  $U(x) = 2V \cos(gx)$  به مدل ساندویچی<sup>1</sup> معروف می‌باشد، الف) نشان دهید با استفاده از تقریب الکترون تقریباً آزاد انرژی و نواری سیستم به ازای  $k_x = g/2$  به صورت زیر می‌باشد.

<sup>1</sup> Sandwichium

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_y^2 + k_z^2) + \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 k_x^2}{m} + \frac{\hbar^2 (k_x - g/2)^2}{2m} \pm \sqrt{\frac{\hbar^2 (k_x - g)^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - 4V^2}$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_y^2 + k_z^2) + E_x(k_x)$$

شکل زیر نمایش تابع انرژی در صفحه  $k_z = 0$  است و خطوط ترسیمی در شکل به ازای انرژی‌های ثابت می‌باشد.



شکل 1-31

13-1. نشان دهید که  $\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{a}_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} = N \mathbf{d}_{i,j}$  در اینجا جمع روی تمام مقادیر  $\mathbf{k}$  در

منطقه اول بریلوئن می‌باشد و  $\mathbf{R}_i$  و  $\mathbf{R}_j$  بردارهای جابه‌جایی در شبکه واقعی می‌باشند.

14-1. نشان دهید که  $\sum_{\mathbf{R}_i} \mathbf{a}_{\mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{R}_i \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}')} = N \mathbf{d}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$  در اینجا جمع روی تمام بردارهای  $\mathbf{R}_i$  در شبکه واقعی می‌باشد.

15-1. نشان دهید عبارت تابع موج الکترون (رابطه (1-77)) با رویکرد تنگ‌بست، شرط بلاخ در آن صدق می‌کند.

16-1. الف) با استفاده از رویکرد تنگ‌بست، نشان دهید که انرژی نواری در ساختار FCC، برای حالت تک اربیتال اتمی از نوع  $s$ ، به صورت زیر می‌باشد.



$$E(k) = E_a - B + 4g(\cos(\frac{1}{2}k_x a)\cos(\frac{1}{2}k_y a) + \cos(\frac{1}{2}k_y a)\cos(\frac{1}{2}k_z a) + \cos(\frac{1}{2}k_z a)\cos(\frac{1}{2}k_x a)) \quad (136-1)$$

(ب) نشان دهید به ازای  $ka$  بسیار کوچک رابطه بالا به صورت زیر تبدیل می شود.

$$E(k) = E_a - B + 12g + gk^2 a^2 \quad (137-1)$$

**راهنمایی:** تعداد نزدیکترین همسایگان نسبت به مبدا ساختار FCC دوازده

$$\mathbf{r}_T = \frac{a}{2}(\pm 1, \pm 1, 0), \frac{a}{2}(\pm 1, 0, \pm 1), \frac{a}{2}(0, \pm 1, \pm 1)$$

می باشد که عبارت هستند از: و با استفاده از رابطه (1-92) و عبارت احتمال پرش می توان انرژی نواری را به دست آورد.

17-1. عبارت چگالی حالت انرژی  $D(E)$  یک شبکه مکعبی به ضلع  $a$  که توسط روش

تنگ بست با رابطه ی پاشندگی (1-90) داده می شود را به دست آورید.

18-1. نشان دهید با استفاده از رویکرد تنگ بست انرژی نواری برای ساختار BCC به

صورت زیر می باشد.

$$E(k) = E_a - B + 8g(\cos(\frac{1}{2}k_x a)\cos(\frac{1}{2}k_y a)\cos(\frac{1}{2}k_z a)) \quad (138-1)$$

19-1. الف). با استفاده از رویکرد تنگ بست، انرژی تک ارییتال از نوع  $p_z$  یک لایه

کربنی زنبور عسلی (گرافن) را مطابق شکل زیر به دست آورید. در شکل-

الف  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  بردارهای شبکه واقعی و در شکل ب  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$  بردارهای شبکه معکوس

گرافن می باشد. الف) نشان دهید انرژی نواری به دست آمده  $E(k)$  برای چنین

ساختاری برابر است با:

$$E_{\pm}(k) = mg\sqrt{3 + 2\cos(\sqrt{3}k_y a) + 4\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a)\cos(\frac{3}{2}k_x a)} \quad (139-1)$$

در این جا سهم مقادیر ثابت را صفر در نظر گرفته شده است و نیز با توجه به

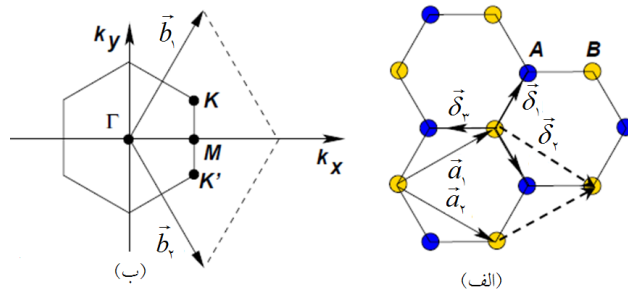
اینکه اندازه  $g$  منفی است علامت + در انرژی به معنی حالت پیوندی و علامت -

ضدپیوندی است که ناشی از دو نوع هم پوشانی از نوع  $p$  برای ارییتال  $p_z$

(شکل 18-1) حالت پیوندی و ضدپیوندی از اتم کربن که بر صفحه گرافن عمود می‌باشد<sup>1</sup>.

(ب). با استفاده از انرژی نواری  $E_{\pm}(k)$ ، نمودار انرژی بر حسب  $k$  را در مسیر  $G \otimes M \otimes K$  برای هر دو حالت پیوندی و ضد پیوندی ترسیم نمایید.

(ج) با توجه به رابطه انرژی  $E_{\pm}(k)$  نشان دهید انرژی الکترون به ازای  $k$ های حول وحوش  $K \otimes K$ ، (مطابق شکل 32-1) خطی بوده و جرم مؤثر الکترون صفر می‌باشد.



شکل 32-1. (الف) یک لایه کربنی زنبور عسلی (گرافن). (ب) شبکه معکوس گرافن.

20-1. سطح انرژی زیر را در نظر بگیرید (رابطه 140-1)) که در آن پارامتر جرم

عرضی و  $m_1$  پارامتر جرم طولی است. معادله حرکت  $\frac{h\mathbf{dk}}{dt} = -e(\mathbf{v}_e \times \mathbf{B})$  و

$\mathbf{V} = \hbar^{-1} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k})$  را به کار برده و نشان دهید که وقتی میدان مغناطیسی ایستای  $B$

در صفحه  $x$  و  $y$  قرار دارد  $w_c = eB/(m_1 m_t)$ .

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \hbar^2 \frac{a_1^2}{c} \frac{k_x^2 + k_y^2}{2m_t} + \frac{k_z^2}{2m_1} \quad (140-1)$$

<sup>1</sup> به دلیل وجود دو اتم کربن تک اربیتالی در سلول واحد.

سؤالات تستی:

1-1. یک گاز الکترونی بدون برهم‌کنش در یک جعبه با ابعاد  $L$ ، چگالی حالت در فضای  $k$  با در نظر گرفتن اسپین برای هر الکترون برابر است با:

الف)  $\frac{L^3}{8p^3}$       ب)  $4p^3L^3$

ج)  $\frac{8p^3}{L^3}$       د)  $\frac{L^3}{4p^3}$

2-1. کدام یک از عبارتهای زیر مربوط به گاز الکترونی بدون برهم‌کنش است.

الف) چگالی الکترونی بسیار زیاد      ب) چگالی الکترونی بسیار کم  
ج) چگالی الکترونی متوسط      د) بستگی به چگالی ندارد

3-1. با استفاده از مدل درود رسانش الکتریکی برابر است با:

الف)  $s = \frac{m_e}{ne^2t}$       ب)  $s = \frac{ne^2t}{m_e}$

ج)  $s = \frac{2m_e}{ne^2t}$       د)  $s = \frac{ne^2t}{m_e}$

4-1. کدام رابطه زیر برای انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل برای یک مجموعه  $N$ -الکترونی با برهم‌کنش برقرار است:

الف)  $T \gg \frac{1}{(Dr)^2}$  و  $V_{ee} \gg \frac{1}{(Dr)^2}$       ب)  $T \gg \frac{1}{(Dr)}$  و  $V_{ee} \gg \frac{1}{(Dr)^2}$

ج)  $T \gg \frac{1}{(Dr)}$  و  $V_{ee} \gg \frac{1}{(Dr)}$       د)  $T \gg \frac{1}{(Dr)^2}$  و  $V_{ee} \gg \frac{1}{(Dr)}$

5-1. کدام یک از عبارتهای زیر چگالی الکترونی ( $n$ ) را با بردار موج فرمی ( $k_F$ ) برای یک گاز الکترونی بدون برهم‌کنش نشان می‌دهد.

الف)  $k_F = (3p^2n)^2$       ب)  $k_F = (3p^2n)^3$

ج)  $k_F = (3p^2n)^{1/3}$       د)  $k_F = (3p^2n)^{1/2}$

6-1. کدام عبارت زیر صحیح نمی‌باشد.

(الف) تابع موج الکترون در بلور رفتار تناوبی به‌ازای هر بردار انتقال  $T$  دارد.

(ب) تابع موج الکترون‌های مغزی‌اتم‌ها در بلور، بلوخ گونه می‌باشد.

(ج) تابع موج بلوخ در بلور می‌توان بسط فوریه داده شود.

(د) هر سه گزینه.

7-1. کدام یک از عبارت‌های زیر از حل معادله شرودینگر برای یک پتانسیل تناوبی صحیح می‌باشد. در عبارت‌های زیر  $V_G$  ضرایب بسط فوریه پتانسیل و  $C_K$  ضرایب انتگرال فوریه تابع موج بلوخ است.

$$\frac{\hbar^2 K^2}{2m} - E_{K+G} + V_G C_K = 0 \quad (\text{الف})$$

$$\frac{\hbar^2 K^2}{2m} - E_K + V_G C_{K-G} = 0 \quad (\text{ب})$$

$$\frac{\hbar^2 (K-G)^2}{2m} - E_K + V_G C_{K-G} = 0 \quad (\text{ج})$$

$$\frac{\hbar^2 (K+G)^2}{2m} - E_K + V_G C_{K-G} = 0 \quad (\text{د})$$

8-1. کدام یک از عبارت‌های زیر از خصوصیت تابع موج و انرژی نواری الکترون در

بلور است. در عبارت‌های زیر  $k$  و  $k\phi$  دو بردار موجی هستند که در منطقه اول

بریلوین واقع می‌باشند و اندیس  $n$  و  $G$  به ترتیب شماره نوار انرژی و بردار انتقال در

شبکه معکوس هستند.

$$E_{n,k} = E_{n,k+G} \text{ و } \psi_{n,k}(\mathbf{r}) = \psi_{n,k+G}(\mathbf{r}) \quad (\text{الف})$$

$$E_{n,k} = E_{n,k\phi} \text{ و } \psi_{n,k}(\mathbf{r}) = \psi_{n,k\phi}(\mathbf{r}) \quad (\text{ب})$$

$$E_{n,k} = E_{n,k+G} \text{ و } \psi_{n,k}(\mathbf{r}) = \psi_{n,k\phi}(\mathbf{r}) \quad (\text{ج})$$

$$E_{n,k}^{\mathbf{r}} = E_{m,k+\mathbf{G}}^{\mathbf{r}} \text{ و } y_{n,k}^{\mathbf{r}}(\hat{\mathbf{r}}) = y_{m,k}^{\mathbf{r}}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{د})$$

9-1. با تقریب الکترون تقریباً آزاد مقدار گاف انرژی در مرز منطقه بریلوئن

(الف) متناسب است با  $|V_{G_1}^{\mathbf{r}}|^2$  (ب) متناسب است با  $|V_{G_1}^{\mathbf{r}}|$   
 (ج) متناسب است با  $2|V_{G_1}^{\mathbf{r}}|$  (د) متناسب است با  $2|V_{G_1}^{\mathbf{r}}|^2$   
 در عبارت‌های بالا  $V_{G_1}^{\mathbf{r}}$  اولین ضریب بسط فوریه پتانسیل یک شبکه بلوری است.

10-1. با استفاده از روش اختلال (رابطه (1-54)) کدام عبارت برای تقریب الکترون تقریباً آزاد مناسب است.

(الف) به‌ازای  $|V| \gg |E_{k-\mathbf{G}}^{\mathbf{r}} - E_k^{\mathbf{r}}|$  (ب) به‌ازای  $|V| \ll |E_{k-\mathbf{G}}^{\mathbf{r}} - E_k^{\mathbf{r}}|$   
 (ج) به‌ازای  $|V| \ll |E_{k-\mathbf{G}}^{\mathbf{r}} - E_k^{\mathbf{r}}|$  (د) بستگی به شکل تابع پتانسیل شبکه دارد.  
 11-1. ضرایب بسط فوریه  $V(q)$  با یک پتانسیل شبکه‌ای  $V(\hat{\mathbf{r}})$  با بردار انتقال  $\hat{\mathbf{T}}$  برابر است با:

(الف) فقط به‌ازای  $\hat{\mathbf{q}} = \hat{\mathbf{G}}$ ،  $V(q)$  پاسخ غیر صفر دارد.

(ب)  $V(q)$  یک تابع پیوسته از  $q$  است

$$V(q) = -\frac{4pz e^2}{q^2} \quad (\text{ج})$$

(د)  $V(q) = -\frac{4pz e^2}{q^2} \exp(-aq)$  که  $a$  متناسب عکس شعاع استتار هریون می‌باشد.

12-1. مدل تنگ بست برای کدام دسته از الکترون‌ها در بلور کاربرد دارند.

(الف). الکترون‌های رسانش.

(ب) برای آن دسته از الکترون‌ها که اربیتال‌شان دارای همپوشانی بسیار کمی با همسایگان دارند.

(ج) برای آن دسته از الکترون‌ها که اربیتال‌شان دارای همپوشانی زیادی با همسایگان دارند.

(د) برای کلیه دسته الکترون‌ها می‌توان به کار برده شود.

13-1. اگر نوار انرژی یک زنجیره تک اتمی با اربیتال  $s$  و با فاصله شبکه  $a$  به صورت

$$E(k) \approx E_0 + 2\gamma \cos(ka)$$

(یا پرش)، پهنای نوار انرژی برای است با:

الف)  $4|\gamma|$       ب)  $\sqrt{2}|\gamma|$

ج)  $2|\gamma|$       د)  $\frac{|\gamma|}{\sqrt{2}}$

14-1. رابطه‌ی جرم مؤثر الکترون با تابع نوار انرژی  $E(k)$  برابر است با:

الف) همیشه مقداری است ثابت و مثبت      ب)  $m^* = \hbar^2 d^2E(k)/dk^2$

ج)  $m^* = \hbar^2 dE(k)/dk$       د)  $m^* = \frac{\hbar^2}{d^2E(k)/dk^2}$

15-1. کدام یک از موارد زیر در خصوص ترسیم سطح فرمی صحیح نمی‌باشد.

الف) برهم‌کنش الکترون با پتانسیل دوره‌ای بلور، باعث ایجاد شکاف انرژی در مرزهای منطقه بریلوئن می‌شود.

ب) سطح فرمی، بایستی در هنگام عبور از مرزهای مناطق بریلوئن، مرزها را عمودی قطع کند.

ج) پتانسیل شبکه یونی باعث گرد شدن گوشه‌های تیز سطوح می‌شد.

د) حجم کل محصور شده به وسیله‌ی سطح فرمی به جزئیات برهم‌کنش شبکه بستگی دارد.

16-1. کدام یک از روش‌های تجربی زیر می‌توان سطح فرمی را اندازه‌گیری نمود.

الف) تشدید سیکلوترونی،      ب) نمایه کامپتون،

ج) دوهااس-ون‌الفن      د) هرسه

17-1. کدام یک از عبارات‌های زیر ما بین دو سطح جاروب شده در فضای واقعی  $S$  و

اندازه حرکت  $A$  توسط الکترون در حضور میدان مغناطیسی سطح می‌باشد.

الف)  $S_n = (\hbar/eB)^2 A_n$       ب)  $A_n = (\hbar/eB)^2 S_n$

ج)  $A_n = (\hbar/eB) S_n$       د)  $S_n = (\hbar/eB) A_n$

- 18-1. کدام رابطه در خصوص جرم مؤثر سیکلوترونی صحیح می باشد.
- الف) متناسب با تغییرات سطح جاروت شده در فضای اندازه حرکت است .
  - ب) متناسب با عکس تغییرات سطح جاروت شده در فضای اندازه حرکت است.
  - ج) متناسب با جذر میدان مغناطیس است.
  - د) متناسب با عکس جذر میدان مغناطیس است.

## فصل دوم

### نیم‌رساناها، نارساناها (دی‌الکتریک‌ها)

#### و خواص نوری جامدات

##### هدف کلی

این فصل از دو بخش اصلی تشکیل شده است. بخش اول به معرفی ساختار الکترونی نیم‌رسانا و نارساناها (دی‌الکتریک‌ها) و بخش دوم به خواص نوری جامدات می‌پردازد.

##### هدف‌های یادگیری

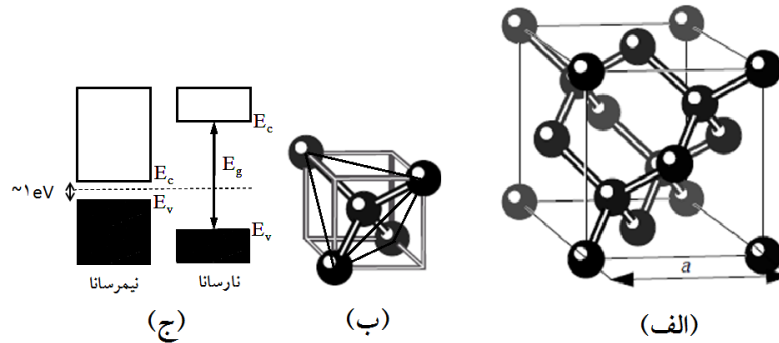
دانشجو پس از مطالعه این فصل باید،

1. با ساختارهای بلوری و الکترونی نیم‌رسانا آشنا شود.
2. با ساختار الکترونی نیم‌رسانا با ناخالصی‌های بخشنده و پذیرنده آشنا شود.
4. با حفره به عنوان حامل جریان الکتریکی در نیم‌رسانا آشنا شود.
6. با وابستگی پتانسیل شیمیایی به چگالی ناخالصی و دما آشنا شود.
7. با تابع توزیع پرشدگی الکترون و حفره در نیم‌رساناهای ذاتی و غیرذاتی آشنا شود.
9. با شعاع پیوندی و انرژی پیوندی الکترون و حفره مقید شده به اتم‌های ناخالصی‌شان (به ترتیب بخشنده و پذیرنده) آشنا شود.
8. با اثر هال در نیم‌رسانا و وابستگی آن به چگالی الکترون و حفره آشنا شود.
9. با خواص نوری جامدات (رسانا، نیم‌رسانا و نارساناها) و انواع گسیل‌ها مستقیم و غیر مستقیم در نیم‌رساناها آشنا شود.
10. با مفاهیم جذب نوری (قانون طلایی فرمی) و روابطه جذب در نیم‌رساناها آشنا شود.
11. ترازهای اکسیتونی در نیم‌رساناها آشنا شوند.



## مقدمه

همان‌طور که در فصل‌های قبل اشاره شد، جامدات به طور ساده به دو دسته رسانا و نارسانا تقسیم می‌شوند.<sup>1</sup> نارساناها، موادی هستند که نوار رسانش آن‌ها توسط یک گاف چند الکترون ولتی از نوار ظرفیت‌شان جدا شده‌اند. به نارساناها، عایق یا دی‌الکتریک نیز گفته می‌شوند. در صورتی که نارساناها، گاف انرژی کوچکی (در حدود یک الکترون‌ولت) داشته باشند، نیم‌رسانا نامیده می‌شوند (شکل (1-2) ج). با توجه به کاربردهای بسیار ارزشمندی که نیم‌رساناها در صنعت الکترونیک دارند، این فصل به طور اجمالی قصد دارد به خواص الکترونی منحصر به فرد این دسته از مواد به پردازد.



شکل 1-2. الف) ساختاری الماس گونه ب) هر اتم با 4 همسایه در ساختار تتراهیدرال گونه پیوند دارد ج) طرحواره‌ای از نوار انرژی نارساناها و نیم‌رساناها.

## 1-2 نیم‌رساناها

1-1-2 ساختار بلورین نیم‌رساناها  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 

از مهم‌ترین نیم‌رساناها می‌توان به بلور سیلیسیوم یا ژرمانیوم اشاره نمود. این جامدات بلوری، ساختاری الماس گونه با پیوند کوالانسی از نوع  $sp^3$  دارند (شکل (1-2)). برخی از نیم‌رساناها می‌توانند ترکیبی از دو عنصر باشند؛ مانند GaAs و InSb که ساختاری زینک بلاند<sup>2</sup> دارند و برخی دیگر ترکیبات سه عنصری مانند AlGaAs و

1. تقسیمات دقیق‌تری دیگری مانند نیم‌رسانا و نیم‌فلز نیز وجود دارد ولی در این جا هدف، ساده‌ترین بیان از نقطه نظر رسانندگی و عدم رسانندگی الکتریکی می‌باشد.  
2. ساختار الماسی با دو پایه اتمی متفاوت.

$\text{InGaAs}$ ، همچنین ترکیبات آلیاژگونه سه‌تایی مانند  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  و  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  و چهارتایی مانند  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$  و  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_{1-y}\text{N}_y$  می‌توانند از عناصری که در جدول (1-2) در کادر مشخص شده است، ساخته شوند.

هرچند که کربن با سیلیسیوم و ژرمانیم در گروه چهارم جدول تناوبی هم‌گروه می‌باشد، ولی ساختار الماس‌گونه آن باعث می‌شود تا نارسانای با گاف انرژی در حدود  $5/3$  الکترون‌ولت را ایجاد نماید، در صورتی که عناصر هم‌گروهش با همین ساختار، گاف انرژی از مرتبه حدود یک الکترون‌ولت می‌باشد. به عنوان مثال سیلیسیوم دارای گاف انرژی از مرتبه  $1/12$  الکترون‌ولت و ژرمانیوم از مرتبه  $0/72$  الکترون‌ولت می‌باشند.

نکته 1-2: ساختار الکترونی هر اتم از گروه چهارم برای مثال اتم سیلیسیوم به صورت  $[\text{Ne}]3s^23p^2$  و برای گروه سوم مانند گالیوم  $[\text{Ar}]3d^{10}4s^23p^1$ ، و برای گروه پنجم مانند آرسنیک  $[\text{Ar}]3d^{10}4s^23p^3$

جدول 1-2. جدول تناوبی

جدول تناوبی عناصر																				
1	2																	0		
IA	IIA												IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA			
1 H													5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne		
3 Li	4 Be											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar			
11 Na	12 Mg	III B	IV B	V B	VI B	VII B	VIII			IX	X	XI	XII							
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr			
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe			
55 Cs	56 Ba	57 *La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn			
87 Fr	88 Ra	89 +Ac	104 Rf	105 Ha	106 Sg	107 Nh	108 Hs	109 Mt	110	111	112	113								

## 2-1-2 ساختار الکترونی نیم‌رسانا

در صفر کلون (حالت پایه سیستم) نوار ظرفیت نیم‌رساناها کاملاً پر و نوار رسانش کاملاً خالی از الکترون می‌باشند. این دو نوار انرژی ظرفیت و رسانش با یک گاف از مرتبه تقریباً یک الکترون‌ولت از یکدیگر جدا می‌باشند. در دمای بالا، نیم‌رساناها به دلیل کوچک بودن گاف انرژی‌شان رفتار رسانندگی از خود نشان می‌دهند. به این معنی

که با جذب انرژی حرارتی  $k_B T$  توسط الکترون‌های ظرفیت، آن‌ها را به نوار رسانش برانگیخته می‌کنند (شکل (2-2)). این فرآیند گذار، باعث می‌شود تا حفره‌هایی در نوار ظرفیت ایجاد گردد. نکته قابل توجه در این است که این فرآیند تولید زوج (الکترون حفره)، باعث افزایش رسانندگی می‌شود زیرا هر دو الکترون و حفره تولید شده به ترتیب در نوارهای رسانش و ظرفیت نقش رسانندگی را در نیم‌رسانا بازی می‌کنند (شکل (2-2)).

با توجه به فرمیون بودن الکترون، تابع پرشدگی هر حالت انرژی از نوار ظرفیت یا نوار رسانش در دمای  $T$  با تابع توزیع فرمی-دیراک مشخص می‌گردد. برای تعیین اندازه گاف انرژی، کافی است فاصله بین پایین‌ترین لبه نوار رسانش از بالاترین لبه نوار ظرفیت را محاسبه نمود. راحت‌ترین و احتمال‌ترین گذار الکترونی مربوط به گذار الکترون‌هایی است که حول وحوش بالاترین لبه نوار ظرفیت به پایین‌ترین لبه نوار رسانش صورت می‌پذیرد. بنابراین اکثریاب خواص الکترونی نیم‌رسانا مربوط به این ناحیه از گذار می‌باشد. از این رو در ادامه فقط از نواحی ماکزیمم نوار ظرفیت و مینیمم نوار رسانش برای توصیف خواص الکتریکی نیم‌رساناها مورد توجه قرار خواهیم داد. معادله پاشندگی نوار انرژی در نواحی اکستریم  $E(k)$  با تقریب خوبی سهمی‌گون در نظر گرفته می‌شود.

نوار انرژی رسانش در لبه مینیمم به مانند الکترون آزاد با جرم مؤثر مثبت  $m_e^*$  و بار الکتریکی منفی می‌باشد (رابطه (1-2)).

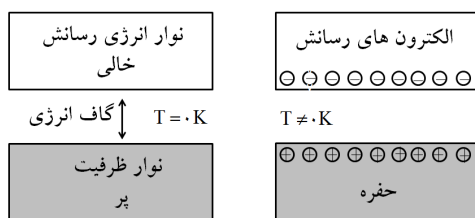
$$E = E_G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \quad \text{انرژی الکترون در نوار رسانش} \quad (1-2)$$

نوار ظرفیت به دلیل ایجاد حفره در آن می‌توان جریان غیر صفری داشته باشد (زیرا نوار کاملاً پر نمی‌باشد) و الکترون در آن نوار به مانند ذره‌ای با جرم، بار و انرژی منفی در حضور میدان الکتریکی دیده می‌شود (شکل (2-2)).

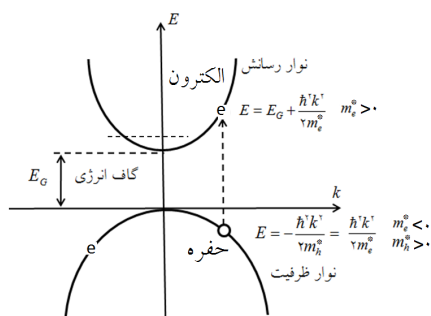
الکترون در نوار ظرفیت انرژی، مطابق شکل (2-2)، به صورت رابطه (2-2) می‌باشد.

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \quad m_e^* < 0^1 \text{ منفی با جرم منفی}$$

با معرفی جرم مؤثر مثبت  $m_h^*$  که برابر است با قدرمطلق جرم مؤثر منفی الکترون در نوار ظرفیت  $m_e^* < 0$ ، انرژی نوار ظرفیت الکترون (رابطه (2-2)) به صورت  $E = -\hbar^2 k^2 / 2m_h^*$  می‌توان نوشت.



(الف)



(ب)

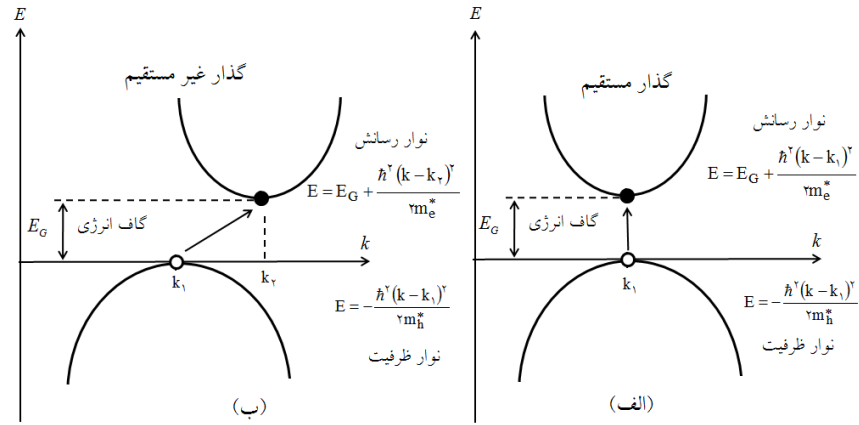
شکل 2-2. الف) طرحواره‌ای از یک نیم‌رسانا بدون برانگیختگی الکترونی در دمای  $T=0$  و با برانگیختگی الکترونی در دمای  $T=0$  ب) گذار الکترون از نوار رسانش به نوار ظرفیت.

با انتخاب سطح انرژی صفر در بالاترین نقطه نوار ظرفیت و  $E_G$  به عنوان گاف انرژی سیستم (مطابق شکل (2-2) ب)، الکترون‌های لبه نوار انرژی ظرفیت دارای جرم منفی، بار منفی و انرژی منفی می‌باشند که می‌توان رفتار الکترونی آن‌ها را با ذراتی با

1. زیرا طبق رابطه‌ی (97-1) مشتق دوم انرژی منفی می‌باشد.

جرم مؤثر مثبت  $m_h^*$ ، بار مثبت  $+e$  و انرژی مثبت  $E = \hbar^2 k^2 / 2m_h^*$  به نام حفره معادل دانست که در ادامه به توصیف دلیل این معادل سازی خواهیم پرداخت.

• محتملترین گذارها در نقاط اکسترمم به دو صورت مستقیم و غیر مستقیم مطابق شکل (3-2) اتفاق می افتد که در صفحه (169) بیشتر به آن خواهیم پرداخت.



شکل 3-2. گذار الکترون از نوار رسانش به نوار ظرفیت (الف) گذار مستقیم و (ب) گذار غیر مستقیم.

برای معرفی مشخصات نوار انرژی شبه ذرات حفره به نکات زیر می پردازیم:  
 1) وجود تقارن مرکزی در جامدات بلورین  $\hat{T} @ \hat{T}$  باعث می شود همین تقارن نیز در فضای اندازه حرکت حاکم شود. از این رو جمع برداری اندازه حرکت بلورین در هر نوار انرژی برابر صفر می شود  $\sum_i \hbar \mathbf{k}_i = 0$ . در دمای صفر مطلق هر حالت پر (توسط الکترونی با بردار موج  $\mathbf{k}$ ) می توان حالت پر دیگری با همان انرژی ولی با اندازه حرکت قرینه  $-\mathbf{k}$  یافت. با همین استدلال، می توان نتیجه گرفت که جمع سرعت الکترون ها در یک نوار انرژی پر برابر صفر است که نتیجه ی جریان صفر را می دهد.

$$\mathbf{J} = (-e) \sum_i^N \mathbf{v}_i = 0$$

با در نظر گرفتن یک گذار الکترونی (الکترون لازم با بردار  $\mathbf{k}_j$  از نوار ظرفیت به نوار رسانش شکل (2-3))، عبارت جمع روی بردار سرعت و اندازه حرکت بلورین در نوار ظرفیت غیر صفر می‌شود. مقدار جریان به اندازه جریان یک الکترون  $(-e)\mathbf{V}_j$  از عبارت جمع جریان کل در نوار ظرفیت کاسته می‌شود (رابطه (2-3)).

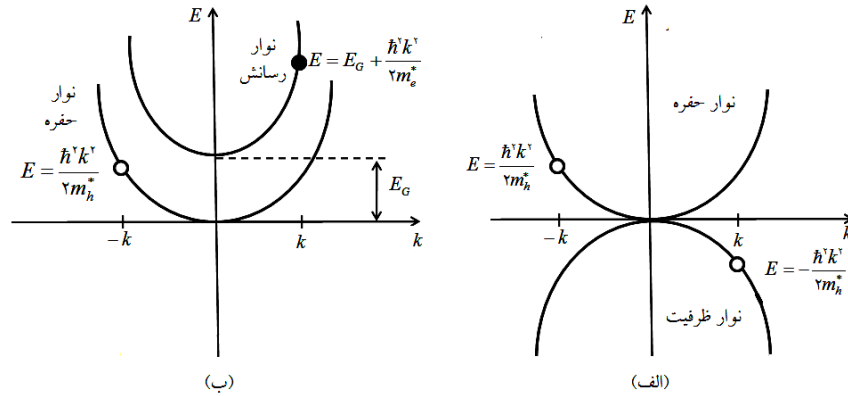
$$\mathbf{J} = (-e) \sum_i^N \mathbf{r}_i \mathbf{V}_i - (-e) \mathbf{V}_j = (e) \mathbf{V}_j \quad (3-2)$$

با صفر بودن قسمت اول عبارت (2-3)، مقدار جریان کل نوار (غیر پر) برابر خواهد بود با  $\mathbf{J} = (+e) \mathbf{V}_j$  که آن معادل با جریان حاصل از تولید بار مثبت با سرعت  $\mathbf{V}_j$  است. همان‌طور که در بالا به آن اشاره شد جمع برداری بردار موج هر نوار انرژی برابر صفر است  $\mathbf{a} \mathbf{k}_i = 0$  که با جداسازی یک بردار موج از این جمع به صورت  $\mathbf{a} \mathbf{k}_i + \mathbf{k}_j + (-\mathbf{k}_j) = 0$ ، می‌توان آن را بازنویسی نمود. ولی جمله اول جمع به دلیل تقارن  $\mathbf{a} \mathbf{k}_i = 0$  همچنان برابر صفر می‌باشد. با گذار یک الکترون به نوار رسانش، یک الکترون با بردار  $\mathbf{k}_j$  از نوار ظرفیت حذف می‌شود، بنابراین عبارت جمع بالا را می‌توان به صورت  $\mathbf{a} \mathbf{k}_i + 0 + (-\mathbf{k}_j) = 0$  نوشت که با صفر بودن جمله اول  $\mathbf{a} \mathbf{k}_i = 0$ ، جمع بردار موج یک نوار فاقد یک الکترون با قرینه بردار موج الکترون گذار یافته برابر است. یعنی حفره‌ای با اندازه حرکت  $-\mathbf{k}_j$  در نوار ظرفیت ایجاد می‌شود (شکل (2-4)).

در فرآیند تولید شبه ذرات (الکترون - حفره)، هر یک از شبه ذرات با توجه به جذب انرژی  $D$ ، دارای انرژی مثبتی هستند. حداقل مقدار انرژی لازم  $D$  برای یک گذار مستقیم مطابق شکل (2-2) برابر است با گاف انرژی ما بین نوار ظرفیت و رسانش می‌باشد (در گذار مستقیم). با توجه به شکل (2-2) به‌ازای گذارهای دور از نقاط اکسترمم انرژی لازم برابر است با:

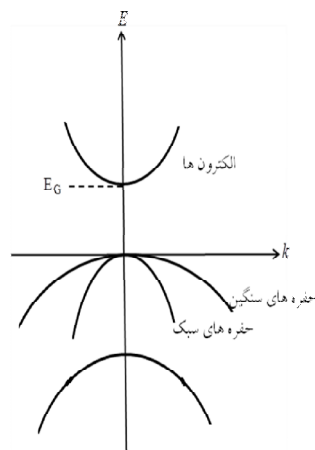
$$D = E_G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} = E_G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} \quad (4-2)$$

در رابطه (4-2)  $\hbar^2 k^2 / 2m_e^*$  و  $\hbar^2 k^2 / 2m_h^*$  به ترتیب می‌توان انرژی نواری شبه ذرات الکترون و حفره با جرم‌های مؤثر  $m_e^*$  و  $m_h^*$  نامبرد. دو جمله اول رابطه (4-2) مربوط به انرژی الکترون در نوار رسانش (با تعریف مثبت نوار  $m_e > 0$  طبق رابطه‌ی (1-97)) و جمله سوم مربوط به انرژی حفره که با توجه به مثبت بودن انرژی حفره، جرم مؤثر حفره  $m_h^*$  نیز بایستی مثبت باشد. از این رو در این جا نوار حفره نیز بایستی دارای تعریف رو به بالا داشته باشد (شکل (4-2) ب).



شکل 4-2. الف) نوار انرژی حفره به دست آمده از تقارن مرکزی نوار انرژی ظرفیت. ب) نوار انرژی حفره و رسانش (الکترون).

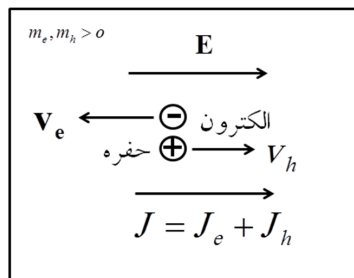
بنابراین از نتایج بالا به طور خلاصه می‌توان نتیجه گرفت، حفره، شبه ذره‌ای با بار مثبت، جرم مؤثر مثبت و انرژی مثبت می‌باشد. اندازه‌ی بار حفره همان بار الکترون و جرم مؤثر آن برابر است با قدرمطلق جرم مؤثر الکترون در نوار ظرفیت می‌باشد. بنابراین نوار انرژی حفره (با مشخصات گفته شده در بالا) را می‌توان با تبدیل تقارن مرکزی نوار انرژی ظرفیت نسبت به نقطه ماکزیمم آن به دست آورد (شکل (4-2) الف).



شکل 2-5. طرحواره‌ای از نوار انرژی حفره‌های سبک و سنگین.

**نکته 2-2:** تولید این شبه ذرات (الکترون و حفره) تشکیل یک حالت پیوندی هیدروژن گونه (که به دور مرکز جرمشان می‌چرخند) می‌شود، آن را اکسیتون می‌نامند که در بخش (2-4) به آن خواهیم پرداخت.

**نکته 2-3:** هرچه نوار حفره بازتر باشد مشتق دوم آن کوچک‌تر و با توجه به رابطه (1-97) جرم مؤثر آن نیز بزرگتر خواهد بود که به آن حفره سنگین نامیده می‌شوند (شکل (2-5)).



**شکل 2-6.** حضور الکترون و حفره با جرم‌های مثبت در یک میدان الکتریکی ثابت که در آن  $\vec{v}_h$  و  $\vec{v}_e$  به ترتیب سرعت الکترون و حفره می‌باشد که جریان‌های همسوی  $\vec{J}_e$  و  $\vec{J}_h$  را به وجود می‌آورد.



در دمای بالا جریان حاصله از یک میدان الکتریکی ثابت در یک نیم‌رسانا، ناشی از هر دو حاملین جریان (الکترون و حفره) می‌باشد. با در نظر گرفتن الکترون در نوار رسانش و حفره در نوار حفره (تقارن مرکزی نوار ظرفیت) می‌توان سهم جریان هر یک را محاسبه نمود. نکته مهم در این است که هر دو حاملین جریان در حضور میدان با توجه به علامت بارشان، جرمشان و نیروی خارجی اعمالی بر آن‌ها، جریان‌های هم‌سویی را در نیم‌رسانا ایجاد می‌کنند (شکل (6-2)).

با اعمال یک میدان الکترومغناطیسی و با در نظر گرفتن نیروهای اتلافی طبق نظریه درود (رابطه (4-1)) ناشی از پراکندگی‌ها، می‌توان معادلات حرکت را برای الکترون و حفره به صورت زیر نوشت:

$$m_e^* \frac{d\mathbf{v}_e}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v}_e \times \mathbf{B}) - m_e^* \frac{\mathbf{v}_e}{t_e} \quad (5-2)$$

$$m_h^* \frac{d\mathbf{v}_h}{dt} = +e(\mathbf{E} + \mathbf{v}_h \times \mathbf{B}) - m_h^* \frac{\mathbf{v}_h}{t_h} \quad (6-2)$$

که در رابطه (5-2) و (6-2)  $\mathbf{v}_e$  و  $\mathbf{v}_h$  به ترتیب سرعت‌های گروه الکترون و حفره و  $t_e$  و  $t_h$  زمان‌های پراکندگی الکترون و حفره می‌باشند. با در دست داشتن نوار انرژی‌شان هر دو حاملین  $E_e(k)$  و  $E_h(k)$  می‌توان با استفاده از رابطه  $\mathbf{v}_{e,h} = (1/\hbar)\nabla_k E_{e,h}(k)$  و رابطه (1-97) به ترتیب سرعت و جرم‌های مؤثر الکترون و حفره را به دست آورد.

بحث انرژی فرمی در فلزات که قبلاً به آن اشاره شد جایی است که حالت‌های انرژی پر سیستم را از حالت‌های خالی از الکترون، در دمای صفر کلونین جدا می‌سازد<sup>1</sup>. در نیم‌رسانا در دمای صفر کلونین نوار ظرفیت کاملاً پر و نوار رسانش کاملاً خالی است، بنابراین انرژی فرمی (یا پتانسیل شیمیایی<sup>2</sup>) بایستی در ناحیه‌ای از فضای گاف انرژی باشد.

1. انرژی فرمی همان پتانسیل شیمیایی  $m$  سیستم در دمای صفر می‌باشد.  
 2. همان‌طور که از مکانیک آماری به یاد داریم، پتانسیل شیمیایی میزان قید سیستم به تعداد ذرات را نشان می‌دهد. با توجه به تعریف پتانسیل شیمیایی  $m = (\hbar E / \hbar N)_{S,V}$ ، هرچه  $m$  بزرگ‌تر باشد میزان انرژی لازم برای تغییر تعداد ذرات زیاد می‌باشد از این رو سیستم نسبت به تعداد ذرات پایدارتر است. برای یک سیستم فوتونی که دارای پتانسیل شیمیایی صفر است، سیستم هیچ‌گونه قیدی در تعداد تولید فوتون‌ها ندارد، بنابراین به هر تعداد دلخواه با تابع توزیع خاص خود می‌تواند فوتون خلق یا فنا شود.

**نکته 2-4:** نیم‌رسانا با هیچ‌گونه ناخالصی را نیم‌رسانای ذاتی، همراه با ناخالصی را نیم‌رسانای غیرذاتی می‌نامند. در ادامه نشان خواهیم داد محل پتانسیل شیمیایی در یک نیم‌رسانای ذاتی نه فقط به نسبت جرم‌های مؤثر حفره و الکترون بستگی دارد بلکه به دما نیز وابسته است. همچنین نشان خواهیم داد که در نیم‌رسانای غیر ذاتی علاوه بر نسبت جرم‌های مؤثر و دما به چگالی ناخالصی اضافه شده نیز بستگی دارد.

به دلیل کوچک بودن مقدار گاف انرژی در نیم‌رساناها، در یک تعادل گرمایی  $T$ ، الکترون‌های لبه‌ی ماکزیمم نوار ظرفیت به الکترون‌های لبه‌ی مینیمم نوار رسانش گذار می‌نماید. واضح است در نیم‌رسانای ذاتی چگالی الکترون‌های گذار شده در نوار رسانش  $n$  با چگالی حفره پدیدار شده در نوار ظرفیت  $p$ ، برابر می‌باشد. هر چه دما افزایش داده شود، مقادیر  $n$  و  $p$  افزایش می‌یابد. که در شرایط تعادلی حاصل ضرب این دو چگالی، برابر مربع چگالی ذاتی  $n_i$  سیستم می‌باشد.

$$np = n_i^2(T) \quad (7-2)$$

### 2-1-3 محاسبه چگالی الکترون $n$ و حفره $p$ در نوارهای رسانش و ظرفیت

همانطور که قبلاً به آن اشاره شد، محتمل‌ترین گذارها در نواحی اکستریم‌ها در هر دو نوار (ظرفیت و رسانش) صورت می‌پذیرد بنابراین با تقریب بسیار خوبی می‌توان نوار انرژی‌شان را به مانند الکترون آزاد سهمی‌گون در نظر گرفت (شکل (2-3)) در ادامه نشان می‌دهیم چگالی حالت انرژی  $D(E)$  برای هر نوار سهمی‌گون به

$$\text{شکل } \epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \text{، متناسب با مجذور انرژی می‌باشد (رابطه (2-9)).}$$

طبق تعریف چگالی حالت انرژی<sup>1</sup> به صورت  $D(E) = \sum_i d(E - \epsilon_i)$  که در آن  $\epsilon_i$  انرژی هر حالت که در اینجا با توجه به سهمی‌گون در نظر گرفتن نوار انرژی آن از الکترون آزاد-گونه به  $\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$  می‌باشد، می‌توان با توجه به شبه پیوسته بودن این ویژه حالت‌ها عبارت جمع به صورت انتگرال بازنویسی نمود (رابطه (2-8)).

$$D(E) = \sum_i d(E - \epsilon_i) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} d(E - \epsilon(\mathbf{k})) \quad (8-2)$$

1. Density of state (DOS)

در رابطه‌ی (8-2) عبارت جمع  $\sum_i \mathbf{a}_i$  به عبارت انتگرالی  $\frac{V}{(2\pi)^3} \int \mathbf{a}(\mathbf{k}) d\mathbf{k}$  تبدیل شده است. با فرض تبهگنی اسپینی حالت‌های انرژی (به صورت یک ضریب 2) و عبارت  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ ، عبارت انتگرالی (8-2) به صورت زیر نوشته و محاسبه می‌شود.

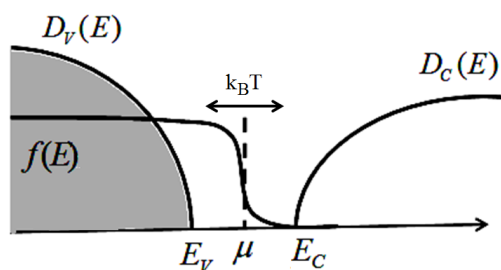
$$\begin{aligned}
 D(E) &= \frac{V}{8\pi^3 \hbar^3} \int_0^\infty \sum_{\mathbf{k}} W_{\mathbf{k}}^2 dp d\mathbf{k} - \frac{p^2}{2m} \\
 &= \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \sum_{\mathbf{k}} dp d\mathbf{k} - \frac{p^2}{2m} \\
 &= \frac{mV}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty dp d\mathbf{k} - \frac{p^2}{2m} \\
 D(E) &= \frac{mV}{\pi^2 \hbar^3} p = \frac{1}{2\pi^2} \frac{2m^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{E} \quad E \geq 0 \quad (9-2)
 \end{aligned}$$

رابطه (9-2) نشان می‌دهد که چگالی حالت برای نوار انرژی سهمی‌گون با جذر انرژی متناسب می‌باشد. حال با توجه به سهمی در نظر گرفتن نوارهای انرژی ظرفیت و رسانش در نقاط اکسترمم‌شان، ولی با این تفاوت که نوار ظرفیت با تعقر به سمت پایین با لبه انرژی  $E_V$  و نوار رسانش با تعقر به سمت بالا با لبه انرژی  $E_C$ ، چگالی حالت‌های آن‌ها طبق رابطه‌ی (9-2) به صورت رابطه (10-2) و (11-2) داده می‌شوند.

$$D_V(E) = \frac{V}{2\pi^2} \frac{2m_h^*}{\hbar^3} (E_V - E)^{1/2} \quad E \leq E_V \quad (10-2)$$

$$D_C(E) = \frac{V}{2\pi^2} \frac{2m_e^*}{\hbar^3} (E - E_C)^{1/2} \quad E \geq E_C \quad (11-2)$$

در رابطه‌ی (11-2) چگالی حالت  $m_e^*$  جرم‌های مؤثر الکترون در نوار رسانش که مقداری مثبت و برای نوار حفره همانطور که در بالا گفته شد می‌توان همان نوار ظرفیت با جرم  $m_h^* > 0$  را در نظر گرفته شود.



شکل 2-7. چگالی حالت نوار ظرفیت  $D_V(E)$  و رسانش  $D_C(E)$  و تابع پرشدگی.

که شکل (2-7)  $D_V(E)$  و  $D_C(E)$  به ترتیب چگالی حالت نوارهای انرژی رسانش و ظرفیت می‌باشند که اختلاف مقدار دو لبه‌ی انرژی نوارهای رسانش و ظرفیت  $(E_C - E_V)$ ، معرف گاف انرژی  $E_G$  می‌باشد (شکل (2-7)).

احتمال پرشدگی هر حالت از حالت‌های انرژی در نوار رسانش با تابع توزیع فرمی-دیراک  $f(E) = 1/[1 + e^{(E-m)/k_B T}]$  و عدم پرشدگی هر حالت از حالت‌های نوار ظرفیت (یا احتمال حضور حفره در آن حالت از انرژی) با تابع  $[1 - f(E)] = [1 + e^{-(E-m)/k_B T}]$  داده می‌شود که در آن  $m$  پتانسیل شیمیایی است.

وجود گاف انرژی در نیم‌رساناها، باعث فاصله افتادن بین حالت‌های انرژی نوارهای رسانش و ظرفیت از پتانسیل شیمیایی (که در ناحیه میانی گاف انرژی واقع است) می‌شود. از طرفی با توجه به انرژی گرمایی در دمای اتاق  $k_B T \gg 0.026 \text{ eV}$  که در این محدوده‌ی دمای نامساوی  $E - m \gg k_B T$  برقرار می‌باشد که تابع فرمی-دیراک به تابع توزیع بولتزمن  $f(E) = e^{-(E-m)/k_B T}$  تبدیل می‌یابد.

با افزایش دما، الکترون‌های نوار ظرفیت به نوار رسانش گذار می‌کنند. از این رو در ادامه چگالی الکترونی  $n$  و چگالی حفره  $p$  ایجاد شده در نوار ظرفیت و رسانش محاسبه می‌گردد.

**محاسبه‌ی چگالی الکترونی  $n$  در نوار رسانش:** با استفاده از چگالی حالت نوار رسانش و ظرفیت  $(D_V(E)$  و  $D_C(E))$  می‌توان چگالی ذاتی الکترون و حفره  $(n$  و  $p)$  را محاسبه نمود. حاصل ضرب چگالی تعداد حالت انرژی نوار رسانش  $D_C(E)dE$  (در یک بازه‌ی انرژی  $E$  و  $E + dE$ ) در احتمال پرشدگی هر حالت از انرژی  $f(E)$  و جمع

روی کلیه انرژی ناحیه رسانش، تعداد الکترون‌های  $N_e$  رسانش را نتیجه می‌دهد (رابطه‌ی (12-2)).

$$dN_e = f(E) D_c(E) dE$$

چگالی تعداد الکترون‌ها  $n$  برابر است با:

$$n = \frac{N_e}{V} = \frac{1}{V} \int_{E_C}^{\infty} \frac{V}{2\pi^2} \frac{m_e^* \hbar^{-3/2}}{\hbar^2} (E - E_C)^{1/2} e^{-(E - E_C)/k_B T} dE$$

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \frac{m_e^* \hbar^{-3/2}}{\hbar^2} e^{E_C/k_B T} \int_{E_C}^{\infty} (E - E_C)^{1/2} e^{-E/k_B T} dE$$

با در نظر گرفتن  $x = [(E - E_C)/k_B T]$  عبارت انتگرال بالا به صورت ساده زیر

نوشته می‌شود.

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \frac{m_e^* k_B T \hbar^{-3/2}}{\hbar^2} e^{(m_e E_C)/k_B T} \int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-x} dx$$

با استفاده از انتگرال گاما، حاصل انتگرال  $\int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-x} dx$  برابر  $\sqrt{\pi}/2$  است.

$$n = \frac{1}{4\pi^3} \frac{m_e^* k_B T \hbar^{-3/2}}{\hbar^2} e^{(m_e E_C)/k_B T}$$

$$N_C = \frac{1}{4\pi^3} \frac{m_e^* k_B T \hbar^{-3/2}}{\hbar^2} \quad (12-2)$$

$$n = N_C e^{(m_e E_C)/k_B T}$$

**محاسبه‌ی چگالی الکترونی  $p$  در نوار ظرفیت:** به صورت مشابه حاصل ضرب

چگالی تعداد حالت انرژی در نوار ظرفیت  $D_v(E)dE$  در یک بازه‌ی انرژی  $E$  و  $E + dE$  در احتمال عدم پرشدگی هر حالت از انرژی  $[1 - f(E)] = e^{(E - m)/k_B T}$  و جمع روی کلیه انرژی نوار ظرفیت، تعداد حفره‌ها را نتیجه می‌دهد (رابطه‌ی (13-2)).

$$dN_h = [1 - f(E)] D_v(E) dE$$

$$p = \frac{N_h}{V} = \frac{1}{2p^2} \frac{2m_h^* \frac{\hbar^3}{2\pi^2}}{\hbar^2} e^{-m/k_B T} \int_{E_V}^{E_V + E} (E_V - E)^{1/2} e^{E/k_B T} dE$$

با در نظر گرفتن  $y = [(E_V - E)/k_B T]$  عبارت انتگرال بالا به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$p = \frac{1}{2p^2} \frac{2m_h^* k_B T \frac{\hbar^3}{2\pi^2}}{\hbar^2} e^{-(m_h E_V)/k_B T} \int_0^{\infty} y^{1/2} e^{-y} dy$$

با استفاده از انتگرال گاما حاصل انتگرال  $\int_0^{\infty} y^{1/2} e^{-y} dy$  برابر  $\sqrt{\pi}/2$  است.

$$p = \frac{1}{4p^3} \frac{2m_h^* k_B T \frac{\hbar^3}{2\pi^2}}{\hbar^2} e^{-(m_h E_V)/k_B T}$$

$$N_h = \frac{1}{4p^3} \frac{2m_h^* k_B T \frac{\hbar^3}{2\pi^2}}{\hbar^2}$$

$$p = N_h e^{-(m_h E_V)/k_B T} \quad (13-2)$$

در یک نیم‌رسانای ذاتی چگالی تعداد الکترون‌های رسانش با چگالی تعداد حفره‌های ظرفیت برابر می‌باشد  $n = p$ . با برابر قرار دادن رابطه‌های (12-2) و (13-2)، پتانسیل شیمیایی  $m$  را می‌توان از آن استخراج نمود.

$$\frac{1}{4p^3} \frac{2m_h^* k_B T \frac{\hbar^3}{2\pi^2}}{\hbar^2} e^{-(m_h E_V)/k_B T} = \frac{1}{4p^3} \frac{2m_e^* k_B T \frac{\hbar^3}{2\pi^2}}{\hbar^2} e^{(m_e E_C)/k_B T}$$

$$m = \frac{1}{2}(E_C + E_V) + \frac{1}{2}k_B T \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right) \quad (14-2)$$

در این جا عبارت  $(E_C + E_V)/2$  دقیقاً در وسط گاف انرژی قرار می‌گیرد و رابطه‌ی (14-2) وابستگی پتانسیل شیمیایی  $m$  به جرم مؤثر حاملین  $(m_e^*, m_h^*)$  و دمای را نشان می‌دهد. در دو وضعیت می‌توان جمله دوم عبارت (14-2) صفر شود: الف) در دمای صفر مطلق (حالت پایه) ب) برابری جرم مؤثر حفره  $m_h^*$  در نوار ظرفیت با جرم مؤثر الکترون در نوار رسانش. پتانسیل شیمیایی در این دو وضعیت درست در میانه‌ی

گاف انرژی قرار می‌گیرد. در اکثر موارد جرم مؤثر حفره از جرم الکترون بزرگ‌تر می‌باشد که در دمای  $T$  با افزایش جرم مؤثر حفره نسبت به جرم مؤثر الکترون رسانش، پتانسیل شیمیایی به آهستگی به نوار رسانش نزدیک‌تر می‌شود.

**نکته 2-5:** به دلیل کوچک بودن جمله دوم رابطه‌ی (2-14) نسبت به جمله اول در دمای اتاق ( $k_B T \gg 0.026 \text{ eV}$ )، می‌توان به طور کلی پتانسیل شیمیایی را برای نیم‌رساناهای ذاتی تقریباً در وسط گاف انرژی در نظر گرفت.

در حالت تعادلی حاصل ضرب تعداد الکترون‌های رسانش با تعداد حفره‌های نوار ظرفیت برابر خواهد بود با مربع تعداد حاملین ذاتی سیستم است.

$$np = n_i^2(T) = N_c N_h e^{(E_v - E_c)/k_B T} = N_c N_h e^{-E_g/k_B T} \quad (15-2)$$

رابطه (2-15) نشان می‌دهد که چگالی ذاتی حاملین  $n_i(T)$  اولاً مستقل از پتانسیل شیمیایی است، ثانیاً دارای وابستگی نمایی به گاف انرژی که از مشخصه‌های مهم نیم‌رساناها می‌باشد. از این رو موادی با گاف انرژی بزرگ، تعداد حاملین ذاتی کوچکی خواهند داشت. با دانستن گاف انرژی مواد و نیز چگالی تعداد یک حامل، می‌توان چگالی تعداد حامل دیگر را به دست آورد (رابطه‌ی (2-15)).

#### 2-1-4 ناخالصی در نیم‌رسانا (نیم‌رساناهای غیرذاتی)

همان‌طور که قبلاً به آن اشاره شد، ساختار ژرمانیوم و سیلیسیوم دارای یک شبکه کریستالی الماس‌گونه می‌باشند (شکل (2-1)). هر اتم آن با چهار اتم که در رئوس یک ساختار تتراهدرال هستند، پیوند کوالانسی تشکیل می‌دهند. سیلیسیوم و ژرمانیوم در گروه چهارم از جدول تناوبی قرار دارند. این گروه دارای چهار الکترون در بالاترین تراز اتمی خود هستند. با در نظر گرفتن یک شبکه بلوری خالص از سیلیسیوم یا ژرمانیوم به عنوان میزبان و اضافه کردن ناخالصی به آن می‌توان نیم‌رساناهایی از نوع  $N$  و یا  $P$  داشت. غلظت ناخالصی در بلور میزبان بایستی آن قدر کم باشد (حدود  $0/0001$  درصد) تا تأثیری در ساختار کریستالی و الکترونی میزبان نگذارد.

برای تولید نیم‌رسانای نوع  $N$  از ناخالصی گروه پنجم جدول تناوبی استفاده می‌کنیم. اتم‌های این گروه دارای 5 الکترون در بالاترین تراز انرژی هستند (فسفر،

آرسنیک و...)، با قرار دادن این عناصر به جای اتم میزبان، چهار تا از الکترون‌هایشان را با الکترون‌های اتم میزبان برای پیوند کوالانسی به اشتراک می‌گذارند. تک الکترون باقی مانده با یک قید پیوند اتمی کوچک به مانند یک تراز انرژی اتمی هیدروژن-گونه در اطراف اتم ناخالصی پرسیه می‌زند<sup>1</sup> (شکل (2-8)). در ادامه با استفاده از روابط استخراج شده از اتم هیدروژن (رابطه (2-16))، نشان داده می‌شود حضور این الکترون در محیطی که دارای ضریب دی‌الکتریک بزرگتر از خلاء  $\epsilon > 1$  و جرم مؤثری کمتر از جرم الکترون آزاد است ( $m_e^* < m_e$ )، باعث کاهش انرژی بستگی و افزایش شعاع الکترونی این الکترون می‌شود. جرم مؤثر الکترون در محیط ژرمانیوم  $0/2$  برابر جرم الکترون در خلاء و ضریب دی‌الکتریک  $e$  محیط ژرمانیوم برابر با  $15/8$  می‌باشد که با استفاده از رابطه‌های (2-17)، انرژی بستگی به اندازه  $0/012 \text{ eV}$  و شعاع الکترونی حدود  $40 \text{ \AA}$  را نتیجه می‌دهد. در صورتی که همین مشخصه‌ها برای اتم هیدروژن برابر با  $E_1 = -13/6 \text{ eV}$  و  $r_1 = 0/53 \text{ \AA}$  می‌باشد.<sup>2</sup>

$$E_n = -\frac{m_e^* e^4}{2\epsilon^2 \hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2 n^2} \quad \text{و} \quad r_n = \frac{\epsilon \hbar^2 (4\pi\epsilon_0)}{m_e^* e^2} n^2 \quad (16-2)$$

بنابراین افزایش شعاع الکترونی باعث گسترش فضای تابع موج الکترون ناخالصی جایگزیده در بلور می‌شود که با دریافت کمترین انرژی حرارتی، به نوار انرژی رسانش میزبان انتقال یافته و چگالی الکترونی نوار رسانش را می‌افزاید. این دسته الکترون ناخالصی با گذر به نوار رسانش تابع موج گسترده بلوخ را به خود می‌گیرند. با استفاده از رابطه‌ی (2-16) و قرار دادن مقادیر ثابت به ازای  $n=1$  به عبارت‌های ساده شده زیر می‌رسیم:

$$E_n = -\frac{\epsilon m_e^* \hbar^2}{2\epsilon^2 m_e^* \hbar^2} 13/6 \text{ eV} \quad \text{و} \quad r_n = \frac{\epsilon \hbar^2 (4\pi\epsilon_0)}{\epsilon m_e^* \hbar^2} 0/53 \text{ \AA} \quad (17-2)$$

رابطه‌ی (2-17) نشان می‌دهد با یک جرم مؤثر کوچک و با یک ضریب ثابت دی‌الکتریک بزرگ می‌توان تک الکترون خارجی ناخالصی (با یک تابع موج اتمی) را تا

1. به مانند اتم هیدروژن دارای تراز انرژی که در یک فاصله به دور اتم ناخالصی ولی با شعاع اتمی بزرگتر از اتم هیدروژن می‌چرخد.

2. زیرا جرم الکترون در اتم هیدروژن برابر است با جرم الکترون آزاد  $m_e$  و ضریب دی‌الکتریک، یک می‌باشد.



چند ده برابر فاصله‌ی بین اتمی بلور گسترده نمود ولی همچنان در دمای بسیار پایین  $k_B T \ll e_D$  جایگزیده می‌باشد (شکل (2-8) که در این جا  $e_D$  انرژی بستگی تک الکترون آزاد ناخالصی بخشنده به اتم ناخالصی می‌باشد که در ادامه نشان خواهیم داد برابر با فاصله تراز انرژی ناخالصی بخشنده تا لبه نوار انرژی رسانش می‌باشد.

با توجه به انرژی حرارتی دمای اتاق  $k_B T = 0/026 \text{ eV}$  و با توجه به انرژی بستگی الکترون‌های ناخالصی بخشنده به عنوان مثال اتم فسفر  $e_D = 0/012 \text{ eV}$ ، تمامی تک الکترون ناخالصی‌های فسفر در دمای اتاق به نوار رسانش محیط ژرمانیوم گذار می‌یابد که به معنی یونیزه شدن اتم‌های ناخالصی فسفر است. شکل (2-8) نشان می‌دهد که تابع موج اتمی الکترون‌های خارجی ناخالصی‌ها می‌توانند به دلیل گستردگی آن با تابع موج الکترون‌های اتم‌های میزبان هم پوشانی داشته باشند که با دریافت کمی انرژی حرارتی به نوار رسانش گذار می‌نمایند. به علت کمی غلظت ناخالصی‌ها فاصله بین اتم‌های ناخالصی نسبت به یکدیگر به قدری زیاد هستند که هیچ‌گونه هم‌پوشانی اتمی بین آن‌ها برقرار نمی‌شود هر چند که تابع موج اتمی آن‌ها بسیار گسترده می‌باشد<sup>1</sup>.

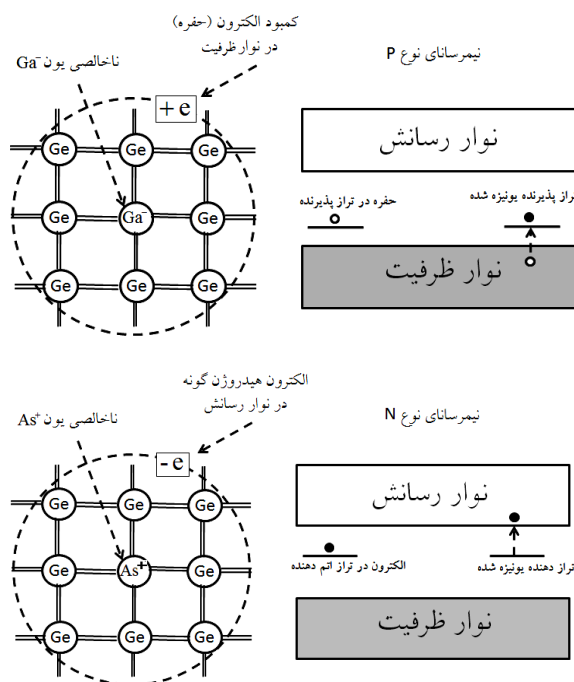
**جدول 2-2.**  $E_G$  گاف انرژی،  $e_D$  انرژی بخشنده ناخالصی تا لبه نوار رسانش و  $e_A$  انرژی پذیرنده ناخالصی تا لبه نوار ظرفیت، در بلور میزبان (سیلیسیوم و ژرمانیوم) همراه با تراکم ذاتی حاملین شان (شکل (2-10)).

	$E_G(\text{eV})$ $T=0\text{K}$	$e_D (\text{eV})$		$e_A (\text{eV})$		$e$ ضریب دی‌الکتریک	تراکم حاملین ذاتی $T=300\text{K}$ ( $\text{m}^{-3}$ )
		P	As	B	Al		
Si	1/08	0/045	0/049	0/045	0/057	11/7	$2 \cdot 10^{16}$
Ge	0/66	0/013	0/012	0/01	0/01	15/8	$2 \cdot 10^{19}$

ناخالصی از نوع P را می‌توان با قرار دادن عناصر گروه سوم جدول تناوبی (Al، B و ...) ایجاد نمود. آخرین تراز انرژی این عناصر دارای سه الکترون می‌باشند، با قرار

1. یا به زبان ساده‌تر ناخالصی‌ها همدیگر را نمی‌بینند تا نوار جدیدی را ایجاد نمایند. بنابراین انرژی هیدروژن‌گونه‌ی آن‌ها به صورت تراز انرژی در ناحیه‌ی گاف انرژی بدون پهنای ایجاد می‌کند.

دادن آن‌ها به جای اتم‌های چهار ظرفیتی میزبان، سه الکترون اتم ناخالصی پیوند کوالانسی را تشکیل می‌دهند و تک الکترون اتم میزبان رها می‌باشد. اتم ناخالصی برای تکمیل پیوند آزاد، تک الکترونی را از نوار ظرفیت اتم‌های میزبان می‌گیرد و یک حفره در نوار ظرفیت پدید می‌آورد که این حفره به مانند بار مثبت (به اندازه بار یک الکترون) مقید به اتم ناخالصی است که در فاصله‌ای به شعاع  $r_1$  در اطراف آن پرسه می‌زند (شکل 2-8)). میزان انرژی بستگی الکترون و حفره به یون ناخالصی در جدول (2-2) آمده است. مطالب نتیجه گرفته شده در بالا را می‌توان به طور خلاصه در شکل (2-8) به تصویر کشید.



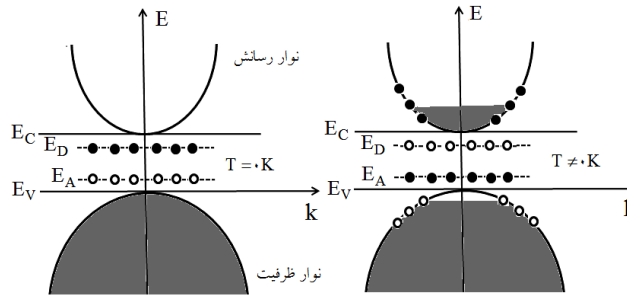
شکل 2-8. طرح‌های از نیم‌رسانای نوع P و N.

ترازهای انرژی اتم‌های بخشنده به اندازه انرژی بستگی شان (انرژی بستگی تک الکترون با یون ناخالصی) در نزدیکی لبه نوار رسانش و ترازهای اتم پذیرنده نیز در

نزدیکی نوار ظرفیت به اندازه تمایل جذب الکترون، قرار می‌گیرند که مقادیر عددی این ترازها در جدول (2-2) داده شده است.

به ازای هر اتم بخشنده یک تراز انرژی تک الکترونی در تراز انرژی بخشنده<sup>1</sup> پدید می‌آید. از این رو تعداد تبهگنی تک انرژی تراز بخشنده به تعداد اتم‌های ناخالصی بخشنده می‌باشد. به طور مشابه تعداد تبهگنی تک انرژی خالی در تراز پذیرنده<sup>2</sup> به تعداد اتم‌های ناخالصی پذیرنده است.

در دمای صفر کلونین همه‌ی ترازهای بخشنده دارای یک الکترون و همه‌ی ترازهای پذیرنده خالی از الکترون می‌باشند. در ادامه نشان خواهیم داد، حضور هر دو ناخالصی در نیم‌رسانای میزبان، باعث می‌شود که پتانسیل شیمیایی تقریباً در وسط گاف انرژی قرار گیرد (شکل (2-10) الف). در صورتیکه اگر هر کدام از ناخالصی‌ها را به‌طور جداگانه داشته باشیم پتانسیل شیمیایی در بین انرژی تراز ناخالصی و نوار انرژی نزدیک به خود (شکل (2-10) ب و ج) قرار می‌گیرد.

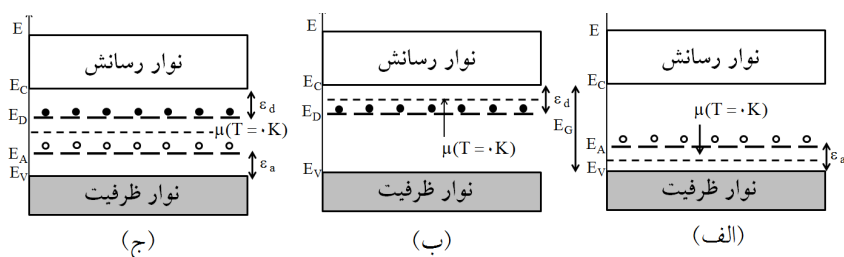


شکل 2-9. طرحواره‌ای از یک نیم‌رسانا نوع N و P در دمای صفر و غیر صفر.

دمای یونیزاسیون برای ترازهای بخشنده و یا پذیرنده به ترتیب به صورت  $k_B T_A = e_a$  و  $k_B T_D = e_d$  تعریف می‌شود که در آن  $e_d = E_C - E_D$  فاصله انرژی تراز بخشنده  $E_D$  با نوار رسانش  $E_C$  و  $e_a = E_A - E_V$  فاصله انرژی تراز پذیرنده  $E_A$  با نوار ظرفیت  $E_A$  است و  $T_A$  و  $T_D$  هم‌ارز دمایی انرژی‌ها  $e_a$  و  $e_d$  می‌باشند. در

1. با فاصله انرژی  $e_d$  درست زیر نوار رسانش که به صورت  $E_D$  در شکل (2-9) نشان داده شده است.  
 2. با فاصله انرژی  $e_a$  درست بالای نوار ظرفیت که به صورت  $E_A$  در شکل (2-9) نشان داده شده است.

نیم‌رسانای نوع N (شکل (2-10) ج)، در حالت  $T \ll T_D$  انتظار می‌رود که به طور عملی همه ترازهای انرژی اتم‌های بخشنده پر باشند و هیچ گذاری صورت نپذیرد. در این صورت نشان خواهیم داد که پتانسیل شیمیایی در ناحیه بین تراز بخشنده و نوار رسانش قرار می‌گیرد  $E_D < m(T) < E_C$ . در حالتی که دما قابل مقایسه با دمای یونیزاسیون باشد  $T \gg T_D$  تمامی الکترون‌های تراز بخشنده به نوار رسانش گذار نموده و پتانسیل شیمیایی  $m(T)$  قدری پایین‌تر از تراز بخشنده  $E_D$  قرار می‌گیرد، اما هنوز نزدیک به لبه نوار رسانش می‌باشد. در صورتی که دما خیلی بالا باشد گذار حاملین ذاتی<sup>1</sup> طوری افزایش می‌یابد که اثرات حاملین ناخالصی در مقابل حاملین ذاتی<sup>2</sup> بسیار ناچیز خواهد شد و مجموعه به مانند یک نیم‌رسانای ذاتی عمل می‌کند. از این رو پتانسیل شیمیایی به نزدیکی وسط گاف انرژی برگردانده می‌شود (شکل (2-10) د). این وابستگی دمایی پتانسیل شیمیایی را در بخش (2-1-6) به آن خواهیم پرداخت.



شکل 2-10. مکان قرار گرفتن پتانسیل شیمیایی در یک نیم‌رسانا: الف) از نوع اتم‌های بخشنده (نوع N) ب) با ناخالصی از نوع اتم‌های پذیرنده (نوع P) ج) با هر دو ناخالصی.

در ادامه نشان خواهیم داد که می‌توان جایگاه پتانسیل شیمیایی را در ناحیه گاف انرژی توسط تعداد حاملین بخشنده یا پذیرنده مشخص نمود. برای حل تحلیلی مطالب بالا، بهتر است حالت کلی را در نظر بگیریم. یعنی حالتی که در آن هم ناخالصی بخشنده (نوع N) و هم ناخالصی پذیرنده (نوع P) در بلور میزبان حضور داشته باشند (شکل (2-10) ج).

1. حاملین ذاتی، الکترون‌های که از نوار ظرفیت به نوار رسانش گذار می‌نمایند.

2. که بیشترین جمعیت را در بلور دارند.

در دمای بالا، الکترون‌های ترازهای بخشنده به نوار رسانش و الکترون‌های نوار ظرفیت هم به ترازهای پذیرنده و هم به نوار رسانش می‌توانند گذار یابند. این فرآیند باعث می‌شود که در نوار ظرفیت و تراز بخشنده حفره پدید آید.

با توجه به خنثی بودن سیستم از نظر بار الکتریکی می‌توان عبارت (2-18) را نتیجه گرفت. سمت چپ عبارت (2-18) مربوط به تعداد الکترون‌های با بار منفی و سمت راست آن مربوط به حفره‌ها با بار مثبت ایجاد شده در اثر دما در سیستمی با هر دو ناخالصی، می‌باشد.

$$n + N_A = (N_D^t - N_D) + p \quad (18-2)$$

در این جا  $N_D^t$  و  $N_A$  به ترتیب تعداد کل ناخالصی‌های پذیرنده و بخشنده در واحد حجم در نظر گرفته شده است.

$n$  چگالی تعداد الکترون در نوار رسانش (که ناشی از هر دو گذار از نوار ظرفیت و ترازهای بخشنده می‌باشد)،  $N_A$  تعداد گذار الکترونی از نوار ظرفیت به نوار پذیرنده،  $p$  چگالی تعداد حفره‌های ایجاد شده در نوار ظرفیت (که از هر دو گذار به نوار رسانش و نوار پذیرنده پدیدار می‌گردد)،  $N_D^t$  تعداد کل ترازهای بخشنده (برابر است با تعداد کل اتم‌های ناخالصی بخشنده) و  $N_D$  تعداد گذار الکترونی از تراز بخشنده به نوار رسانش می‌باشد<sup>1</sup> که کمبود الکترونی (یا حفره) ایجاد شده در آن برابر است با  $(N_D^t - N_D)$  می‌باشد.

### 2-1-5 احتمال پرشدگی ترازهای ناخالصی‌های بخشنده و پذیرنده

با توجه به فرمیون بودن الکترون‌ها و تبعیت آن‌ها از آمار فرمی-دیراک، می‌توان به راحتی تابع احتمال پرشدگی (یا متوسط اشغال الکترون در هر حالت انرژی) برای ترازهای بخشنده و ترازهای پذیرنده به دست آورد.

نکته مهمی که برای به دست آوردن تابع احتمال پرشدگی برای ترازهای بخشنده و ترازهای پذیرنده بایستی توجه نمود، به جایگزیده بودن تابع موج الکترون‌ها (در تراز بخشنده) و یا حفره‌ها (در تراز پذیرنده) در ناحیه‌ای از گاف انرژی بلور میزبان می‌باشد

1. از این رو  $N_D$  برابر تعداد اتم‌های ناخالصی بخشنده یونیزه شده می‌باشد.

که تابع احتمال پرشدگی این ترازهای پذیرنده و بخشنده به طور خلاصه در جدول (2-2) آورده شده است. در تراز ناخالصی از نوع بخشنده به دلیل جایگزیدگی تابع موج الکترون قرار گرفته در آن فقط می تواند حالت های سیستم تک الکترون با هر اسپینی یا خالی از الکترون تشکیل یابد. عدم وجود حالتی با دو الکترون با اسپین مخالف به دلیل افزایش دافعه الکترواستاتیکی شان<sup>1</sup> می باشد. در مقابل برای تراز ناخالصی از نوع پذیرنده فقط می تواند حالت هایی با یک یا دو الکترون را به خود بگیرد، ولی هرگز نمی تواند حالتی بدون الکترون باشد زیرا در این حالت سیستم دارای دو حفره جایگزیده با برهم کنش کولنی بسیار بالا (در تراز اتم های پذیرنده خواهد بود که احتمال این حالت را بسیار کاهش می دهد، به زبان دیگر اتم پذیرنده (سه ظرفیتی) برای تکمیل پیوند با اتم های پیرامون خود (اتم های چهار ظرفیتی میزبان) بایستی یک الکترون از نوار ظرفیت اتم میزبان دریافت نماید که به معنی ایجاد حفره ای در نوار ظرفیت می باشد. حالتی با دو الکترون در تراز پذیرنده با اسپین های مخالف<sup>-</sup> نیز امکان پذیر است زیرا تولید دو حفره غیر جایگزیده در نوار ظرفیت را خواهد نمود. غیر جایگزیده بودن حفره ها در نوار ظرفیت و دافعه کولنی بین حفره ها، فاصله حفره ها را افزایش و پتانسیل برهم کنش کولنی آن ها را کاهش می دهد که در این صورت احتمال چنین حالتی را افزایش می دهد.

جدول 2-3. توابع پرشدگی در سه سطح انرژی مختلف که عبارت هستند از: الف) ضریب (احتمال) پرشدگی الکترون در نوار انرژی رسانش و ظرفیت  $f(E)$  ب) ضریب پرشدگی در تراز انرژی بخشنده  $f_D(E)$  ج) ضریب پرشدگی حفره در تراز انرژی پذیرنده  $f_A(E)$ .

$\varepsilon$		$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} + 1}$	نوار انرژی رسانش و ظرفیت
$E_D$		$f_D = \frac{1}{\left(\frac{1}{2}\right) e^{(E_D-\mu)/k_B T} + 1}$	تراز انرژی بخشنده
$E_A$		$f_A = \frac{1}{\left(\frac{1}{2}\right) e^{(\mu-E_A)/k_B T} + 1}$	تراز انرژی پذیرنده

1. که آن به دلیل جایگزیده بودن فضای توابع موج آن ها است.

دسته دیگر از ترازها مربوط به نوار رسانش و ظرفیت از بلور میزبان می باشد که به دلیل گستردگی تابع موج الکترون های آنها (تابع موج شان بلوخ گونه هستند) محدودیت جایگزیدگی برای این دسته الکترون ها لحاظ نمی گردد. بدین معنی که هر حالت انرژی در نوار رسانش و ظرفیت می تواند: خالی از الکترون، پر با یک نوع اسپین و یا پر با دو نوع اسپین مخالف ( $-$ ) باشد.

با به کارگیری گفته های بالا، می توان به طور خلاصه جدول (2-3) را تهیه نمود که ستون سوم تابع توزیع پرشدگی الکترون (در نوار رسانش و ظرفیت و تراز بخشنده) و حفره (در تراز پذیرنده) می باشند که عبارتند هستند از: تابع توزیع پرشدگی فرمی دیراک برای الکترون های نوار انرژی رسانش و ظرفیت ( $f(\theta)$ ) تابع توزیع پرشدگی حفره در نوار ظرفیت ( $1 - f(\theta)$ ) تابع توزیع پرشدگی الکترون در تراز بخشنده ( $f_D$ ) تابع توزیع پرشدگی حفره در تراز پذیرنده  $f_A$ . روش محاسبه این توابع توزیع در پیوست (1-2) آورده شده است.

از حاصل ضرب تابع عدم پرشدگی الکترون (حفره) ( $1 - f_D$ ) در ترازهای بخشنده در تعداد کل اتم های بخشنده  $N_D^t$ ، تعداد الکترون های گذار  $N_D$  به نوار رسانش را نتیجه می دهد:

$$N_D = N_D^t \left[ 1 - \frac{1}{e^{\frac{E_D - m}{k_B T} + 1}} \right] \quad (19-2)$$

به طور مشابه،  $N_A$  تعداد الکترون های گذار از نوار ظرفیت به تراز پذیرنده را می توان محاسبه نمود که برابر با حاصل ضرب احتمال تمایل پرشدگی الکترونی تراز پذیرنده ( $1 - f_A$ ) در تعداد کل اتم های پذیرنده  $N_A^t$  در واحد حجم است.

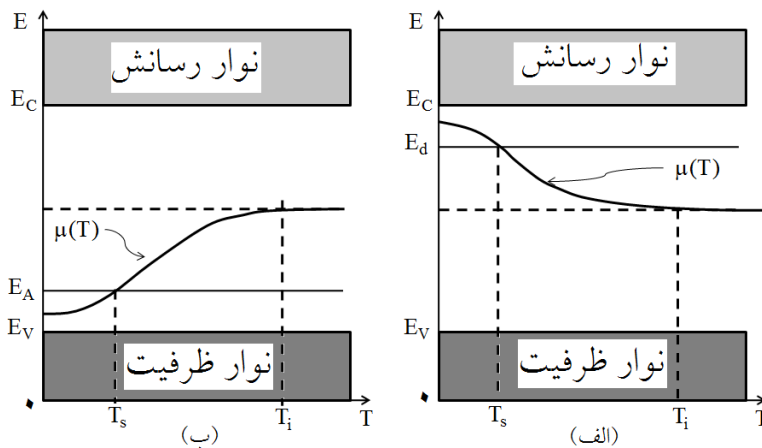
$$N_A = (1 - f_A) N_A^t = \frac{N_A^t}{e^{\frac{E_A - m}{k_B T} + 1}} \quad (20-2)$$

از اختلاف تعداد الکترون های گذار به تراز پذیرنده  $N_A$  با تعداد کل ترازهای پذیرنده (که برابر است با تعداد کل اتم های پذیرنده)  $N_A^t$ ، تعداد حفره ها در تراز پذیرنده را نتیجه می دهد (رابطه (21-2)).

$$N_A^t - N_A = \frac{N_A}{\frac{e^{-\frac{m^* E_A}{k_B T}}}{2} + 1} \quad (21-2)$$

### 6-1-2 پتانسیل شیمیایی نیم‌رساناهای غیرذاتی و اثرات دما بر آن

رابطه (18-2) کلی‌ترین حالتی است که در آن هر دو ناخالصی در سیستم مهیا است که با توجه به آن می‌توان هر دو حالت: ذاتی (بدون ناخالصی) و یا غیرذاتی (نوع پذیرنده یا بخشنده) را از آن مشتق گرفت. از رابطه (18-2) برای حالت ذاتی نوع  $N_A = N_D^t - N_D = 0$  که عبارت  $n = p$  را نتیجه می‌دهد. برای یک نیم‌رسانا از نوع بخشنده (نیم‌رسانای غیر ذاتی از نوع N) بایستی در عبارت (18-2)  $N_A$  را برابر صفر در نظر گرفت. بنابراین در دمای پایین<sup>1</sup> تعداد حفره‌های نوار ظرفیت p در مقایسه با الکترون‌هایی که از ترازهای بخشنده گذار می‌یابد بسیار ناچیز خواهد بود و قابل صرف نظر کردن می‌باشد. از این رو در این شرایط  $n \gg p$  می‌باشد که می‌توان با یک تقریب بسیار خوب چگالی حفره در نوار ظرفیت را در مقایسه با چگالی الکترون در نوار رسانش صرف نظر نمود. از این رو عبارت (18-2) به صورت رابطه‌ی (22-2) برای یک نیم‌رسانای غیرذاتی از نوع N را می‌توان در نظر گرفت.



شکل 11-2. تغییرات پتانسیل شیمیایی بر حسب افزایش دما الف) برای نیم‌رسانای نوع N ب) برای نیم‌رسانای نوع P.

1. کمتر از دمایی که گذار الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش صورت پذیرد  $k_B T \ll E_G$ .



$$n = N_D^t - N_D \quad (22-2)$$

با قرار دادن عبارت (12-2) و (19-2) در عبارت (22-2) و شرط  $E_D - m \gg k_B T$  می توان پتانسیل شیمیایی سیستم را به دست آورد.

$$m = \frac{E_D + E_C}{2} + \frac{1}{2} k_B T \ln \frac{2p^3 h^3 N_D^t}{(2\pi m_e^* k_B T)^{3/2} \bar{u}} \quad (23-2)$$

در دمای صفر کلونین پتانسیل شیمیایی سیستم ما بین نوار رسانش و تراز بخشنده واقع می شود. با افزایش دما پتانسیل شیمیایی این نیم رسانای نوع N مانند شکل (2-11) الف طوری تغییر می کند که در دماهای بالا به مانند یک نیم رسانای ذاتی به میانه گاف انرژی می رسد. این بدین معنی است که با افزایش دما، سهم الکترون های ذاتی که از نوار ظرفیت به نوار رسانش گذار می یابد بسیار بیشتر از سهم ناخالصی های بخشنده خواهد بود.

مطابق شکل (2-11) الف، دمای  $T_i$  دمایی است که گذار فاز الکترونی<sup>1</sup> از نیم رسانای نوع N به نیم رسانای ذاتی آغاز می یابد. این گذار از دمای اشباع  $T_s$  شروع می شود.  $T_s$  دمایی است که پتانسیل شیمیایی با انرژی تراز بخشنده برابری می کند و در آن دما، تمامی اتم های ناخالصی یونیزه می شوند. برای یک سیستم ژرمانیوم با ناخالصی  $N_D^t = 10^{22} \text{ m}^{-3}$  و  $E_D = 0.01 \text{ eV}$  دمای اشباع برابر  $30 \text{ K}$  و دمای گذار فاز  $T_i$  آن برابر  $450 \text{ K}$  می باشد.

با جایگذاری پتانسیل شیمیایی (رابطه (23-2)) در عبارت (19-2) و به کار بردن آن در عبارت (22-2)، تراکم الکترونی در نیم رسانای نوع N به دست می آید.

$$n = N_D^t - N_D = \frac{2(2\pi m_e^* k_B T)^{3/2}}{h^3} e^{-(E_C - E_D)/k_B T} \bar{u}^{1/2} \quad (24-2)$$

برای نیم رسانای نوع P، سهم ناخالصی بخشنده در عبارت (18-2) حذف می گردد  $N_D^t - N_D = 0$  و با توجه به برقراری شرط  $n \ll p$  در دمای پایین، تعداد حفره ها برابر خواهد بود با تعداد اتم های ناخالصی پذیرنده  $p = N_A$ .

1. گذار الکترونی به معنی تغییر سیستم از نظر خواص الکترونی است مانند فلز به عایق (و بالعکس) تغییر نوع نیم رسانا از نوع N یا P به نیم رسانای ذاتی (و بالعکس).

با قرار دادن رابطه‌های (13-2) و (20-2) در رابطه  $p = N_A$  می‌توان پتانسیل شیمیایی چنین سیستمی را به دست آورد.

$$\frac{1}{4p^3} \frac{2m_h^* k_B T}{h^2} e^{(m E_V)/k_B T} = \frac{N_A^t}{2 e^{(E_A - m)/k_B T} + 1} \quad (25-2)$$

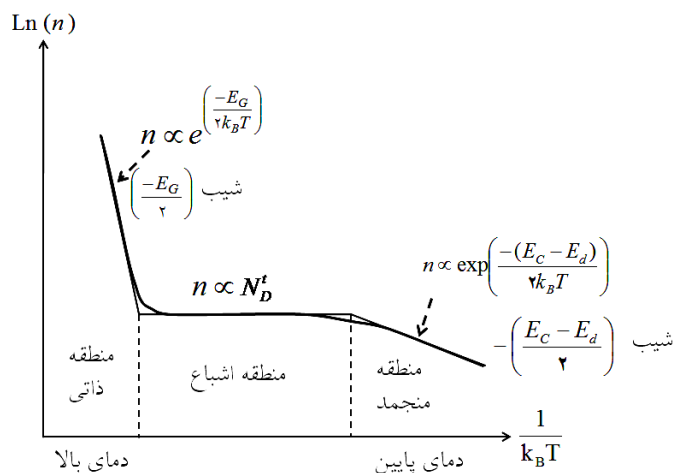
$$m = \frac{E_A + E_V}{2} - \frac{1}{2} k_B T \ln \frac{2p^3 h^3 N_A^t}{(2m_h^* k_B T)^{3/2}}$$

ملاحظه می‌شود در دمای صفر کلونین پتانسیل شیمیایی در وسط لبه نوار ظرفیت و تراز پذیرنده واقع است. در دماهای بالا پتانسیل شیمیایی به وسطه‌های گاف انرژی می‌رسد که گذار فازی الکترونی از نیم‌رسانای نوع p به نیم‌رسانای ذاتی است. این گذار فاز از دمای اشباع  $T_s$  آغاز می‌گردد (شکل (2-11) ب). با جایگذاری عبارت پتانسیل شیمیایی در رابطه  $p = N_A$  تراکم حفره در نیم‌رسانا نوع p به دست می‌آید.

$$p = N_A = \frac{N_A^t}{8p^3} \frac{2m_h^* k_B T}{h^2} e^{-(E_A - E_V)/k_B T} \quad (26-2)$$

با توجه به روابط (2-15) و (2-24) می‌توانیم شکل (2-12) را به خوبی ترسیم نماییم. نمایی بودن این رابطه‌ها ما را مجبور می‌سازد به جای ترسیم چگالی الکترون (یا حفره) از لگاریتم عبارت چگالی الکترون (یا حفره) استفاده نماییم. شکل (2-12) تغییرات تراکم الکترونی در نوار رسانش در سه منطقه دمایی: دماهای خیلی پایین، دماهای بسیار بالا و دماهای حد وسط برای نیم‌رسانای نوع N را نشان می‌دهد. در دماهای خیلی پایین اغلب گذار الکترونی توسط الکترون‌های ناخالصی از نوع بخشنده صورت می‌پذیرد که با توجه به رابطه (2-24) تراکم‌های الکترونی در نوار رسانش متناسب با  $n \propto \exp(-(E_C - E_d)/2k_B T)$  است که لگاریتم آن یک رابطه خطی نسبت به عکس دما  $(1/k_B T)$  با شیب  $-(E_C - E_d)/2$  را نتیجه می‌دهد. در دماهای بسیار بالا تراکم‌های الکترونی ذاتی (گذار الکترون‌ها از نوار ظرفیت به رسانش) در مقایسه با تراکم الکترونی ایجاد شده توسط ناخالصی در نوار رسانش نقش مهم‌تری را بازی می‌کند. از این رو با توجه به رابطه (2-15) تراکم‌های الکترونی (در حالت ذاتی  $n=p=n_i$ )

در دمای بالا متناسب با  $n \propto \exp(-E_G/2k_B T)$  است که لگاریتم آن یک رابطه خطی نسبت به عکس دما  $(1/k_B T)$  با شیب  $(-E_G/2)$  را نتیجه می‌دهد.



شکل 2-12. نمایش لگاریتمی تغییرات چگالی الکترونی نسبت به عکس دما.

### 7-1-2 خواص انتقال الکتریکی در نیم‌رساناها

عامل تحرک حاملین بار (الکترون و حفره) در مواد، نیروهای خارجی الکتریکی و مغناطیسی هستند که به آنها اعمال می‌شوند. با در نظر گرفتن نظریه درود (در خصوص سهم پراکندگی الکترون و حفره) و معادله حرکت برای الکترون و حفره در حضور یک میدان الکترومغناطیسی، می‌توان عبارتهای (27-3) و (28-3) را نوشت:

$$m_e \frac{d\mathbf{v}_e}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v}_e \times \mathbf{B}) - m_e \frac{\mathbf{v}_e}{t_e} \quad (27-2)$$

$$m_h \frac{d\mathbf{v}_h}{dt} = +e(\mathbf{E} + \mathbf{v}_h \times \mathbf{B}) - m_h \frac{\mathbf{v}_h}{t_h} \quad (28-2)$$

در روابطه (27-2) و (28-2)،  $t_e$ ،  $t_h$  به ترتیب زمان‌های پراکندگی (یا واهلش) الکترون و حفره می‌باشند. با در نظر گرفتن فقط میدان الکتریکی DC، حل معادلات (27) و (28-2) در حالت پایا  $d\mathbf{v}_{e,h}/dt = 0$  به صورت زیر نتیجه می‌شوند:

$$\frac{\mathbf{r}}{\mathbf{v}_e} = \frac{-et_e}{m_e} \mathbf{E} = -m_b \mathbf{E} \quad , \quad m_b = \frac{et_e}{m_e} \quad (29-2)$$

$$\mathbf{r}_{v_h} = \frac{+et_h}{m_h} \mathbf{E} = +m_h \mathbf{E} \quad , \quad m_h = \frac{et_h}{m_h} \quad (30-2)$$

در عبارت‌های (29-2) و (30-2)  $m_e$  و  $m_h$ ، به ترتیب تحرک‌پذیری الکترون و حفره نامیده می‌شوند. با جایگذاری عبارت‌های (29-2) و (30-2) در معادله چگالی جریان الکتریکی  $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$ ، می‌توان چگالی جریان کل سیستم، ناشی از حاملین (الکترون و حفره) را به صورت زیر نوشت:

$$\mathbf{J} = n(-e)v_e + p(+e)v_h = \frac{ne^2t_e}{m_e} \mathbf{E} + \frac{pe^2t_h}{m_h} \mathbf{E} \quad (31-2)$$

$$\mathbf{s} = \frac{ne^2t_e}{m_e} \mathbf{E} + \frac{pe^2t_h}{m_h} \mathbf{E} = nem_e \mathbf{E} + pem_h \mathbf{E} \quad (32-2)$$

$$\mathbf{J} = (nem_e + pem_h) \mathbf{E}$$

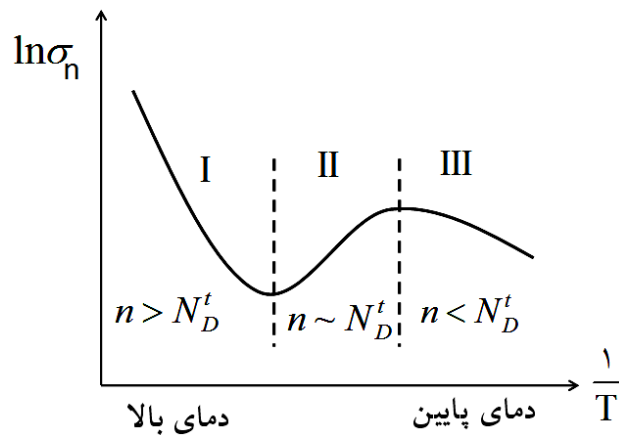
$$\mathbf{J} = (\mathbf{s}_e + \mathbf{s}_h) \mathbf{E} = \mathbf{s} \mathbf{E} \quad (33-2)$$

$\mathbf{s}_e$  و  $\mathbf{s}_h$  به ترتیب رسانندگی کل، الکترون و حفره می‌باشند. روابط بالا نشان دهنده این است که در یک نیم‌رسانا هر دو حامل در ایجاد جریان نقش مهمی را بازی می‌کنند. رسانندگی  $\mathbf{s}$  به تحرک‌پذیری حاملین و تراکم حاملین وابسته است. برای یک نیم‌رسانا از نوع N به دلیل بالا بودن تراکم الکترونی نسبت به تراکم حفره  $n \gg p$  جمله الکترونی رابطه (32-2) را در نظر گرفته و از جمله دوم که مربوط به اقلیت حاملین بار هستند صرف‌نظر می‌کنیم و برعکس در نیم‌رسانای نوع P که اقلیت‌ها الکترون‌ها هستند می‌توان سهم آن‌ها را در جریان نادیده گرفت. با توجه به رابطه‌های (12-2)، (13-2) و (15-2) در یک نیم‌رسانای ذاتی و شرط برابری چگالی‌های الکترون و حفره در نوارهای رسانش و ظرفیت  $n = p$ ، رسانندگی ذاتی برابر است با:

$$s_i = n_i e (m_e + m_h)$$

$$s_i = \frac{e}{4p^3} \frac{2 \sqrt{m_h^* m_e^*} k_B T^{3/2}}{h^2} e^{-\frac{E_G}{2k_B T}} (m_e + m_h) \quad (34-2)$$

**نکته 2-6:** وابستگی دمایی عبارت تراکم پذیری ( $m_e + m_h$ ) طوری است که تقریباً قسمتی از وابستگی دمایی عبارت رابطه (2-33) که به صورت  $T^{3/2}$  را خنثی می‌کند. بنابراین می‌توان وابستگی دمایی رسانندگی ذاتی  $s_i$  را به صورت  $s_i \approx \exp(-(E_G)/2k_B T)$  در نظر گرفت که لگاریتم آن یک رابطه خطی با عکس دما پیدا می‌کند. برای یک نیم‌رسانای غیرذاتی (نوع N یا P) عبارت رسانندگی به صورت  $s_{n,p} \approx \exp(-(E_{D,A})/2k_B T)$  نتیجه می‌دهد که در آن  $E_{D,A}$  انرژی تراز بخشنده با رسانندگی  $s_n$  برای نوع N یا انرژی تراز پذیرنده با رسانندگی  $s_p$  برای نوع P می‌باشد. شکل (2-13) لگاریتم رسانندگی برای یک نیم‌رسانای نوع N را نمایش می‌دهد. در دمای پایین لگاریتم رسانندگی رابطه خطی با عکس دما دارد که شیب آن نشان دهنده انرژی تراز بخشنده  $E_D$  می‌باشد. همان‌طور که قبلاً به آن اشاره شد در دماهای بالا، رفتار کلیه نیم‌رساناها ذاتی خواهند شد، از این رو شیب خطی لگاریتم رسانندگی آن در دمای بالا گاف انرژی  $E_G$  را نتیجه می‌دهد (شکل (2-13)). کاهش رسانندگی (افزایش مقاومت) در نیم‌رساناها می‌تواند به دو دلیل عمده پراکندگی الکترونی باشد: الف) پراکندگی ناشی از ناخالصی‌ها و ناکاملی‌ها (نقص شبکه‌ای) ب) پراکندگی حرارتی ناشی از فونون‌ها (به ازای  $T \gg 0$ ). در دماهای بالا پراکندگی حرارتی و در دمای پایین ناخالصی‌ها و ناکاملی‌ها نقش مهمتری بازی می‌کنند.



شکل 2-13. لگاریتم رسانندگی برای یک نیم‌رسانای نوع N.

## 8-1-2 حاملین اقلیت در نیم‌رساناها

در نیم‌رساناهای ذاتی تراکم الکترونی و حفره با هم برابر هستند و هر دو سهم مهمی را در رسانش بازی می‌کنند. در صورتی که در نیم‌رسانای غیرذاتی به دلیل عدم توازن چگالی حاملین، سهم آن‌ها در رسانش یکسان نیستند. برای مثال در نیم‌رسانای نوع N اکثریت، الکترون‌ها و اقلیت، حفره‌ها هستند. این اقلیت‌های حفره در نیم‌رسانای نوع N همان‌هایی هستند که از نوار ظرفیت به نوار رسانش گذار یافته‌اند. این حفره‌ها که از کمترین چگالی برخوردار هستند توسط اکثریت الکترون به دام افتاده و عمل بازترکیب صورت می‌پذیرد. فرآیند باز تولید الکترون-حفره در اثر جذب انرژی حرارتی اتفاق می‌افتد که می‌توان مدت زمان عمر  $t_m$  را برای این اقلیت‌ها تولید شده، تعریف نمود. هر چه تعداد اقلیت‌های اضافی تولید شده، افزایش یابد، بازترکیب افزایش می‌یابد که می‌توان معادله (2-35) را برای‌شان نوشت.

$$\frac{dN_{ex}}{dt} = -\frac{N_{ex}}{t_m} \quad (2-35)$$

که در آن  $N_{ex}$  تعداد بازترکیب زوج الکترون-حفره در مدت زمان  $t_m$  می‌باشد. با انتگرال‌گیری از رابطه‌ی (2-35)، عبارت (2-36) نتیجه می‌شود:

$$N_{ex}(t) = N_{ex}(0) e^{-\frac{t}{t_m}} \quad (2-36)$$

می‌توان این رفتار را برای هر بار آزاد چه از جنس الکترون و چه از جنس حفره در داخل نیم‌رسانا یافت. با در نظر گرفتن زمان عمر برای این حاملین بار<sup>1</sup> ( $t_h$  و  $t_e$ ) می‌توان مسافتی را که در بلور حجمی نیم‌رسانا در این زمان‌ها نفوذ می‌کنند به ترتیب  $L_e$  و  $L_h$  (طول نفوذ حاملین بار) برای الکترون و حفره به صورت زیر به دست آورد.

$$L_e = \sqrt{D_e t_e} \quad (2-37)$$

$$L_h = \sqrt{D_h t_h} \quad (2-38)$$

۱. این زمان‌ها را با زمان‌های پراکندگی که توسط درود معرفی شده‌است اشتباه گرفته نشود.

که در رابطه‌های (37-2) و (38-2)  $D_e$  و  $D_h$  ضرایب نفوذ هستند که با رابطه‌ی انیشتین به صورت زیر داده می‌شوند.

$$D_e = \frac{k_B T m_e}{e} \quad (39-2)$$

$$D_h = \frac{k_B T m_h}{e} \quad (40-2)$$

### 2-1-9 اثر هال در نیم‌رسانا

در فصل اول اثر هال را برای یک رسانا بررسی کردیم (در آن جا حاملین تنها الکترون‌ها بودند). در این بخش قصد داریم همین اثر را بر روی یک قطعه نیم‌رسانا مطابق شکل (14-2) مورد بررسی قرار دهیم. مطابق شکل‌های (14-2) و (15-2) با اعمال دو میدان خارجی: یکی میدان مغناطیسی ثابت  $\vec{B}$  عمود بر قطعه (در جهت z) و دیگری میدان الکتریکی ثابت  $\vec{E}_x$  در امتداد قطعه (در جهت x)، باعث تجمع بار الکتریکی در عرض قطعه می‌گردد که آن نیز یک میدان الکتریکی عرضی  $E_y$  در عرض قطعه پدیدار می‌گردد. با استفاده از رابطه‌ی (41-2) عبارت ضریب هال  $R_H$  را می‌توان از آن استخراج نمود.

$$\vec{E}_y = R_H (\vec{B} \times \vec{J}) \quad (41-2)$$

$\vec{J}$  چگالی جریان در جهت میدان الکتریکی  $\vec{E}_x$  اعمال شده به قطعه نیم‌رسانا می‌باشد.

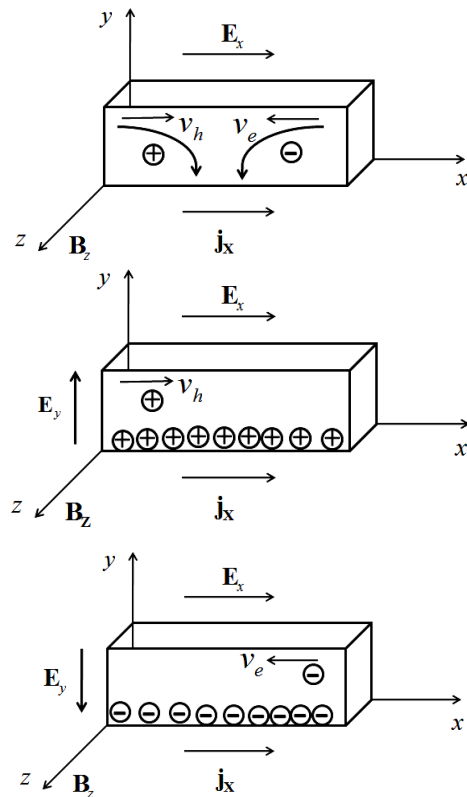
از آنجا که حاملین جریان در رساناها تنها الکترون‌ها هستند ضریب هال فقط مربوط به این دسته حاملین آزاد می‌باشد در صورتی که همان‌طور که در بالا به آن اشاره شد در یک نیم‌رسانا، هر دو حاملین (الکترون و حفره) می‌توانند در رسانش نقش ایفا نمایند.

نیم‌رسانای غیر ذاتی اغلب بر اساس بیشترین تراکم بار، مورد بررسی قرار می‌گیرد. علامت ضریب هال نوع حامل بار را نشان می‌دهد. مطابق شکل (14-2) میدان عرضی نهایی تولید شده برای نوع N به سمت جهت منفی محور y است و برای

حفره‌ها به سمت جهت مثبت محور  $y$  می‌باشد<sup>1</sup>. عبارت‌های (42-2) و (43-2) به ترتیب ضریب هال را برای نیم‌رسانای نوع  $N$  و نیم‌رسانای نوع  $P$  می‌باشند.

$$R_H = -\frac{1}{ne} \quad (42-2)$$

$$R_H = +\frac{1}{pe} \quad (43-2)$$

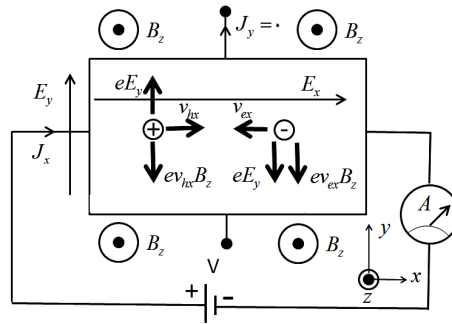


شکل 2-14. تولید یک میدان عرضی  $E_y$  ناشی از حرکت هر یک از حاملین (الکترون و حفره) توسط میدان طولی  $E_x$  و میدان مغناطیسی  $B_z$ .

1. در اینجا سهم اقلیت‌ها در ضریب هال در هر نوع نیم‌رسانا قابل صرف‌نظر کردن می‌باشد.



با یک محاسبه ساده می‌توان کوچک بودن این ضریب را در یک نیم‌رسانای ذاتی به دلیل تجمع بارهای مثبت و منفی در یک سمت از قطعه نتیجه گرفت و نشان خواهیم داد در صورتی که تحرک‌پذیری حاملین برابر باشد میدان الکتریکی القایی در راستای  $y$  خنثی خواهد شد (شکل (2-14)).



شکل 2-15. طرحواره‌ای از آزمایش اثر هال بر روی یک نیم‌رسانا، با حاملین حفره و الکترون همراه با میدان‌های الکتریکی طولی  $E_x$  و مغناطیسی  $B_z$  اعمال شده و همچنین میدان الکتریکی ایجاد شده  $E_y$  در آن.

در ادامه قصد داریم به طور تحلیلی اثر هال را برای یک نیم‌رسانا مورد بررسی قرار دهیم. با در نظر گرفتن شکل (2-15) که در بالا به آن اشاره شد، در حالت پایا جریان الکتریکی عرضی (راستای  $y$ ) به دلیل خنثی شدن نیروی عرضی وارده به حاملین بار (در اثر میدان عرضی ایجاد شده  $E_y$  در راستای  $y$ ) و نیروی مغناطیسی، برابر صفر می‌شود. جریان الکتریکی در راستای محور  $y$  برابر جمع دو جریان حفره و الکترون می‌شود. رابطه‌ی تحرک‌پذیری هر یک از حاملین بار ( $m_h$  و  $m_e$ ) با نیروی خالص وارده بر آن‌ها و سرعت‌شان به صورت  $v_h = \frac{m_h}{e} F_h$  و  $v_e = \frac{m_e}{e} F_e$  تعریف می‌شود. مطابق با شکل (2-15) دو نیروی الکتریکی و مغناطیسی به ترتیب در راستای  $x$  و  $y$  بر حاملین بار الکترون و حفره اعمال می‌گردد. اندازه‌ی نیروی خالص اعمالی بر الکترون و حفره در راستای  $y$  به صورت زیر می‌باشد:

$$\begin{aligned} F_e &= e(-E_y - B_z v_{ex}) \\ F_h &= e(E_y - B_z v_{hx}) \end{aligned} \quad (44-2)$$

با توجه به عبارت تحرک‌پذیری و نیروی خالص اعمالی می‌توان سرعت حاملین در راستای  $y$  را نتیجه گرفت.

$$\begin{aligned} v_{ey} &= m_e (-E_y - v_{ex} B_z) \\ v_{hy} &= m_h (E_y - v_{hx} B_z) \end{aligned} \quad (45-2)$$

با در دست داشتن سرعت هر یک از حاملین در هر راستا، عبارت چگالی جریان در هر راستا به دست آورده می‌شود (روابط (46-2) و (47-2)).

$$\begin{aligned} J_y &= J_{ey} + J_{hy} = \\ &= nm_e e (-E_y - v_{ex} B_z) + pm_h e (E_y - v_{hx} B_z) = 0 \end{aligned} \quad (46-2)$$

در عبارت (46-2)،  $(v_{hx}$  و  $v_{ex})$  و  $(p$  و  $n)$  به ترتیب عبارت هستند از اندازه سرعت و چگالی حاملین (الکترون و حفره). چگالی جریان در راستای  $x$  ناشی از میدان الکتریکی در همان راستا به صورت رابطه‌ی (47-2) به دست می‌آید.

$$J_x = eE_x (nm_e + pm_h) \quad (47-2)$$

رابطه‌ی تحرک‌پذیری حاملین در راستای  $x$  با سرعت حاملین و میدان طولی  $E_x$  به صورت رابطه‌های (48-2) می‌باشد:

$$v_{ex} = -m_e E_x, \quad v_{hx} = m_h E_x \quad (48-2)$$

از رابطه‌ی (46-2) می‌توان میدان الکتریکی عرضی  $E_y$  را استخراج کنیم. با قرار دادن سرعت الکترون و حفره (روابط (48-2)) در رابطه‌ی (46-2) می‌توان میدان الکتریکی عرضی  $E_y$  را به دست می‌آورد.

$$E_y = \frac{pm_h^2 - nm_e^2}{e(pm_h + nm_e)} E_x B_z \quad (49-2)$$

با استخراج میدان طولی  $E_x$  از عبارت (47-2) و قرار دادن آن در رابطه‌ی (49-2)، میدان عرضی  $E_y$  به صورت رابطه (50-2) نتیجه گرفته می‌شود.

$$E_y = J_x B_z \frac{(pm_h^2 - nm_e^2)}{e(nm_e + pm_h)^2} \quad (50-2)$$

طبق تعریف ضریب هال؛ نسبت میدان الکتریکی عرضی به حاصل ضرب میدان مغناطیسی در جریان، ضریب هال به صورت رابطه (51-2) به دست می آید.

$$R_H = \frac{E_y}{J_x B_z} = \frac{(p m_h^2 - n m_e^2)}{e (n m_e + p m_h)^2} \quad (51-2)$$

رابطه (51-2) نشان می دهد، در یک نیم رسانای ذاتی  $n=p=n_i$  در صورتی که تحرک پذیری حاملین (الکترون و حفره) برابر باشد، ضریب هال برابر صفر خواهد شد. با استفاده از رابطه رسانش  $s = e(n m_e + p m_h)$  و رابطه (51-2)، تحرک پذیری هال یک نیم رسانا با هر دو حاملین جریان که به صورت رابطه ی زیر تعریف می شود را می توان نتیجه گرفت (رابطه ی (52-2)).

$$m_H = s R_H = \frac{(p m_h^2 - n m_e^2)}{(n m_e + p m_h)} \quad (52-2)$$

برای یک نیم رسانای ذاتی، تراکم الکترون و حفره یکسان می باشد  $n=p$  ولی غالباً به دلیل سنگینی جرم مؤثر حفره ها نسبت به الکترون ها، حفره ها تحرک پذیری کمتری نسبت به الکترون دارند  $m_h > m_e$  از این رو ضریب هال منفی می باشد. همچنین معادله (2-52) نشان می دهد، در نیم رسانای غیر ذاتی از نوع N ( $n \gg p$ ) ضریب هال منفی است مگر در شرایطی بسیار خاص  $m_h \gg m_e$  که علامت ضریب هال را به نفع خود تغییر دهند و عبارت (52-2) را مثبت شود.

هم جهت بودن حرکت الکترون و حفره در راستای عرضی، باعث غیر هم جهت بودن جریان الکترون و حفره می شود که به سریع تر رسیدن به حالت پایا که همان جریان صفر است کمک می کند (شکل (2-15)). بنابراین در حالت پایا جریان عرضی حفره با جریان عرضی الکترون برابر می باشد. از این رو با استفاده از عبارت ضریب رسانش و روابط (2-46)، (2-48) و (2-50)، جهت جریان عرضی الکترون  $J_{ey}$  برابر است با:

$$J_{ey} = n m_e e (E_y + v_{ex} B_z) \\ = n m_e e E_x B_z \frac{\hat{e}_y (\hat{e}_x B_z)}{\hat{e}_x (e m_e + p m_h)} + m_e \hat{e}_y \dot{u}_x$$

$$= \frac{J_x B_z n m_e p m_h (m_e + m_h)}{(p m_h + n m_e)^2}$$

$$J_{ey} = J_x B_z (m_e + m_h) \frac{\dot{\epsilon} s_e s_h}{\dot{\epsilon} (s_e + s_h)^2} \frac{\dot{U}}{\dot{U}} \quad (54-2)$$

رابطه بالا نشان می‌دهد که در حالتی که رسانش الکتریکی الکترون  $s_e$  و حفره  $s_h$  (رابطه‌ی (2-33)) با یکدیگر برابر باشند عبارت داخل براکت بیش‌ترین مقدار را داراست که به‌ازای آن جریان عرضی  $J_{ey}$  به حداکثر مقدار خود می‌رسد. از این‌رو در راستای عرضی، یک طرف قطعه با جذب انرژی فرآیند تولید زوج (الکترون-حفره) و در طرف دیگر فرآیند نابودی‌شان که با تولید انرژی همراه است منجر به یک گرادیان دمایی در راستای  $y$  می‌شود که به اثر اتینگ‌شوسن<sup>1</sup> معروف می‌باشد. تاکنون به موادی پرداخته شد که در دمای صفر مطلق کاملاً فاقد هر گونه رسانندگی هستند ولی با بالا بردن دما تاحدی که ماده خواص بلوری خود را حفظ کند به دلیل کوچک بودن گاف انرژی می‌تواند حامل جریان الکتریکی شوند. در ادامه به دیگر دسته موادی که گاف انرژی بزرگی دارند و می‌توانند در حضور امواج الکترومغناطیس فرآیندهای مانند جذب و انتشار امواج را در خود داشته باشند را نیز به آن خواهیم پرداخت.

## 2-2 نارساناها (دی‌الکتریک‌ها)

دسته دیگری از مواد، نارساناها<sup>2</sup> هستند. نارساناها گاف انرژی بزرگی دارند که در دمای اتاق رابطه‌ی  $E_G \gg k_B T$  برقرار است<sup>3</sup>. نارساناها نیز به مانند فلزات و نیم‌رساناها به دلیل دارا بودن خواص متنوع الکتریکی، نوری، مغناطیسی، مکانیکی و ... مورد توجه قرار می‌گیرند. در ادامه ابتداء به معرفی خواص دی‌الکتریک‌ها و سپس به خصوصیات نوری مواد خواهیم پرداخت.

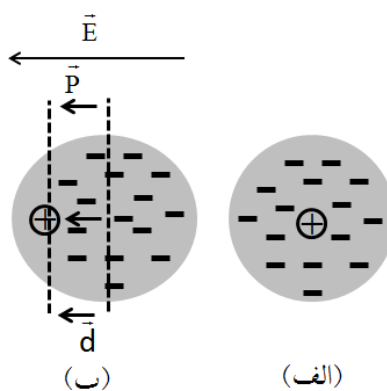
۱. Eittingshausen

2. به نارساناها، عایق نیز گفته می‌شود و دی‌الکتریک‌ها نارساناها می‌باشند که در حضور میدان الکتریکی قطبیده می‌شوند.

3. این انرژی گاف در نارساناها خیلی بزرگتر از انرژی گاف نیم‌رساناها می‌باشد، به طوری که در دماهای خیلی بالاتر از دمای اتاق (ولی کمتر از نقطه ذوب آن) الکترون‌های ظرفیت قادر به گذار به نوار انرژی رسانش نمی‌باشند.

## 1-2-2 خواص دی‌الکتریکی مواد

شاید اولین بار مفهوم خواص دی‌الکتریک‌ها را در قطعات الکترونیکی مخصوصاً در خازن‌ها آشنا شده باشید. از مهم‌ترین رفتار دی‌الکتریک‌ها می‌توان در نارساها و نیم‌رساناها مشاهده نمود. این رفتار را می‌توان به صورت قطبش‌پذیری الکتریکی مواد  $\vec{P}$  در حضور میدان الکتریکی ضعیف مشاهده نمود. بنابر تجربه معلوم شده است که این قطبش تقریباً به طور دقیق، با میدان الکتریکی اعمال شده  $\vec{E}$  متناسب است. این قطبش‌پذیری الکتریکی در هر دو حالت (میدان ثابت و یا متغیر)، از نوع مسائل جالبی است که تأثیر آن بر روی ضریب ثابت دی‌الکتریک مستقیماً دیده می‌شود که در این فصل به آن خواهیم پرداخت.



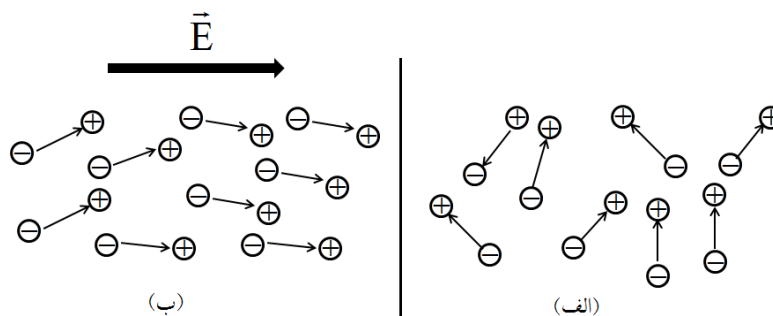
شکل 2-16. الف) توزیع کروی بار الکتریکی منفی الکترون‌ها اطراف بار مثبت، با دوقطبی الکتریکی ذاتی صفر ب) جابه‌جایی این توزیع بار الکتریکی منفی الکترون‌ها ناشی از حضور میدان که دوقطبی الکتریکی غیر صفر را به سیستم تحمیل می‌نماید.

چهار نوع رفتار دی‌الکتریکی برای مواد به صورت زیر می‌توان متصور بود:

1. **قطبش الکترونی اطراف اتم:** با حضور یک میدان الکتریکی توزیع ابر الکترونی با تقارن کروی از بین رفته و قطبش الکتریکی حاصله از آن به طور مستقیم با یک ضریب دی‌الکتریک به میدان الکتریکی وابسته می‌شود (شکل (2-16) ب). رفتارهای ناهنجار در ثابت دی‌الکتریک (یا ضریب شکست) به‌ازای بسامدهای طبیعی اتم‌ها جذب انرژی می‌کنند (بسامد تشدید). این شرایط جذب در جامدات نیز که دارای

ساختار نواری می‌باشند بین نوارهای انرژی نیز رخ می‌دهند. این پدیده اغلب در ناحیه مرئی یا ماورای بنفش اتفاق می‌افتاد.

2. حرکت یون‌های باردار شبکه: این اثر اصولاً در بلورهای یونی<sup>1</sup> جالب توجه می‌باشد که یون‌های مثبت و منفی می‌توانند نسبت به یک‌دیگر حرکت کرده که باعث قطبیده شدن شبکه‌ای در بلور می‌شود. در یک بلور یونی، بسامدهای تشدید وابسته به حرکت نسبی این یون‌های مثبت و منفی در ناحیه مادون قرمز می‌باشد.<sup>2</sup>
3. چرخش مولکول‌های قطبیده مواد: این شاید به عنوان ساده‌ترین نوع، برای درک رفتار دی‌الکتریک در مواد باشد. در یک میدان الکتریکی، دو قطبی‌ها تمایل دارند خودشان را هم راستای میدان الکتریکی کنند و دما نیز به عنوان عامل بی‌نظمی در توزیع زاویه‌ای دو قطبی‌ها در مواد نقش مهمی در کاهش ضریب دی‌الکتریک خواهد گذاشت. تقابل این دو (میدان و دما) میزان قطبیدگی محیط را مشخص می‌کند (شکل (2-17)ب).



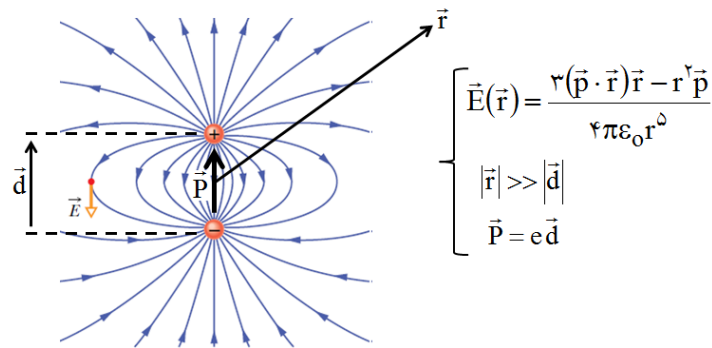
شکل 2-17. یک محیط دی‌الکتریک با اتم‌های قطبیده ذاتی الف) در حضور میدان الکتریکی ب) بدون حضور میدان الکتریکی.

4. استتار<sup>3</sup> بارهای الکتریکی در یک گاز الکترونی: همانطور که در فصل یک اشاره شد، در فلزات الکترون‌های رسانش را می‌توان به مانند الکترون‌های تقریباً آزاد در نظر

1. شبکه‌ای متشکل از یون‌های مثبت و منفی مانند بلور NaCl.

۲. Restrahlen effect  
۳. Screening

گرفت. اثر پوششی که این الکترون‌ها نسبت به یک‌دیگر ایجاد می‌کنند باعث تغییر شکل نوع برهمکنش بلند برد کولنی به یک برهم‌کنش کوتاه برد (از نوع پتانسیل یوکاوا) می‌گردد که آن از دل مفهوم ثابت دی‌الکتریک خارج می‌گردد<sup>1</sup>. این استتار دی‌الکتریکی، بدون حضور میدان الکتریکی کاملاً کروی در اطراف هر بار الکتریکی بوده و قطبش الکتریکی صفر را به آن نسبت می‌دهد ولی با حضور میدان الکتریکی این تقارن کروی از بین می‌رود.



شکل 2-18. میدان الکتریکی یک دوقطبی الکتریکی در فضا.

ساده‌ترین یک دوقطبی الکتریکی  $\hat{P}$  متشکل از دو بار الکتریکی  $+e$  و  $-e$  که با بردار  $\hat{d}$  (جهت آن از بار منفی به سمت بار مثبت می‌باشد) از یک‌دیگر جدا شده است، می‌باشد.

$$\hat{P} = e\hat{d} \quad (55-2)$$

1. الکترون‌ها به دلیل اصل طرد پائولی و برهم‌کنش کولنی که با الکترون‌های اطراف خود دارند، باعث کاهش احتمال حضور الکترون در اطراف خود می‌شوند که آن سبب می‌گردد هر الکترون با کمبود چگالی الکترونی در اطراف خود روبرو باشد. این کاهش احتمال حضور الکترون اطراف هر الکترون معادل هاله‌ایی از بار مثبتی است که الکترون‌ها را در بر می‌گیرند. این استتار که با ضریب دی‌الکتریک گاز متناسب می‌باشد باعث کاهش قدرت برهم‌کنشی بین الکترون‌ها شده و نوع برهم‌کنش را از بلندبرد ( $v \ll \frac{1}{r}$ ) به کوتاه برد ( $v \gg \frac{1}{r}$ ) پتانسیل یوکاوا تغییر می‌دهد. این پدیده را می‌توان به هر بار الکتریکی در یک محیط دی‌الکتریک تجربه کرد. به عنوان مثال، یون‌های مثبت در حضور الکترون‌های رسانش فلزات.

این دوقطبی الکتریکی  $\dot{\mathbf{P}}$  یک میدان الکتریکی  $\dot{\mathbf{E}}(\mathbf{r})$  در فضا تولید می‌کند (شکل (2-18)) که در نواحی خیلی دور از دوقطبی، میدان الکتریکی به صورت رابطه‌ی (2-56) داده می‌شود.<sup>1</sup>

$$\dot{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) = \frac{3(\dot{\mathbf{p}} \times \mathbf{r})\mathbf{r} - r^2 \dot{\mathbf{p}}}{4\pi\epsilon_0 r^5} \quad (2-56)$$

2-2-2 دی الکتریکی با اتم‌های قطبیده ذاتی و غیر ذاتی در حضور میدان الکتریکی برای فهم بهتر دی الکتریک‌ها، می‌توان شبکه‌ای از اتم‌ها را متصور بود که الکترون‌های هر اتم بسیار به هسته خود (با بار مثبت) مقید می‌باشند. در این جا از دی الکتریک‌هایی صحبت می‌کنیم که بدون حضور میدان الکتریکی خارجی مراکز بارهای اتم‌هایشان (شکل (2-16) الف) برهم منطبق و هیچ دوقطبی ذاتی برای اتم‌های دی الکتریک بدون حضور میدان الکتریکی متصور نیستیم.<sup>2</sup> ولی با حضور میدان الکتریکی، این مراکز بار از یکدیگر جدا شده و باعث پدیدار شدن دوقطبی الکتریکی در اتم‌های مواد می‌شود که با میدان اعمالی هم جهت می‌باشند (شکل (2-16) ب).

با قطبیده شدن هر یک از اتم‌های دی الکتریک، یک محیط غیرقطبی به محیط قطبیده تبدیل می‌شود که می‌توان چگالی قطبش  $\dot{\mathbf{P}}(\mathbf{r})$  را به صورت رابطه‌ی (2-57) تعریف نمود.

$$\dot{\mathbf{P}}(\mathbf{r}) DV = \sum_i \dot{\mathbf{d}}_i (eN_i) DV \quad (2-57)$$

که در رابطه‌ی (2-57)  $\dot{\mathbf{d}}_i$  بردار جدایی مراکز بارهای الکتریکی در هر اتم و  $N_i$  تعداد اتم‌های قطبیده در حجم  $DV$  می‌باشند. با در دست داشتن چگالی قطبش الکتریکی  $\dot{\mathbf{P}}(\mathbf{r})$  می‌توان چگالی بار قطبیده حجمی  $\rho_b$  و سطحی  $\mathbf{S}_b$  برای هر قطعه دی الکتریک را به دست آورد. این قطبش الکتریکی متناسب با میدان الکتریکی اعمالی

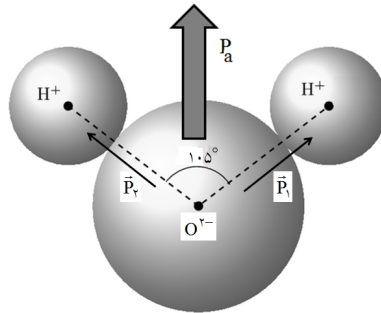
1. برای اطلاعات بیشتر به هر کتاب الکترومغناطیس می‌توانید مراجعه کنید.  
2. الکترون‌ها با بار منفی با تقارن کروی اطراف هسته با بار مثبت، توزیع یافته‌اند.



است که حضور قطبش  $\dot{\mathbf{P}}(\mathbf{r})$  در هر محیطی، اصطلاحاً گفته می‌شود که محیط قطبیده می‌باشد.

$$\dot{\mathbf{P}} = a\dot{\mathbf{E}} \quad (58-2)$$

$a$  ضریب قطبش الکتریکی که مقداری است مثبت به معنی هم راستا بودن آن با میدان الکتریکی خارجی است.

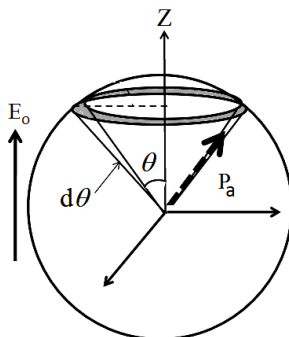


شکل 2-19: مولکول آب که ذاتاً قطبیده است.

برخی مواد از اتم‌ها و یا مولکول‌های تشکیل شده‌اند که دارای قطبش الکتریکی ذاتی هستند. به عنوان مثال، مولکول آب که یک مولکول قطبیده ذاتی است (شکل 2-19). حال اگر اتم‌های یک دی‌الکتریک دارای قطبیده ذاتی  $\dot{\mathbf{p}}_a$  باشند در دمای صفر کلوین با برهم‌کنش ضعیفی که دوقطبی‌ها با یک‌دیگر دارند قطبش الکتریکی تقریباً بزرگی را حادث می‌کنند ولی با افزایش دما (عامل بی‌نظمی) این دوقطبی‌ها یک آرایش بی‌نظمی را به خود می‌گیرند و قطبش الکتریکی کل سیستم را کاهش می‌دهند (شکل 2-17) الف.

در حضور میدان الکتریکی (عامل نظم‌دهنده) اتم‌ها با قطبش ذاتی  $p_a$ ، طوری آرایش می‌یابند که انرژی سیستم را به حداقل ممکن برسانند. با کاهش دما تا صفر کلوین و یا حضور میدان‌های الکتریکی بسیار قوی، قطبش‌ها کاملاً با میدان الکتریکی هم‌سو می‌شوند و قطبش الکتریکی حداکثری را حادث می‌شوند (شکل 2-17) ب. در صورتی که دما غیر صفر باشد (عامل بی‌نظمی کتننده)، با دریافت انرژی حرارتی  $k_B T$

قطبش‌ها از راستای میدان الکتریکی منحرف می‌شوند و قطبش الکتریکی کل سیستم کاهش می‌یابد.



شکل 2-20. قطبیدگی فضایی یک دوقطبی الکتریکی ذاتی در حضور میدان الکتریکی.

### 2-2-3 محاسبه قطبش الکتریکی یک دی‌الکتریک

دی‌الکتریکی متشکل از  $N$  دوقطبی الکتریکی در واحد حجم با قطبش ذاتی یکسان  $p_a$  را در نظر بگیرید. هر یک از این دوقطبی‌های در دمای  $T$  دارای جهت‌های فضایی متفاوت نسبت به میدان الکتریکی خارجی ثابت  $\vec{E} = E_0 \hat{k}$  به خود می‌گیرند (شکل (2-20)). این سهم‌گیری فضایی توسط تابع توزیع بولتزمن به صورت  $e^{-U/k_B T}$  مشخص می‌شود<sup>1</sup>. در تابع توزیع بولتزمن،  $U$  انرژی کسب شده توسط دوقطبی‌ها از میدان الکتریکی به صورت  $U = -\vec{P} \times \vec{E}$  می‌باشد که باعث هم‌راستایی دوقطبی‌ها با میدان الکتریکی خارجی می‌شود (عامل نظم دهنده) و عبارت  $k_B T$  همانطور که در بالا به آن اشاره شد سهم انرژی حرارتی محیطی است که عامل بی‌نظم کننده دوقطبی‌های الکتریکی نسبت به راستای میدان الکتریکی خارج می‌باشد. با به دست آوردن متوسط قطبش زاویه‌ای هر اتم به‌طور مجزا  $\langle P \rangle$  (رابطه‌ی (2-59)) و ضرب آن به تعداد دوقطبی‌ها در واحد حجم  $N$ ، قطبش کل  $P_t$  دی‌الکتریک به دست خواهد آمد  $P_t = N \langle P \rangle$ .

1. احتمال جهت‌گیری فضایی آن‌ها نسبت به جهت میدان الکتریکی خارجی.

$$\langle P \rangle = \frac{\int \dot{p}_a e^{-U/k_B T} dW}{\int \dot{e}^{-E/k_B T} dW} \quad (59-2)$$

هر دوقطبی الکتریکی در حضور میدان الکتریکی انرژی به صورت  $U = -P_a E \cos(q)$  کسب می کند. با توجه به عدم وابستگی تابع توزیع به زاویه سمتی  $f$ ، تقارن حاصله باعث می شود متوسط مؤلفه های دوقطبی های در جهت عمود بر میدان برابر صفر شوند  $\langle P_x \rangle = \langle P_y \rangle = 0$  و مؤلفه ی غیر صفر آن در راستای میدان الکتریکی باشد  $\langle P_z \rangle \neq 0$ . از این رو با استفاده از رابطه ی (59-2) متوسط قطبش هر اتم در راستای میدان الکتریکی برابر است با:

$$\langle P_z \rangle = \frac{\int_0^{\pi} [p_a \cos(q)] e^{p_a E_0 \cos(q)/k_B T} 2p \sin(q) dq}{\int_0^{\pi} e^{p_a E_0 \cos(q)/k_B T} 2p \sin(q) dq} \quad (60-2)$$

با تغییر متغیرهای به صورت  $x = \frac{p_a E_0}{k_B T} \cos(q)$  و  $y = \frac{p_a E_0}{k_B T} \sin(q)$

$$\langle P_z \rangle = \frac{\int_{-x}^x p_a y e^y dy}{\int_{-x}^x e^y dy} = \frac{p_a [y e^y - e^y]_{-x}^x}{[e^y]_{-x}^x}$$

$$\langle P_z \rangle = p_a \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}} - \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \ln \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}} = p_a \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}} - \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \ln \coth x \quad (61-2)$$

$$P_t = N \langle P_z \rangle = N p_a \xi(x) \quad (62-2)$$

$$P_t = P_s \xi\left(\frac{p_a E_0}{k_B T}\right)$$

در عبارت (62-2) از عبارت لانژون<sup>۱</sup> که به صورت  $f(x) = \coth(x) - \frac{1}{x}$  تعریف می‌شود، استفاده شده است. در معادله (62-2)  $P_s = N p_a$  به عنوان قطبش اشباع در سیستم می‌باشد که تمامی دو قطبی‌های ذاتی هم جهت میدان اعمالی می‌شوند. از بسط عبارت لانژون به صورت رابطه‌ی (63-2) استفاده نموده و به‌ازای  $x \ll 1$ ، عبارت لانژون به صورت یک معادله خطی  $f(x) \approx \frac{1}{3}x$  تبدیل می‌شود.

$$f(x) = \frac{1}{3}x - \frac{1}{45}x^3 + \frac{2}{945}x^5 - \frac{2}{9450}x^7 + L \quad (63-2)$$

با توجه به رابطه  $x = \frac{p_a E_0}{k_B T}$ ، قطبش الکتریکی ماده با دما یک رابطه عکس به صورت رابطه (64-2) پیدا می‌نماید.

$$P_t = \frac{N p_a^2 E_0}{3V k_B T} \quad (64-2)$$

با توجه به رابطه (58-2) و رابطه (64-2)، می‌توان رابطه‌ی ضریب قطبش  $a_0$  با دما و کمیت‌های میکروسکوپی را به دست آورد.

$$a_0 = \frac{N p_a^2}{3V k_B T} \quad (65-2)$$

**نکته 2-7:** با توجه به مقدار قطبش ذاتی هر اتم، شرط  $x \ll 1$  در دمای اتاق نیز برقرار می‌باشد و ضریب قطبش  $a_0$  نسبت به دما رابطه‌ی عکس دارد.

تا حالا فرض بر این است میدان الکتریکی بر روی هر اتم دی‌الکتریک برابر با میدان خارجی است. در پیوست (2-2) نشان داده شده است که علاوه بر میدان‌های خارجی، دو قطبی‌هایی پیرامون هر اتم و قطبش الکتریکی القاء شده در ماده نیز می‌تواند به مانند یک میدان الکتریکی بر هر اتم اعمال شود که به مجموع کل میدان‌ها مذکور بر روی هر اتم را میدان محلی نامیده می‌شود. با توجه به گسسته بودن بلور میدان

---

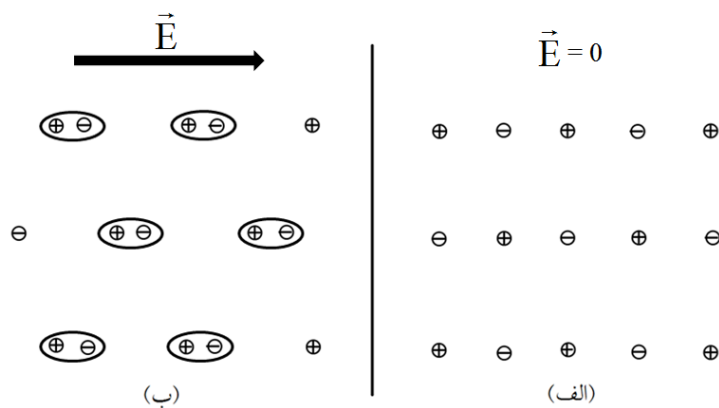
<sup>۱</sup>. Langevin

محلی  $E_{local}$  بر روی اتم A، علاوه بر میدان‌هایی که از تقریب پیوستار به دست می‌آید ( $\vec{E} = \vec{E}_o + \vec{E}_p$ ) میدان‌های دیگر که به نام میدان‌های لورنتس<sup>1</sup> ( $\vec{E}_s, \vec{E}_d$ )، نیز به آن اضافه می‌گردد ((رابطه‌ی (2-66)).<sup>2</sup>

$$\vec{E}_{local} = \vec{E}_o + \vec{E}_s + \vec{E}_d \quad (66-3)$$

#### 4-2-2 قطبش‌پذیری یونی یک دی‌الکتریک یونی در حضور میدان الکتریکی

نوع دیگری از قطبش الکتریکی در حضور میدان الکتریکی در بلورهای یونی دیده می‌شود به واسطه‌ی جابه‌جایی یون‌ها از نقطه تعادلی شبکه‌ای شان می‌باشد. با توجه به سلول واحد در بلورهای یونی ملاحظه می‌شود بدون حضور میدان الکتریکی به دلیل تقارن بلوری می‌تواند فاقد قطبش الکتریکی باشد، ولی با حضور میدان و ایجاد کشش‌های شبکه‌ای (یون‌های مثبت در جهت میدان و یون‌های منفی در خلاف آن) باعث از بین رفتن تقارن‌های شبکه‌ای و قطبیده شدن سلول واحد در این نوع دی‌الکتریک‌ها می‌شود که آن اساس پدیده پیزوالکتریکی است (شکل (2-21)).



شکل 2-21. یک شبکه یونی (الف) بدون حضور میدان الکتریکی خارجی (ب) در حضور میدان الکتریکی.

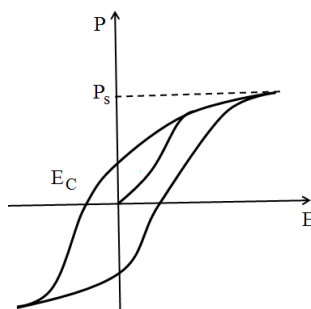
1. Lorentz

2. جزئیات بیشتر به پیوست (2-2) مراجعه شود.

## 2-2-4 فروالکتریک‌ها

برخی از دی‌الکتریک‌ها متشکل از اتم‌های قطبیده، می‌توانند بلور را قطبیده و غیرقطبیده کنند که به ترتیب آن‌ها را فروالکتریک و پادفروالکتریک می‌نامند. همه بلورهای قطبی پیزوالکتریک هستند، اما همه‌ی بلوری قطبی فروالکتریک نیستند. فروالکتریک‌ها بلورهای همچون پیزوالکتریک هستند که با کشش، قطبش سیستم آن‌ها تغییر می‌کند یا می‌توانند گشتاور دو قطبی خالصی به دست آورند<sup>1</sup>. قطبش الکتریکی آن‌ها توسط میدان الکتریکی یک رفتار پسماند<sup>2</sup> فروالکتریک را از خود نشان می‌دهند (شکل 2-22).

بلورهای فروالکتریک غالباً خواص غیر معمول با دمای گذار بحرانی بالا و پایین از خود نشان می‌دهند که فقط در بین این دو دمای گذار قطبیده هستند. نمک روشل<sup>3</sup> که اولین بلور فروالکتریک است که کشف شده است.



شکل 2-22. نمودار پسماند یک فروالکتریک.

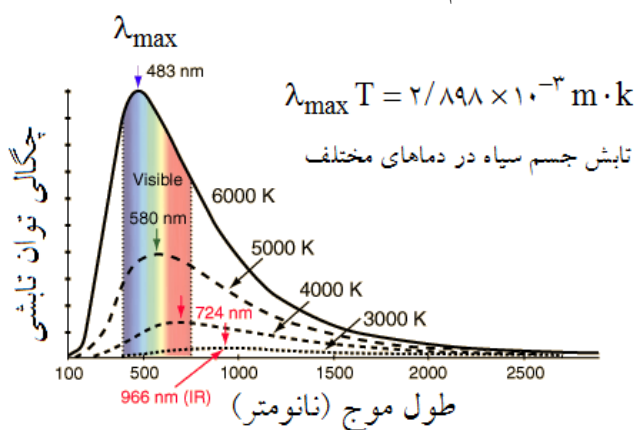
## 2-3-3 خواص نوری مواد

خواص مواد با یک سری کمیت‌های فیزیکی و قابل اندازه‌گیری، مانند: ضریب دی‌الکتریک، ضریب شکست، پذیرفتاری الکتریکی و مغناطیسی، ضریب نفوذپذیری امواج الکترومغناطیسی و غیره، مشخص می‌شوند. این کمیت‌ها نتیجه پاسخ سیستم به عوامل خارجی مانند میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی است. به عنوان مثال پراکندگی

1. این گشتاور دو قطبی (قطبش) بارهای قطبش سطحی تولید می‌کند. این بارها را می‌توان با اندازه‌گیری پتانسیل ایجاد شده بین وجوه مقابل بلور که به‌گونه‌ای عمل می‌کند که گویی یک خازن باردار است. این مواد پیزوالکتریک اثر وارونه اثر فوق را نیز از خود نشان می‌دهد، یعنی، اگر در میدان الکتریکی قرار گیرند، واپیچیده می‌شوند.

۲. Hysteresis  
۳. Rochelle ( $\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ )

کشسان اشعه‌ی ایکس مواد ساختار بلوری و سهم غیرکشسان آن، مشخصه‌ی اتم‌های تشکیل دهنده مواد و ساختارهای الکتریکی آن را نمایان می‌سازد. با پرتوی گاما با انرژی‌های بالا (بالا تر از 50KeV) پراکندگی از جنس پراکندگی کاملاً غیرالاستیک را می‌توان مشاهده نمود که به پراکندگی کامپتون معروف می‌باشد. از پراکندگی‌های مهم دیگر می‌توان به پراکندگی نوترونی (کشسانی و غیرکشسانی) اشاره نمود. این نوع پراکندگی می‌تواند اطلاعاتی در خصوص نظم مغناطیسی و خواص دینامیکی مواد را در اختیار ما بگذارد. از این رو بحث پراکندگی از شاخه‌های مهم فیزیک جهت شناسایی ناشناخته‌های دنیای میکروسکوپی مواد می‌باشد. در بین بخش به پراکندگی امواج الکترومغناطیسی با مواد خواهیم پرداخت.



شکل 2-23. الف) نواحی مختلف امواج الکترومغناطیس بر حسب طول موج و فرکانس. ب) طیف تابشی یک جسم سیاه بر حسب طول موج به‌ازای دماهای مختلف.

### 2-3-1 رفتار مواد در معرض نور مرئی

دانستن اینکه چرا برخی مواد نور مرئی را از خود عبور می‌دهند و برخی جاذب نور هستند؟ چرا فلزات براق هستند اما آب و شیشه نور را از خود عبور می‌دهند؟ چرا برخی از مواد قسمتی از نور را از خود عبور داده و قسمتی را جذب می‌کنند و رنگی

1. اطلاعات مربوط به نمایه کامپتون اطلاعات مربوط به حالت پایه سیستم است و این نمایه حساسیت بسیاری نسبت به هر گونه تغییر در ساختار الکترونی مواد از خود نشان می‌دهد. از نمایه کامپتون می‌توان چگالی توزیع الکترونی‌های غیر جایگزیده در بلور را استخراج نمود. با استفاده از نمایه کامپتون در جهت‌های مختلف بلور و تبدیل فوریه آن می‌توان بطور تجربی توزیع الکترونی‌های غیرجایگزیده راه به‌دست آورد.

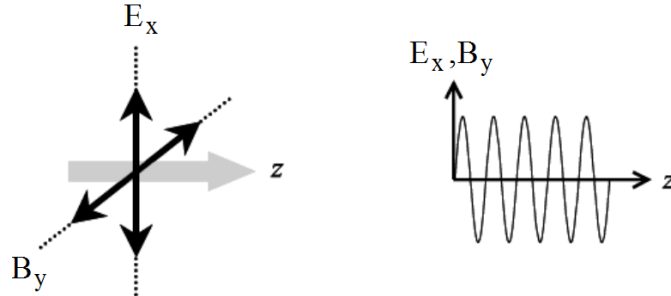
دیده می‌شوند؟ چرا شیر سفید دیده می‌شود؟ چرا ... از نوع سوالات مهمی است که مربوط به خواص نوری مواد می‌باشد که در این بخش قرار است به رفتار نوری مواد پرداخته شود.

همانطور که از فیزیک مقدماتی می‌دانیم، نور یک موج الکترومغناطیسی است. نور مرئی دارای یک طیف نوری با طول موج‌هایی از مرتبه 380 الی 750 نانومتر است. انرژی فوتون‌های این طیف نوری مرئی از مرتبه  $1/65$  الی  $3/26$  الکترون‌ولت می‌باشد. با توجه به طیف نوری پرتوی خورشید که به مانند یک طیف انرژی جسم سیاه می‌باشد (شکل (2-23))، ماکزیمم شدت نوری طیف نور خورشید روی طول موج تقریباً 500 نانومتر که معادل انرژی  $2/4$  الکترون‌ولت می‌باشد. با توجه به طیف نوری خورشید، نارساها فقط به اندازه‌ی گاف انرژی که دارند می‌توانند سهم از نور خورشید را جذب کنند. اگر اندازه‌ی گاف انرژی آن‌ها بزرگ‌تر  $3/26$  الکترون‌ولت باشد هیچ نور مرئی را جذب نخواهند نمود و کل طیف مرئی می‌تواند از ماده عبور نمایند. فلزات به دلیل عدم وجود گاف انرژی هر نور مرئی را جذب و منعکس می‌نمایند از این رو فلزات می‌توانند به عنوان بازتابندگان خوبی باشند. زمانی که مواد در معرض نور قرار می‌گیرند پدیده‌های مانند انعکاس، عبور، جذب، درخشندگی، پراکندگی و غیره اتفاق می‌افتد و در برخی شرایط در جهت‌های خاص از بلور، پدیده‌های مانند انعکاس دوتایی یا شکست نور نیز مشاهده می‌شود.

همانطور که از گذشته می‌دانیم نور یک موج الکترومغناطیس می‌باشد. از این رو در ادامه به بررسی اثرات امواج الکترومغناطیس بر روی مواد خواهیم پرداخت. امواج الکترومغناطیس متشکل از دو میدان الکتریکی و مغناطیسی که توسط روابط ماکسول به یک‌دیگر جفت شده‌اند (شکل (2-24)).

از این رو قبل از شروع بررسی خواص نوری مواد بهتر است مروری کلی از معادلات ماکسول داشته باشیم که با استفاده از این روابط می‌توان اثرات میدان‌ها را به تنهایی بر روی مواد بررسی نماییم. اتم‌ها که سازنده‌ی مواد هستند بستگی به نوع پیکربندی اتمی‌شان مسئول رفتارهای الکتریکی و مغناطیسی مواد می‌باشند.





شکل 2-24. نمایش مؤلفه‌های میدان الکتریکی و مغناطیسی به ترتیب در جهت X و y و محور Z جهت انتشار موج الکترومغناطیس می‌باشد

یک محیط به واسطه اتم‌هایشان می‌تواند یا مغناطیسی (با مغناطیدگی  $\mathbf{M}$ ) باشد یا نباشد و یا یک محیط قطبیده الکتریکی (با مغناطیدگی  $\mathbf{P}$ ) باشد یا نباشد. بنابراین رفتار امواج الکترومغناطیس بر مواد به جفت‌شدگی میدان الکتریکی و مغناطیسی امواج با قطبش‌های الکتریکی و مغناطیسی اتم‌های تشکیل دهنده آن‌ها، بستگی دارند. نتیجه این جفت‌شدگی‌ها یک پاسخ به صورت قطبش الکتریکی و یا مغناطیسی در مواد خواهد شد که با ضریبی با میدان‌ها خارجی وابسته می‌کند. این ضرایب مانند  $C_e$  و  $C_m$  به ترتیب پاسخ خطی محیط به میدان مغناطیسی و میدان الکتریکی است که به ترتیب آن‌ها را پذیرفتاری مغناطیسی و پذیرفتاری الکتریکی می‌نامند.

میدان الکتریکی  $\mathbf{E}$  قطبش الکتریکی  $\mathbf{P}$  را در مواد ایجاد می‌نماید که این قطبش، یک چگالی بار قطبیده  $\rho_b$  و یک جریان الکتریکی  $\mathbf{J}_p$  به محیط القاء می‌کند. همچنین با حضور میدان مغناطیسی  $\mathbf{B}$  باعث قطبش مغناطیسی  $\mathbf{M}$  و جریان قطبیده مغناطیسی  $\mathbf{J}_b$  در محیط مغناطیسی می‌شود. کلیه‌ی مواد گفته شده همراه با روابطشان در زیر آمده است.<sup>1</sup>

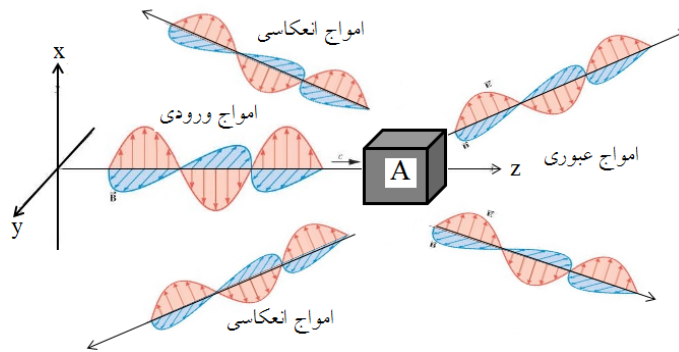
$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \\ \mathbf{B} &= \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}) \\ \mathbf{M} &= \mu_0 c_m \mathbf{H} \\ \mathbf{P} &= \epsilon_0 c_e \mathbf{E} \end{aligned} \quad \mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} \quad \mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \quad \mathbf{m} = \mu_0 (1 + c_m) \quad (67-2)$$

1. خواننده را به مطالعه‌ی کتاب الکترومغناطیس ارجاع داده می‌شود.

مغناطیسی در خلاء و  $\mathbf{e}_0$  و  $\mathbf{m}_0$  به ترتیب ضریب گذردهی میدان الکتریکی در خلاء و ضریب تراوایی مغناطیسی در خلاء و  $\mathbf{e}$  و  $\mathbf{m}$  به ترتیب ضریب گذردهی میدان الکتریکی و ضریب تراوایی مغناطیسی در مواد نامیده می‌شوند.

با استفاده از رابطه‌ی (67-2) و معادلات ماکسول (68-2) می‌توان اثرات امواج الکترومغناطیس بر مواد را بررسی نمود.

$$\begin{aligned}
 \vec{\mathbf{N}} \times \vec{\mathbf{E}} &= \frac{1}{\epsilon_0} \vec{\mathbf{r}} & \text{(I)} & \quad \vec{\mathbf{r}} = \vec{\mathbf{r}}_b + \vec{\mathbf{r}}_{\text{ext}} \\
 \vec{\mathbf{N}} \times \vec{\mathbf{B}} &= 0 & \text{(II)} & \\
 \vec{\mathbf{N}} \cdot \vec{\mathbf{E}} &= -\frac{\partial \rho}{\partial t} & \text{(III)} & \\
 \vec{\mathbf{N}} \cdot \vec{\mathbf{B}} &= \mu_0 \vec{\mathbf{J}} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} & \text{(IV)} & \quad \vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{J}}_{\text{ext}} + \vec{\mathbf{J}}_b + \vec{\mathbf{J}}_p \\
 & & & \quad \vec{\mathbf{J}}_b = \vec{\mathbf{N}} \cdot \vec{\mathbf{M}}, \quad \vec{\mathbf{J}}_p = \frac{\partial \vec{\mathbf{P}}}{\partial t}
 \end{aligned}
 \tag{68-2}$$



شکل 2-25. طرحواره‌ای از جامدی در معرض امواج الکترومغناطیس تک فام با امواج منعکس شده و عبوری.

### آزمایش:

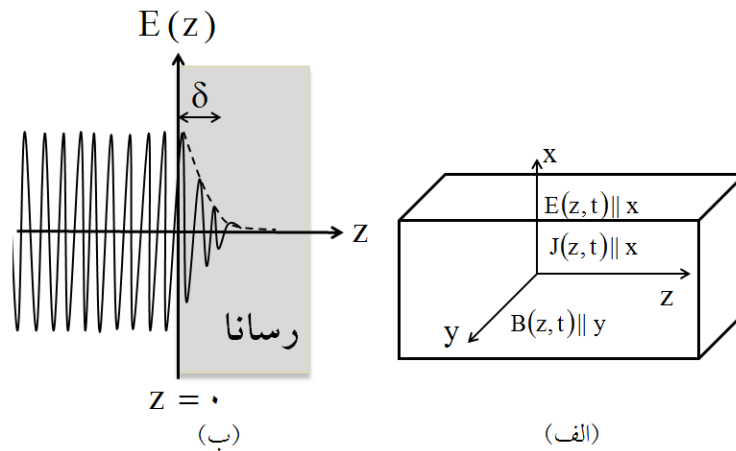
یک قطعه (فلزی یا عایق) را در معرض یک موج تک فام الکترومغناطیس با طول موجی در ناحیه مرئی قرار می‌دهیم. ملاحظه می‌کنیم که سهمی از میدان نفوذ یافته، سهمی جذب نمونه شده و مابقی سهم بازگشت و عبور می‌یابد (شکل (2-25)).

• سهم نفوذی در یک فلز: همانطور که در بالا اشاره شد یک موج الکترومغناطیس تشکیل شده است از دو میدان الکتریکی و مغناطیسی ( $\vec{E}$  و  $\vec{B}$ ) با طول موج یکسان که بر یکدیگر عمود و هر دو آنها بر بردار انتشار عمود می‌باشند (شکل (2-24)). در ادامه قصد داریم نفوذ یک موج الکترومغناطیس در یک محیط فلزی غیر مغناطیسی  $\vec{M}=0$  و غیر قطبیده الکتریکی  $\vec{P}=0$  را بررسی نماییم. مطابق شکل اگر میدان الکتریکی را در جهت محور x و میدان مغناطیسی را در جهت محور y و جهت انتشار را در جهت z در نظر بگیریم، روابط زیر بین آنها برقرار می‌باشد (شکل (2-24)).

$$\begin{aligned} \vec{E}(\mathbf{r}, t) &= E(z) e^{-i\omega t} \hat{i} \\ \vec{B}(\mathbf{r}, t) &= B(z) e^{-i\omega t} \hat{j} \end{aligned} \quad (69-6)$$

با استفاده از رابطه  $\vec{J}(\mathbf{r}, t) = \sigma \vec{E}(\mathbf{r}, t)$ ، جریان القایی  $\vec{J}_{ind}(\mathbf{r}, t)$  حاصله از میدان الکتریکی نیز به صورت رابطه (2-70) نتیجه می‌شود.

$$\vec{J}_{ind}(\mathbf{r}, t) = J(z) e^{-i\omega t} \hat{i} \quad (70-2)$$



شکل 2-26: الف) طرحواره‌ای از مؤلفه‌ی یک میدان الکترومغناطیس و جریان القاء شده در جهت میدان الکتریکی ب) میرایی میدان الکترومغناطیسی در یک رسانا.

با استفاده از رابطه‌های (69-2) و (70-2) و نیز رابطه‌ی (III) از معادلات ماکسول (68-2)، رابطه‌ی (71-2) نتیجه می‌شود.

$$\frac{dE(z)}{dz} = iwB(z) \quad (71-2)$$

با ترکیب دو رابطه (71-2) و معادله‌ی (IV) از معادلات ماکسول (68-1)، به معادله دیفرانسیل مرتبه دوم از میدان الکتریکی خواهیم رسید.

$$\frac{d^2E(z)}{dz^2} = -\frac{w^2}{c^2}E(z) - iw\mu_0 J(z) \quad (72-2)$$

برای یک محیط‌های همگن و با فرض اینکه رسانش ماده  $s$  تابعیت مکانی نداشته باشد (فرض میدان‌های جایگزیده)<sup>۱</sup> و با استفاده از عبارت چگالی جریان به صورت  $\mathbf{J}(z) = s(\omega)\mathbf{E}(z)$  در معادله دیفرانسیل عبارت (72-2)، معادله دیفرانسیل میدان الکتریکی را به صورت رابطه‌ی (75-2) برای مؤلفه‌ی میدان الکتریکی از آن استخراج می‌شود.

$$\frac{d^2E(z)}{dz^2} = -\frac{w^2}{c^2}E(z) - iw\mu_0 s \mathbf{E}(z) \quad (73-2)$$

$$\frac{d^2E(z)}{dz^2} + \frac{w^2}{c^2}E(z) + iw\mu_0 s \mathbf{E}(z) = 0 \quad (74-2)$$

$$\frac{d^2E(z)}{dz^2} + \frac{w^2}{c^2}E(z) + \frac{is}{\omega\epsilon_0} \mathbf{E}(z) = 0 \quad (75-2)$$

با مقایسه‌ی رابطه‌ی (75-2) با معادله موج در فلزات با ضریب شکست  $N$  (رابطه‌ی (76-2))

$$\frac{d^2E(z)}{dz^2} + \frac{w^2}{c^2}N^2 \mathbf{E}(z) = 0 \quad (76-2)$$

<sup>۱</sup> با در نظر گرفتن میدان‌های غیرجایگزیده مسئله کمی پیچیده‌تر خواهد شد. شرط میدان‌های جایگزیده زمانی کاربرد دارد که با توجه به نظریه‌ی درود، زمان پراکندگی خیلی بیشتر از زمان تناوب میدان‌های خارجی باشد  $\omega t \gg 1$ .

می توان رابطه ی بین ضریب شکست با رسانش الکتریکی در فلزات را نتیجه گرفت (رابطه ی (77-2)).

$$N^2 = 1 + \frac{is(w)}{we_0} \quad (77-2)$$

پاسخ موج گونه معادله (77-2) به صورت رابطه ی (78-2) می باشد.

$$\begin{aligned} \mathbf{r} E(z, t) &= (E_0 \hat{i}) e^{i \frac{2\pi w}{c} N \frac{z}{\emptyset} - wt} \hat{i} = E_0 e^{i \frac{2\pi w}{c} N \frac{z}{\emptyset} - wt} \hat{i} \\ \mathbf{r} E(z, t) &= \mathbf{r} E(z) e^{-iwt} \quad \text{پ} \quad \mathbf{r} E(z) = E_0 e^{i \frac{2\pi w}{c} N \frac{z}{\emptyset}} \hat{i} \end{aligned} \quad (77-2)$$

که در رابطه ی (78-2)  $\mathbf{r} E(z)$  مؤلفه بردار میدان الکتریکی در راستای محور x است که در راستای z منتشر می یابد را نمایش می دهد. با استفاده از رابطه ی (71-2) مؤلفه میدان مغناطیسی به صورت رابطه ی (79-2) نتیجه می دهد.

$$\mathbf{r} B(z) = \frac{2\pi N}{c \emptyset} E_0 e^{i \frac{2\pi w}{c} N \frac{z}{\emptyset}} \hat{j} \quad (79-2)$$

**نکته 2-8:** رابطه ی (79-2) نشان می دهد که مؤلفه ی میدان مغناطیسی متناسب  $\frac{1}{c}$  میدان الکتریکی است. بنابراین اثرات میدان الکتریکی بر مواد به مراتب بیش از اثرات میدان مغناطیسی خواهد بود که می توان سهم اثرات میدان مغناطیسی امواج الکترومغناطیس بر مواد را صرف نظر نمود.

با توجه به رابطه ی (77-2)، ضریب شکست یک عدد مختلط می باشد که از دو قسمت حقیقی و موهومی به صورت  $N(w) = n(w) + ik(w)$  تشکیل شده است. پاسخ موج گونه معادله ی (79-2) به صورت یک موج رونده می باشد که قسمت موهومی ضریب شکست ( $k(w)$ ) باعث میرا شدن دامنه ی موج و قسمت حقیقی آن  $n(w)$  سهم نوسانی موج را در داخل رسانا نشان می دهد (رابطه ی (80-2)).

$$\mathbf{r} E(z) = E_0 e^{i \frac{2\pi w}{c} N(w) \frac{z}{\emptyset}} \hat{i} = E_0 e^{i \frac{2\pi w}{c} (n(w) + ik(w)) \frac{z}{\emptyset}} \hat{i}$$

$$\mathbf{r} E(z) = \sum_{\mathbf{e}} E_0 e^{-\frac{wk(w)}{c}z} \hat{\mathbf{e}}_i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathbf{e}}_j \frac{e^{i\omega t - n(w)z}}{c} \quad (80-2)$$

تعریف عمق نفوذ  $d(w)$  میدان الکترومغناطیس در رسانا: عمق نفوذی است که دامنه امواج الکترومغناطیس به  $\frac{1}{e}$  مقدارش نسبت به دامنه ورودی امواج به نمونه باشد (شکل (26-2) ب).

$$\frac{E_0 e^{-\frac{wk(w)}{c}z} \Big|_{z=0}}{E_0 e^{-\frac{wk(w)}{c}z} \Big|_{z=d}} = \frac{1}{e} \quad \text{پ} \quad d(w) = \frac{c}{wk(w)} \quad (81-2)$$

**نکته 2-9:** وابستگی قسمت موهومی ضریب شکست  $(k(w))$  به فرکانس میدان ورودی، سبب می‌شود که عمق نفوذ امواج با فرکانس‌های متفاوت، متفاوت شوند که آن باعث پاشندگی امواج الکترومغناطیس می‌گردد.  
با استفاده از تعریف شدت میدان الکتریکی به صورت: مجذور دامنه‌ی میدان الکتریکی، ضریب جذب  $(a(w))$  از رابطه‌ی (83-2) نتیجه می‌شود.

$$I(z) = E(z) \times E^*(z) = |E(z)|^2 \quad (82-2)$$

$$I(z) = E_0^2 e^{-\frac{2wk}{c}z} = I_0 e^{-a(w)z} \quad (83-2)$$

که در رابطه‌ی (83-2)،  $a(w)$  ضریب جذب می‌باشد که برابر با دو برابر عکس عمق نفوذ می‌باشد.

$$a(w) = \frac{2}{d(w)} = \frac{2wk(w)}{c} \quad (84-2)$$

ضریب دی‌الکتریک مواد به صورت توان مربع ضریب شکست تعریف می‌شود  $e = N^2$ . این ضریب نیز با توجه به رابطه‌ی (77-2) از دو بخش حقیقی و موهومی تشکیل می‌شود  $(e = \epsilon_1 + i\epsilon_2)$  که می‌توان هر دو سهم حقیقی و موهومی برحسب مؤلفه‌های حقیقی و موهومی ضریب شکست  $N = n + ik$ ، نتیجه گرفت.

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= n^2 - k^2 \\ \epsilon_2 &= 2nk \end{aligned} \quad (85-2)$$

با عمل معکوس می‌توان با استفاده از رابطه‌های (85-2) ضرایب  $n$  و  $k$  را به صورت زیر بر حسب  $\epsilon_1$  و  $\epsilon_2$  به دست آورد.

$$\begin{aligned} n^2 &= \frac{1}{2} \frac{\epsilon_1 + \sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2}}{\epsilon_0} \\ k^2 &= \frac{1}{2} \frac{\epsilon_1 - \sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2}}{\epsilon_0} \end{aligned} \quad (86-2)$$

با مختلط در نظر گرفتن عبارت رسانش الکتریکی به صورت  $s(w) = s_1(w) + is_2(w)$ ، ضریب دی‌الکتریک  $e$  و مولفه‌های حقیقی و موهومی آن ( $\epsilon_1$  و  $\epsilon_2$ ) برابر است با:

$$e = N^2 = 1 + \frac{is(w)}{we_0} \quad (87-2)$$

$$\epsilon_1 + i\epsilon_2 = 1 + \frac{i(s_1(w) + is_2(w))}{we_0}$$

$$\epsilon_1 = 1 - \frac{s_2(w)}{we_0} \quad (88-2)$$

$$\epsilon_2 = \frac{s_1(w)}{we_0} \quad (89-2)$$

• قطبش‌پذیری یک دی‌الکتریک در معرض یک میدان الکترومغناطیس

در ادامه مطالب بالا، در خصوص دی‌الکتریک در معرض یک میدان الکترومغناطیس، نشان خواهیم داد که ضریب قطبش‌پذیری  $a$  به بسامد میدان اعمالی بستگی خواهد داشت. به مانند قسمت قبل سهم میدان مغناطیسی را از موج الکترومغناطیس صرف نظر می‌کنیم و فقط به سهم میدان الکتریکی آن می‌پردازیم. برای حل ساده مسئله، میدان محلی در هر نقطه از دی‌الکتریک را برابر میدان خارجی در نظر می‌گیریم.

همان‌طور که اشاره شد، در دی‌الکتریک‌ها، ابرالکترونی بسیار مقید به هسته اتم‌های شان هستند، از این رو تحت میدان‌های ضعیف فقط در اطراف هسته به اندازه ابعاد اتمی جابه‌جا می‌شوند. با در نظر گرفتن میدان الکتریکی متناوب به صورت  $\mathbf{E} = (E_0 \hat{i}) \exp(-i\omega t)$  بر روی دی‌الکتریک، نیروی حاصله بر ابر الکترونی که در اطراف هر اتم از شبکه دی‌الکتریک وارد می‌شود توسط نیروی جاذبه اتمی ناشی از بار مثبت هر هسته اتم به تقابل می‌پردازند (شکل (2-16)). این نیروی بازگرداننده به‌ازای میدان‌های الکتریکی ضعیف نسبت به جابه‌جایی ابر الکترونی خطی بوده که می‌توان قانون هوک (که معادل نیروی فنرگونه است) متصور بود. ثابت فنر  $k$  معادل شده برای یک چنین سیستمی با بسامد طبیعی  $\omega_0$  با رابطه  $k = m\omega_0^2$  داده می‌شود. سهم نیروی میرایی سیستم به صورت ضریبی از سرعت  $-\mathbf{g}m\dot{\mathbf{v}}$  می‌باشد که در آن  $\mathbf{g}$  که دارای دیماسیون عکس زمان است از این رو می‌توان آن را معادل عکس زمان واهلش سیستم  $\frac{1}{t}$  در نظر گرفت. این میرایی می‌تواند به دلیل گسیل و یا جذب انرژی و یا هر فرآیند اصطکاکی دیگر باشد. با نگاه کلاسیکی به مسئله رابطه‌ی دیفرانسیلی زیر را می‌توان نتیجه گرفت<sup>1</sup>.

$$m \frac{d^2 X(t)}{dt^2} + \frac{m}{t} \frac{dX(t)}{dt} + m\omega_0^2 X(t) = -eE_0 \exp(-i\omega t) \quad (90-2)$$

پاسخ خصوصی معادله دیفرانسیل (90-2)<sup>2</sup> که جابه‌جای ابر الکترونی نسبت به هسته اتم‌هایشان  $X(t)$  می‌باشد را نتیجه می‌دهد که برابر است با:

$$X(t) = \frac{-e E_0 \exp(-i\omega t)}{m \omega_0^2 - \omega^2 - i\omega/t} \quad (91-2)$$

1. این رابطه را می‌توان با نوشتن قانون دوم نیوتن نتیجه گرفت.  
 2. این حل این معادله دیفرانسیل را بارها در درس مکانیک کلاسیک برخورد کرده‌ایم که معادل است با حرکت یک جسم متصل به فنری با یک نیروی واداشته و اصطحکاک متناسب با سرعت.



از طرفی اگر  $N$  اتم در واحد حجم داشته باشیم که در اثر میدان الکتریکی به اندازه  $X(t)$  جابه‌جا شوند، قطبش الکتریکی حاصله از این جابه‌جایی ابرالکترونی اتم‌ها برابر با  $\mathbf{P} = Ne(-X(t)\hat{i})$  می‌باشد که در آن عبارت  $(-X(t)\hat{i})$  طبق رابطه‌ی (2-2) (55) نمایش برابر جابجایی بین قطب‌های دو قطبی است  $(\hat{d} = -X(t)\hat{i})$ . در رابطه‌ی (2-2) (92)  $P_{\text{resonant}}$  اندازه‌ی قطبش نوسانی از سهم الکترون‌هایی که در حضور میدان نوسانی، نوسان می‌کنند<sup>1</sup>.

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{P}}_{\text{resonant}} &= -NeX(t) \\ \ddot{\mathbf{P}}_{\text{resonant}} &= N \frac{e^2 E_0 \exp(-i\omega t)}{m \omega_0^2 - \omega^2 - i\omega/\tau} \end{aligned} \quad (92-2)$$

با استفاده از رابطه‌های (2-58) و (2-92) می‌توان ضریب قطبش‌پذیری  $a$  از قطبش نوسانی  $P_{\text{resonant}}$  به دست آورد (رابطه‌ی (2-93)).

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{P}}_{\text{resonant}} &= Na\mathbf{E} \\ \ddot{\mathbf{P}}_{\text{resonant}} &= \frac{e^2}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega/\tau} \end{aligned} \quad (93-2)$$

رابطه‌ی (2-93) مختلط بودن ضریب قطبش‌پذیری در حضور میدان‌های متناوب و وابستگی آن به بسامد میدان اعمالی را نشان می‌دهد.

با استفاده از تعریف ضریب دی‌الکتریک  $\epsilon$  در رابطه‌های (2-67) و نیز تعریف ضریب دی‌الکتریک نسبی به صورت  $\epsilon_r = \frac{\epsilon}{\epsilon_0}$ ، می‌توان رابطه‌ی (2-94) را استخراج نمود.

$$\epsilon_r = 1 + \frac{N e^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega/\tau} \quad (94-2)$$

1. الکترون‌های که به هسته اتم‌های خود نزدیک تر هستند به دلیل مقید بودنشان به هسته خود، نه فقط سهم نوسانی بسیار کمتری نسبت به الکترونی‌های که از هسته اتمی‌شان دورترند دارند بلکه سهم کمتری در قطبش اتمی بازی نیز می‌کنند.

با توجه به عبارت (94-2) و مختلط بودن آن، می‌توان ضریب دی‌الکتریک نسبی را به دو بخش حقیقی و موهومی به صورت  $\epsilon_r = \epsilon_1 + i\epsilon_2$  نمایش داده شوند.

$$\epsilon_1 = 1 + \frac{N e^2}{\epsilon_0 m} \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 / \tau^2} \quad (95-2)$$

$$\epsilon_2 = \frac{N e^2}{\epsilon_0 m} \frac{\omega / \tau}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 / \tau^2} \quad (96-2)$$

اگر به مسئله کمی واقع‌بینانه‌تر نگاه کنیم، طبق رابطه‌ی  $\dot{\mathbf{D}} = \epsilon_0 \dot{\mathbf{E}} + \dot{\mathbf{p}}$  از رابطه‌های (67-2)، می‌توان قطبش در داخل یک دی‌الکتریک را به دو بخش تقسیم نماییم<sup>1</sup> (رابطه‌ی (97-2)): بخشی که به آن قطبش زمینه‌ای می‌نامند  $\dot{\mathbf{p}}_{\text{background}}$  که با میدان الکتریکی به صورت  $\epsilon_0 c_e \dot{\mathbf{E}}$  رابطه دارد (2) بخش دیگر آن که قطبش نوسانی می‌نامند  $\dot{\mathbf{p}}_{\text{resonant}}$  (رابطه‌ی (92-2)).

$$\dot{\mathbf{D}} = \epsilon_0 \dot{\mathbf{E}} + \dot{\mathbf{p}}_{\text{background}} + \dot{\mathbf{p}}_{\text{resonant}} \quad (97-2)$$

$$\dot{\mathbf{D}} = \epsilon_0 \dot{\mathbf{E}} + \epsilon_0 c_e \dot{\mathbf{E}} + \dot{\mathbf{p}}_{\text{resonant}} \quad (98-2)$$

با توجه به رابطه‌ی (98-2) و  $\dot{\mathbf{D}} = \epsilon_r \epsilon_0 \dot{\mathbf{E}}$ ، ضریب دی‌الکتریک نسبی برابر خواهد شد:

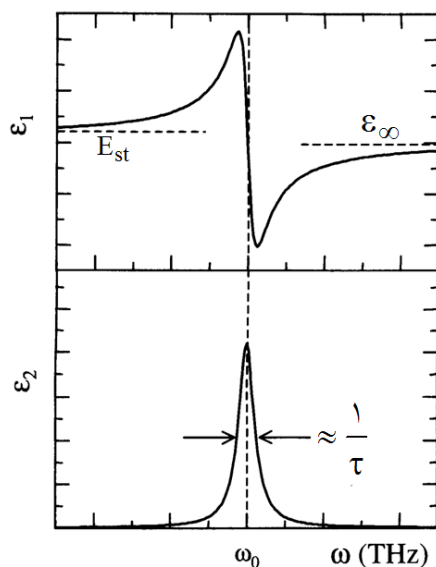
$$\epsilon_r = 1 + c_e + \frac{N e^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega / \tau} \quad (99-2)$$

با توجه به رابطه‌ی  $\epsilon_r = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ ؛ سهم حقیقی و موهومی ضریب دی‌الکتریک نسبی از رابطه‌ی (99-2) عبارت هستند:

1. اثرات محیطی دی‌الکتریک به صورت قطبش الکتریکی در حضور میدان الکتریکی را می‌توان به دو سهم پیوسته و ناپیوسته معادل دانست.

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + c_e + \frac{N e^2}{\epsilon_0 m} \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 / \tau^2} \quad (100-2)$$

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{N e^2}{\epsilon_0 m} \frac{\omega / \tau}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 / \tau^2} \quad (101-2)$$



شکل 27-2. نمایش مؤلفه‌های حقیقی و موهومی ضریب دی‌الکتریک نسبی بر حسب بسامد  $\omega$ .

در ادامه قصد داریم ضریب دی‌الکتریک نسبی  $\epsilon_r$  (رابطه‌ی (2-99)) را بر حسب مقادیر حدی بسامد  $\omega$  (صفر و بی‌نهایت) بازنویسی کنیم. به‌ازای این دو مقدار حدی بسامد، سهم نوسانی پاسخ سیستم از ضریب دی‌الکتریک گرفته می‌شود. به‌ازای بسامد صفر (میدان ثابت) رابطه‌ی (2-99) به رابطه‌ی (2-101) تبدیل می‌گردد که به آن ضریب دی‌الکتریک نسبی ایستایی  $\epsilon_{st}$  گفته می‌شود.

$$\epsilon_r = \epsilon_{st} = 1 + c_e + \frac{N e^2}{\epsilon_0 m \omega_0^2} \quad (102-2)$$

به ازای بسامدهای بسیار بالا  $w = \omega$  ضریب دی‌الکتریک نسبی  $\epsilon_r$  برابر خواهد شد با:

$$\epsilon_{\omega} = 1 + c_e \quad (103-2)$$

اختلاف بین این دو حدود از ضریب دی‌الکتریک نسبی ( $\epsilon_{st}$  و  $\epsilon_{\omega}$ )، اطلاعات مهمی بنیادی ماده را در اختیار ما می‌گذارد که برابر است با:

$$\epsilon_{st} - \epsilon_{\omega} = \frac{N e^2}{\epsilon_0 m \omega_0^2} \quad (104-2)$$

در شکل (27-2) مشاهده می‌شود که بیشترین تغییرات ضرایب دی‌الکتریک ( $\epsilon_1, \epsilon_2$ ) حول وحوش بسامد طبیعی سیستم  $w_0$  با پهنای  $\frac{1}{t} \gg Dw$  می‌باشد که مقادیر این ضرایب در این ناحیه حائض اهمیت می‌باشد یا به زبان ساده‌تر، سیستم در مقابل این ناحیه از بسامد، پاسخ داده و رفتار جاذبی از خود نشان می‌دهد. با قرار دادن عبارت  $w_0^2 - w^2 = 2w_0(w_0 - w) = 2w_0 Dw$  در رابطه‌های (2-100) و (2-101) و با استفاده از مقادیر حدی ضرایب ( $\epsilon_{st}, \epsilon_{\omega}$ )، ضرایب حقیقی و موهومی دی‌الکتریک نسبی حول وحوش بسامد طبیعی سیستم  $w_0$  برابر خواهد شد:

$$\epsilon_1(Dw) = \epsilon_{\omega} - (\epsilon_{st} - \epsilon_{\omega}) \frac{2w_0 Dw}{4(Dw)^2 + \frac{1}{t^2}} \quad (105-2)$$

$$\epsilon_2(Dw) = (\epsilon_{st} - \epsilon_{\omega}) \frac{\frac{w_0}{t}}{4(Dw)^2 + \frac{1}{t^2}} \quad (106-2)$$

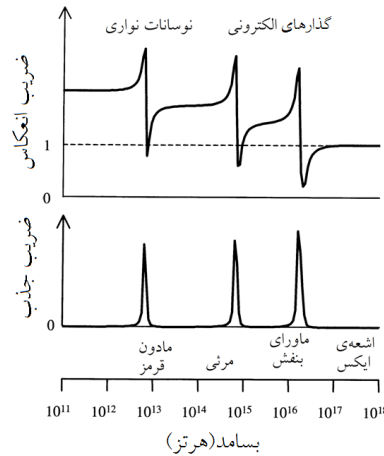
که عبارت‌های (2-105) و (2-106) به خوبی در شکل (27-2) نمایان می‌باشد.

با استفاده از رابطه‌ی ضریب شکست محیط و ثابت دی‌الکتریک نسبی  $n^2 = \epsilon_r$  و با توجه به عناصر مختلط ضریب دی‌الکتریک نسبی  $\epsilon_r = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ ، از این‌رو می‌توان ضریب شکست محیط را به صورت دو بخش حقیقی و موهومی به صورت  $N = n(w) + ik(w)$  به دست آورد و با استفاده از رابطه‌های (2-85) و (2-86)، (2-100) و (2-101) می‌توان رابطه‌های زیر را نتیجه گرفت.

$$n^2 - k^2 = \epsilon_1 = 1 + c_e + \frac{N e^2}{\epsilon_0 m} \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2/t^2} \quad (107-2)$$

$$2nk = \epsilon_2 = \frac{N e^2}{\epsilon_0 m} \frac{\omega/t}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2/t^2} \quad (108-2)$$

در این جا باید به این نکته اشاره شود که ضریب شکست  $N$  در تجربه مستقیماً قابل اندازه گیری می باشد که قسمت حقیقی آن  $n(\omega)$  سهم انعکاسی و قسمت موهومی آن  $k(\omega)$  سهم جذب نمونه را نمایش می دهد.



شکل 2-28. نمایش طرحواره‌ای وابستگی بسامدی ضرایب جذبی و انعکاسی از یک جامد فرضی در محدوده‌ی بسامدی از مادون قرمز تا اشعه‌ی ایکس می باشد. مشاهده می شود قسمت حقیقی این ثابت به صورت پله پله افت می کند. در این جا فرض شده است ماده دارای سه بسامد نوسانی  $\omega_j$  می باشند که به ترتیب عبارت هستند از:  $4 \cdot 10^{13} \text{ Hz}$ ،  $4 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$  و  $1 \cdot 10^{17} \text{ Hz}$ .

دی الکتریکی را در نظر بگیرید که دارای چندین بسامدهای طبیعی در واحد حجم باشد. اگر تعداد  $N_j$  بسامدهای طبیعی در واحد حجم داشته باشیم، عبارت‌های (2-107) و (2-108) به صورت جمع روی کلیه بسامدهای طبیعی  $\omega_{0j}$  با ضرایب  $f_j$  که از

مفاهیم فیزیک کوانتومی استخراج می‌شود (رابطه‌های (3-109) و (3-110)). از فیزیک

کوانتومی نشان داده می‌شود که جمع ضرایب  $f_j$  برابر واحد می‌شود  $\sum_j \dot{a}_j f_j = 1$ .

$$n^2 - k^2 = 1 + \sum_j \dot{a}_j \frac{N_j e^2 f_j}{\epsilon_0 m} \frac{w_{0j}^2 - w^2}{(w_{0j}^2 - w^2)^2 + w^2 / t_j^2} \quad (109-2)$$

$$2nk = \sum_j \dot{a}_j \frac{N_j e^2 f_j}{\epsilon_0 m} \frac{w / t_j}{(w_{0j}^2 - w^2)^2 + w^2 / t_j^2} \quad (110-2)$$

در برخی شرایط این جذب انرژی ناشی از گذارهای اتمی برای نارساناها (بلورهای یونی یا مولکولی) و یا بین نواری در نیم‌رساناها می‌باشد. که در این صورت ضرایب به صورت  $f_{ij}$  تعریف می‌شود که به صورت توان دوم احتمال گذار الکترون از نوار  $i$  به نوار  $j$  در رابطه زیر داده می‌شود.

$$f_{ij} = 2w_{ij} \frac{m \langle y_i | x | y_j \rangle^2}{h} \quad (111-2)$$

$$w_{ij} = \frac{E_i - E_j}{h}$$

در رابطه‌ی (111-2)  $E_i$  و  $E_j$  انرژی‌های توابع موج  $y_i$  و  $y_j$  در این گذار می‌باشند.

• سهم پرتوهای بازگشتی و عبوری: با نگاه موجی یا ذره‌ای به نور می‌توان شدت نور تابیده<sup>1</sup> به نمونه را با  $I_i$ ، شدت بازگشتی را با  $I_r = R > I_i$ ، شدت عبوری  $I_t = T > I_i$  و شدت جذب را با  $I_a = A > I_i$  نمایش داد. با توجه به این‌که جمع کل شدت‌های عبوری، انعکاسی و جذب برابر است با شدت ورودی، می‌توان بین ضرایب انعکاسی  $R$ ، عبوری  $T$  و جذب  $A$  رابطه‌ی (112-2) را نتیجه گرفت.

$$I_t + I_a + I_r = I_{in} \quad \text{و} \quad T + A + R = 1 \quad (112-2)$$

1.  $I_{in} \propto |E_0|^2$  شدت فوتون تابیده شده می‌باشد.

## 2-3-2 پدیده‌ی جذب از نقطه نظر ساختار نواری جامدات

با در نظر گرفتن ساختار نواری انرژی برای بلور می‌توان پدیده‌های قابل اتفاق در بلور را شبیه‌سازی نمود. در ادامه به ضریب جذب (که وابستگی بسیار به جزئیات کریستالی و الکترونی بلور دارد)، به عنوان یک مشخصه مهم مواد می‌پردازیم.

## • جفت‌شدگی الکترون-فوتون

از نگاه کلاسیکی پدیده‌ی جذب امواج الکترومغناطیس توسط بلور، ناشی از جفت‌شدگی هر دو میدان خارجی (الکتریکی و مغناطیسی) از موج الکترومغناطیس با دوقطبی‌های الکتریکی و مغناطیسی مواد می‌باشد. این جفت‌شدگی با دوقطبی الکتریکی به صورت  $\mathbf{p} \times \mathbf{E}$  - و با دوقطبی مغناطیسی به صورت  $\mathbf{m} \times \mathbf{B}$  - می‌توان نمایش داده شوند. در این‌جا به دلیل کوچکی سهم میدان مغناطیسی نسبت به میدان الکتریکی (نکته (2-8))، سهم جفت‌شدگی دوقطبی مغناطیسی در مقایسه با سهم جفت‌شدگی دوقطبی الکتریکی از امواج الکترومغناطیس صرف نظر می‌کنیم.

برای بررسی پدید جذب با نظریه اختلال فرض می‌شود که نمونه را در معرض میدان الکترومغناطیس ضعیفی  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$  قرار داده شده باشد. از این رو سهم جفت‌شدگی الکتریکی به قدری کوچک در نظر می‌گیریم که بتوان از نظریه اختلال استفاده نمود و مراتب بالاتر اختلال را صرف نظر نمود.

بنابراین طبق نظریه اختلال هامیلتونی کل مجموعه به صورت اختلالی به صورت

زیر نوشته می‌شود.

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H\phi \\ H\phi &= -\mathbf{r} \times \mathbf{E} \end{aligned} \quad (113-2)$$

که در رابطه (113-2)  $H_0$  هامیلتونی بدون جفت‌شدگی و  $H\phi$  سهم اختلالی در

هامیلتونی است.

قطبش الکتریکی برای توزیع بار الکتریکی  $r(r)$  طبق رابطه  $\mathbf{p} = \int_V \mathbf{r} r(r) dv$  داده

می‌شود. که در آن  $r(r)$  چگالی توزیع الکترونی است که می‌تواند مربوط به سهم الکترون‌های جایگزیده و غیرجایگزیده در یک بلور باشد. مشکلی که پیش‌رو داریم این است که تابع موج الکترون‌های غیرمغزی غیرجایگزیده در بلور گسترده می‌باشد<sup>1</sup> و انتگرال قطبش روی کل بلور با ابعاد توده‌ای<sup>2</sup>، حاصل بینهایت می‌دهد که بی‌معناست. از این‌رو جفت‌شدگی کلاسیکی نمی‌تواند پاسخ مناسبی برای قطبش الکتریکی در جامدات در اختیار ما قرار دهد اما در مقابل در نگرش کوانتومی، مسئله جفت‌شدگی میدان الکتریکی با الکترون‌های بلور کاملاً متفاوت بوده و توصیف مناسب‌تری از پدید جذب ارائه می‌دهد. در ادامه قصد داریم ابتدا جذب اتمی را بیان نماییم و سپس آن را به یک بلور تعمیم دهیم.

**جذب اتمی:** از فیزیک اتمی به یاد داریم، با جذب فوتون توسط الکترون و گذار آن به ترازهای خالی با احتمال  $W_{if}$  نشان داده می‌شود. که احتمال جذب نور توسط الکترون در یک ساختار اتمی با قاعده‌ی طلایی فرمی مشخص می‌شود (رابطه‌ی 2-114).

$$W_{if} \propto |\langle i | H \phi_f \rangle|^2 d(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (114-2)$$

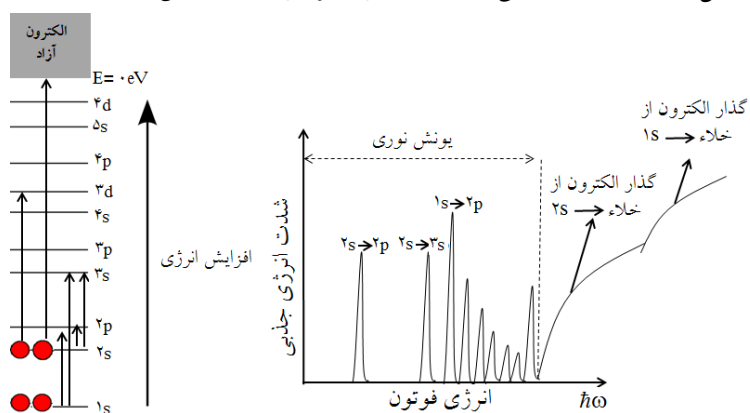
اندیس‌های  $i$  و  $f$  به ترتیب حالت‌های اولیه و نهایی الکترون در فرآیند گذار الکترون به واسطه جذب فوتونی با انرژی  $\hbar\omega$  می‌باشد. این رابطه نشان می‌دهد فقط گذارهایی مجاز هستند که اولاً عبارت  $|\langle i | H \phi_f \rangle|$  غیر صفر باشد و ثانیاً ترازهایی از انرژی بایستی وجود داشته باشند که مقدار فاصله بین آن‌ها برابر با انرژی فوتون ورودی باشند ( $E_f - E_i = \hbar\omega$ ). برای فهم بهتر مطالب بالا بطور طرحواره‌ای ترازهای اتمی یک

1. زیرا تابع موج الکترون در کل بلور بلوخ‌گونه می‌باشد که به معنی گسترده شدن چگالی توزیع الکترونی در بلور است  $\cdot r(r) = y_k^*(r) y_k(r)$

۲. Bulk



اتم چهار الکترونی را طبق شکل (29-2) در نظر می‌گیریم. طیف جذبی حاصل از این ترازهای اتمی در شکل (29-2) نشان داده شده است. مطابق شکل ابتداء یک طیف جذبی کاملاً گسسته‌ای خواهیم داشت که ناشی از جذب فوتون توسط الکترون و گذار الکترون به ترازهای خالی بالاتر که سمت راست شکل (29-2) طیف جذبی آن‌ها را به‌طور طرحواره‌ای نمایش داده شده است.



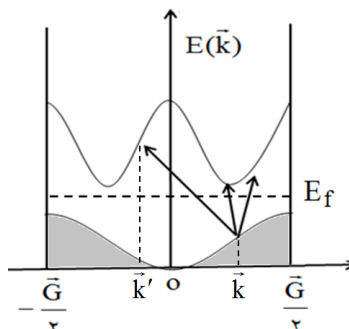
شکل 29-2. طرحواره‌ای از طیف جذب یک اتم چهار الکترونی.

هر چه انرژی فوتون‌های ورودی بالاتر باشد احتمال گذار الکترون به خلاء بیشتر خواهد شد و طیف پیوسته‌ای را تشکیل می‌دهد. آستانه این طیف انرژی پیوسته را انرژی یونش فوتونی<sup>۱</sup> می‌نامند.

**جذب در یک بلور دی‌الکتریک یا نیم‌رسانا:** این پدیده در آن‌ها کمی متفاوت‌تر است. به جای تراز انرژی گسسته با یک سری نوار انرژی (با پهنای انرژی) روبرو هستیم که حالت‌های پر از حالت‌های خالی توسط یک گاف انرژی  $E_G$  جدا شده‌اند. با توجه به شکل (2-30) الکترون با بردار موج  $k$  می‌تواند طبق قاعده‌ی طلایی فرمی (رابطه‌ی (2-114)) طیف پیوسته‌ای از انرژی را جذب نماید. این گذارها با توجه به بردار موج و انرژی فوتون ورودی گذارهای متفاوتی را می‌تواند به نوارهای انرژی

<sup>۱</sup> Photon-Ionization

خالی داشته باشند. در ادامه می‌خواهیم به این سوال پاسخ دهیم آیا مطابق شکل (2-30) می‌توان به‌ازای هر بردار موج الکترون  $\vec{k}$  در منطقه اول بریلوئن، با جذب فقط فوتونی (بدون هیچ‌گونه جذب فوتونی) گذارهایی با بردارهای موج متفاوت  $\vec{k}'$  داشته باشیم؟.



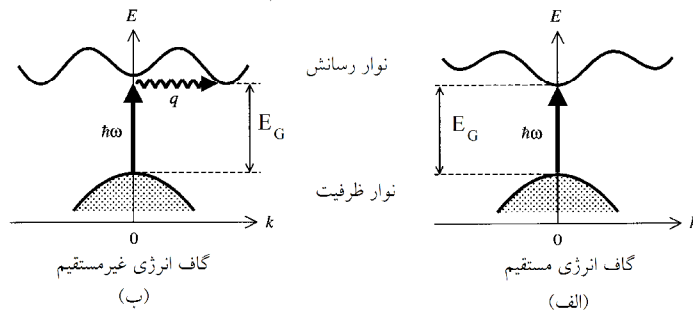
شکل 2-30. نمایش طرحواره‌ای از یک گذار در یک بلور می‌باشد که نشان داده می‌شود که گذارها قابل اتفاق فقط فوتونی تقریباً عمودی هستند.

برای پاسخ به سوال بالا ابتدا بایستی جمله اختلال را به‌دست آورد که همان سهم جفت‌شدگی است (رابطه‌ی (2-113)) و سپس با استفاده از رابطه‌ی (2-114) و نیز تابع موج الکترون در بلور (تابع موج بلوخ‌گونه) احتمال گذار را محاسبه نمود.

**نکته 2-10:** نکته مهمی که قبل از محاسبات می‌توان به آن رسید این است که در یک نیم‌رسانا با گاف انرژی از مرتبه  $1\text{eV}$ ، برای گذار الکترونی نوار ظرفیت به نوار رسانش، فوتونی با حداکثر طول موج حدود  $\lambda = 10^{-6}\text{m}$  (در محدوده نور مرئی) نیازمند است. از طرفی طول موج الکترون‌ها در بلور که توسط تابع موج بلوخ نمایش داده می‌شود از مرتبه فاصله بین اتمی  $\lambda \gg 10^{-9}\text{m}$  است که خیلی کوچکتر از طول موج نور مرئی می‌باشد ( $\lambda \ll R$ ). با توجه به این‌که عدد موج  $k$  (با اندازه حرکت) با طول موج نسبت عکس دارد  $k = 2\pi/\lambda$ ، از این‌رو اندازه حرکت فوتون جذب شده توسط الکترون خیلی کوچک‌تر از تغییرات حداکثری اندازه حرکت الکترون‌های که از نوار ظرفیت به

نوار رسانش گذار می‌یابند<sup>1</sup> که متناسب با  $1/R$  می‌باشند. با مقایسه‌ی عدد بردار موج فوتون ورودی  $k_{\text{photon}} = 2p/l$  با بردار موج الکترون‌های نوار ظرفیت  $1/R$  می‌توان نتیجه گرفت که بردار موج انتقالی از طرف فوتون به الکترون (در هنگام جذب) را می‌توان در مقایسه با بردار موج الکترون‌های ظرفیت صرف نظر نمود.

از این رو در گذار مستقیم و غیرمستقیم، جذب فوتون هیچ نقش قابل ملاحظه‌ای در تغییر اندازه حرکت بلوری الکترون بازی نمی‌کند. در روابط پایستگی می‌توان اندازه حرکت فوتون جذب شده را نادیده بگیریم، که باعث می‌شود بردار گذار الکترون کاملاً عمودی در نظر گرفته شود که در ادامه به آن خواهیم پرداخت.



شکل 2-31. الف) نمایش یک گذار مستقیم ب) نمایش یک گذار غیرمستقیم.

### گذارهای مستقیم و غیرمستقیم در نیم‌رسانا

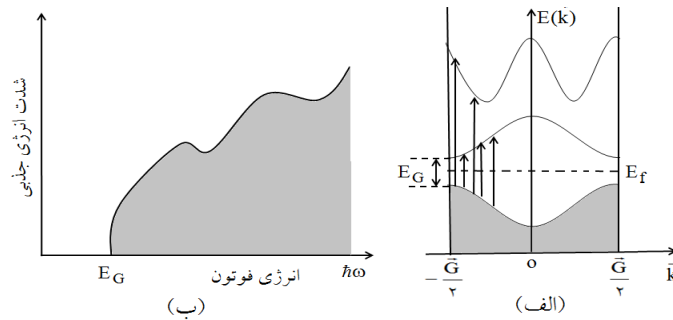
در نیم‌رساناها و دی‌الکتریک‌ها به دلیل وجود گاف انرژی، طیف جذبی امواج الکترومغناطیس از یک طول موج خاصی شروع به جذب می‌کند. نبود گاف انرژی در فلزات طول موج جذبی از صفر آغاز می‌گردد.

شکل (2-31) الف، نمایش یک گذار مستقیم می‌باشد که با جذب فوتونی با انرژی حداقلی برابر با اندازه انرژی گاف، پدیده‌ی جذب صورت می‌پذیرد. در این گذار مینیمم نوار رسانش در مقابل ماکزیمم نوار ظرفیت قرار می‌گیرد مانند GaAs و گاف

1. حداکثر تغییرات بردار موج الکترون که به واسطه‌ی جذب فوتون ورودی می‌تواند داشته باشد برابر است با بردار موج فوتون ورودی است که این تغییرات بسیار کوچک‌تر از تغییرات اندازه حرکت در منطقه بریلوئن

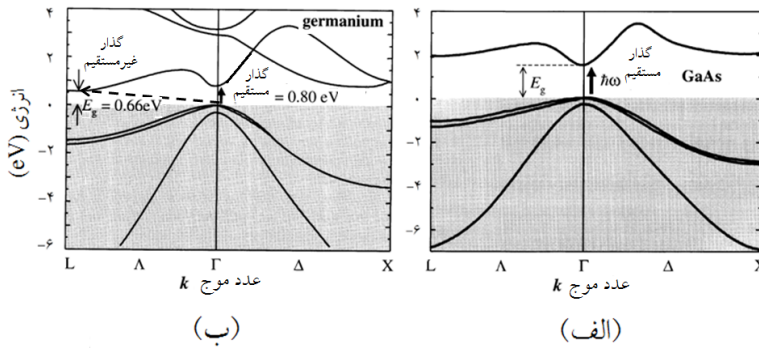
$$\text{می‌باشد } k_i - k_f = Dk \gg \frac{1}{R} \gg k_{\text{photon}}$$

انرژی بین‌شان را، گاف نوری<sup>۱</sup> گفته می‌شود. در حالتی که اکستریم‌ها (نقطه مینیمم نوار رسانش و نقطه ماکزیمم نوار ظرفیت) در مقابل یک‌دیگر قرار نگیرند، با توجه به این‌که گذارها بایستی عمودی باشند از این‌رو حداقل انرژی جذب فوتونی برای این گذار همراه با جذب یک فونون (کوانتوم ارتعاشات شبکه‌ای) صورت می‌پذیرد به این نوع گذار، گذار غیرمستقیم گفته می‌شود (شکل (2-31)ب).



شکل 2-32. نمایش طرحواره از نوارهای انرژی یک جامدی با گاف انرژی  $E_G$  همراه با طیف جذبی آن.

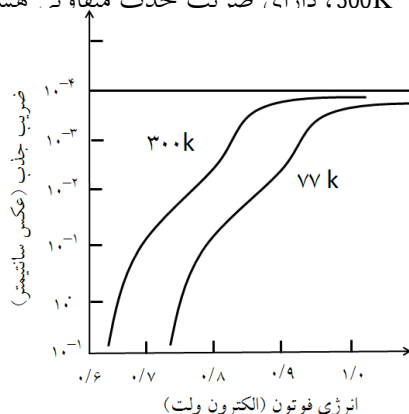
شکل (2-32) طرحواره‌ای از طیف جذبی هر جامدی که دارای نوارهای انرژی با گاف انرژی مستقیم است را نمایش می‌دهد. شروع این جذب از گاف انرژی آغاز شده و شدت جذب با افزایش انرژی فرودی فوتون افزایش می‌یابد.



شکل 2-33. (الف) نوار انرژی نیم‌رسانای گالیم-آرسنیک GaAs با یک گاف انرژی مستقیم (ب) نوار انرژی یک نیم‌رسانای ژرمنیوم Ge با گاف انرژی غیر مستقیم.

۱. Optical Gap

نیم رساناهایی مانند ژرمانیم و سیلیسیوم دارای گاف انرژی غیرمستقیم هستند (شکل (2-33)ب). با مشاهده نمودار ضریب جذب فوتونی برای بلور ژرمانیوم در دو دمای متفاوت 77 K و 300K، داده‌ها، ضریب جذب متفاوت تر هستند (شکل (2-34)).

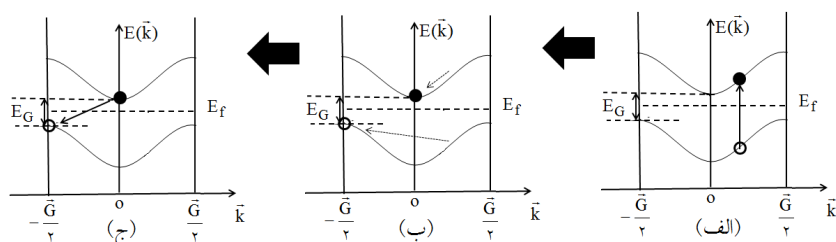


شکل 2-34. طیف جذبی بلور ژرمانیوم Ge در دو دمای 77 و 300 کلوین.

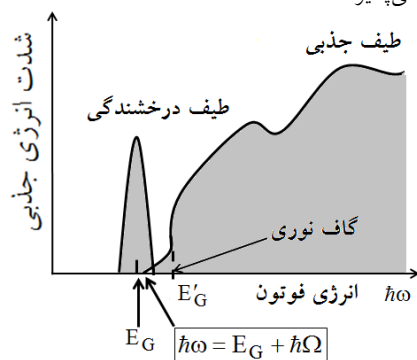
شکل (2-35) طرحواره‌ی از فرآیند جذب تا بازترکیب برای یک جامدی با گاف انرژی غیرمستقیم را نمایش می‌دهد. الکترون‌ها ظرفیت این جامد بعد از جذب انرژی که بیش از مقدار گاف انرژی مجموعه می‌باشند گذار یافته و سپس الکترون و حفره ایجاد شده به ترتیب در نوار رسانش و ظرفیت به سمت اکستریم‌های خود حرکت کرده تا حالت برانگیختگی انرژی سیستم را به حداقل انرژی برسانند به این معنی که الکترون‌ها در نوار رسانش به سمت مینیمم نوار و حفره‌ها در نوار ظرفیت به سمت ماکزیمم نوار حرکت می‌کنند که به این فرآیند حالت واهلش<sup>1</sup> نامیده می‌شود (شکل (2-35)ب) این انتقال در کسری بسیار کوچکی از زمان حدوداً  $10^{-14}$  ثانیه اتفاق می‌افتد. مرحله آخر عمل بازترکیب الکترون و حفره می‌باشد (شکل (2-35)ج) که به کندی نسبت به ریزش الکترون و حفره در نقاط اکستریم صورت می‌پذیرد که از مرتبه  $10^{-6}$  ثانیه می‌باشد. این فرآیند بازترکیب برای یک گاف غیرمستقیم با تولید و یا جذب فونون همراه می‌باشد. این تأخیر باعث تجمع الکترون‌ها و حفره در نقاط اکستریم شده که شدت بازترکیب‌شان باعث درخشندگی قوی در ماده با طول موجی متناسب با گاف

<sup>1</sup>. Relaxation

انرژی واقعی بلور می‌شود. در شکل (2-36) ستیج درخشندگی را اطراف گاف انرژی نشان داده شده است.<sup>1</sup>



شکل 2-35. فرآیند گذار و بازترکیب الف) عمل جذب فوتونی ب) عمل واهلش (الکترون به سمت مینیموم نوار رسانش و حفره به سمت ماکزیمم نوار ظرفیت حرکت می‌کنند) ج) عمل بازترکیب صورت می‌پذیرد.

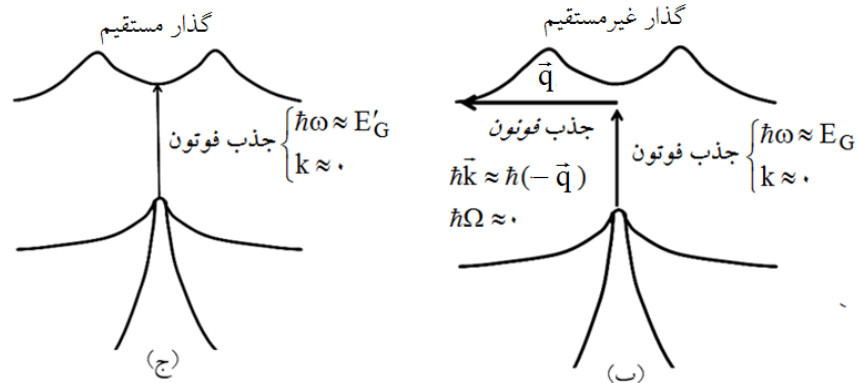
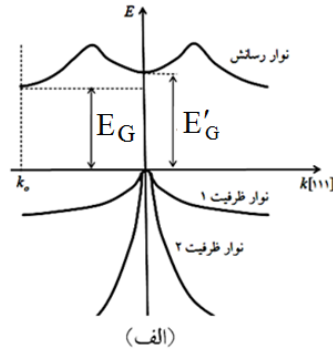


شکل 2-36. طیف جذبی یک نیم‌رسانا با گاف انرژی غیرمستقیم همراه با طیف درخشندگی ناشی از عمل بازترکیب در محدوده گاف انرژی نیم‌رسانا. شروع انرژی جذب برابر است با  $h\nu = E_G + h\nu$  و ناشی از تولید فونون می‌باشد.

در شکل (2-37) طرحواره‌ای از نوار انرژی جامد ژرمانیوم در فضای اندازه حرکت  $k$  در جهت [111] در نظر گرفته شده است. در شکل نمایش یک نوار رسانش با دو نوار ظرفیت ولی با رویهم افتادگی در نقطه  $k=0$  (نقطه  $G$ ) می‌باشد که گاف انرژی سیستم را با  $E_G$  نشان می‌دهد. در شکل (2-37) ملاحظه می‌شود که الکترون‌های بالاترین نوار ظرفیت  $k=0$  قادر نیست که به تنهایی با جذب یک فوتون با انرژی  $E_G$  به

1. در صورتی که گاف انرژی مستقیم باشد عمل بازترکیب تقریباً آبی بود و با جذب انرژی بلور انرژی جذب شده سریعاً بدون تأخیر ساطع می‌گردد و ستیج درخشندگی ضعیفی با انرژی گاف را پدید می‌آورد.

نوار رسانش گذار یابد. از این رو با جذب فوتون در سیستم، الکترون اندازه حرکت خود را به اندازه‌ی بردار موج فونونی تغییر می‌دهد تا به پایین‌ترین نقطه نوار رسانش برساند (شکل 2-37) ب گذار غیر مستقیم). با جذب انرژی به اندازه  $E_G$  الکترون به طور مستقیم بدون تغییر اندازه حرکت به نوار رسانش می‌رود که از نوع گذار مستقیم انجام می‌پذیرد (شکل 2-37) ج.



شکل 2-37. الف) نوار انرژی جامد ژرمانیوم با انرژی گاف  $E_G$  بین نوارهای ظرفیت و رسانش ب) گذار غیرمستقیم جذب فوتون توسط الکترون ظرفیت با بردار موج  $k=0$  و گذار آن با بردار موج  $\vec{q}$  در نوار رسانش و جذب فوتون با اندازه حرکت  $\hbar\vec{q}$  ج) گذار مستقیم با جذب فوتون با انرژی  $E_G$  بدون تغییر در اندازه حرکت بلورین الکترون.

**نکته 2-11:** به‌ازای جذب فوتون و تولید شبه ذرات الکترون-حفره که توسط یک نیروی کولنی هیدروژن‌گونه به یک‌دیگر جفت شده‌اند یک حالت اکسیتون در گاف انرژی پدیدار می‌شود که در بخش (2-4) به آن خواهیم پرداخت.

همان‌طور که اشاره شد، در گذار مستقیم (یا بازترکیب مستقیم) این پدیده بدون جذب و یا تولید فونون اتفاق می‌افتد ولی در گذار غیرمستقیم (یا بازترکیب غیرمستقیم) این پدیده همراه با جذب و یا تولید فونون همراه می‌باشد.

**پایستگی اندازه حرکت در گذارهای غیرمستقیم:** رابطه‌ی (2-115) فرآیند پایستگی اندازه حرکت قبل و بعد از جذب و یا تولید فوتون و فونون می‌باشد.

$$\begin{aligned} \mathbf{hk}_2 \pm \mathbf{hq} &= \mathbf{hk}_1 \pm \mathbf{hk}_{\text{photon}} \\ \mathbf{hk}_2 \pm \mathbf{hq} &= \pm \mathbf{hk}_{\text{photon}} \gg 0 \end{aligned} \quad (115-2)$$

که رابطه‌ی (2-115)  $\mathbf{hk}_1$  و  $\mathbf{hk}_2$  اندازه حرکت بلوری الکترون قبل و بعد از گذار و  $\pm \mathbf{hq}$  اندازه حرکت فونون جذب شده (با علامت منفی) و تولید شده (با علامت مثبت) و  $\pm \mathbf{hk}_{\text{photon}}$  اندازه حرکت فوتون جذب شده (با علامت مثبت) و تولید شده (با علامت منفی) که ناشی از عمل بازترکیب می‌باشد که با توجه به نکته (2-10) می‌توان سهم اندازه حرکت فوتون را در این فرآیند نادیده گرفت.

**نکته 2-12:** حداکثر انرژی فونون تولید یا جذب شده از مرتبه  $k_B T_D$  است (که در آن  $T_D$  دمای دبای سیستم می‌باشد) که مقدارش بسیار کوچک‌تر از 1eV است. بنابراین در روابط پایستگی انرژی می‌توان از انرژی فونون تولید یا جذب شده صرف‌نظر نمود. از این‌رو بردار اندازه حرکت فونون تولید یا جذب را می‌توان کاملاً افقی (شکل 2-37) ب و شکل (2-31) ب) فرض نمود.

$$\begin{aligned} (\epsilon_2 \pm \mathbf{hW}) &= (\epsilon_1 \pm \mathbf{hw}_{\text{photon}}) \\ \mathbf{De} \pm \mathbf{hw}_{\text{photon}} &= \mathbf{mhW} \gg 0 \end{aligned} \quad (116-2)$$

کمیت‌های رابطه‌ی (2-116) عبارت هستند از:  $\epsilon_1$  و  $\epsilon_2$  انرژی الکترون قبل و بعد از گذار و  $\mathbf{hW}$  و  $\mathbf{hw}_{\text{photon}}$  به ترتیب انرژی فونون و فوتون جذب و تولید شده در فرآیند گذار و بازترکیب. با توجه به نکته (2-12) و کوچکی انرژی فونون جذب شده و یا تولید شده در رابطه‌ی (2-116) قابل صرف‌نظر کردن می‌باشد.

**نکته 2-13:** می‌دانیم انرژی فوتون‌های مرئی از مرتبه  $1/65$  الی  $3/26$  الکترون‌ولت می‌باشند. از این‌رو موادی که دارای گاف انرژی بزرگ‌تر از  $3/26$  الکترون‌ولت باشند

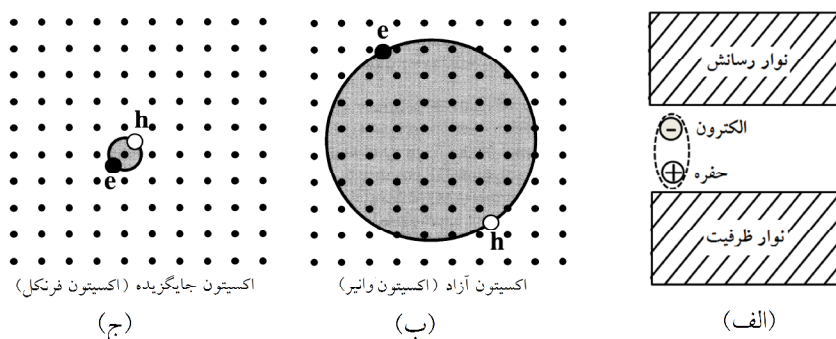


جاذب نورهای مرئی نمی‌باشند و موادی که گاف انرژی آن‌ها کوچک تر از  $1/65\text{eV}$  جاذب کامل نورهای مرئی می‌باشند.

**نکته 2-14:** در خصوص فلزات با توجه به این‌که انرژی فرمی نوار رسانش را قطع می‌کند به این معنی است که فلزات فاقد گاف انرژی هستند، از این رو جاذب کلیه نور تابشی می‌باشند. از طرفی نبود گاف انرژی سریعاً عمل باز ترکیب در زمان بسیار کوتاهی اتفاق می‌افتد و کلیه فوتون‌های جذب شده باز تولید می‌شوند که آن به منزله‌ی بازتاب کلیه فوتون‌های ورودی یا صفر شدن ضریب عبوری است.

## 2-4 اکسیتون‌ها

همانطور که در بخش قبل به آن اشاره شد با جذب نوری در یک نیم‌رسانا شبه ذرات الکترون-حفره پدید می‌آید که می‌توانند به مانند اتم هیدروژن یک حالت پیوندی بین‌شان برقرار گردد. به این حالت پیوندی اکسیتون نامیده می‌شود (شکل 2-38).



شکل 2-38. الف) نمایش طرحواره‌ای از تولید یک اکسیتون در یک نیم‌رسانا ب) اکسیتونی با توابع موج گسترده (اکسیتون وانیر) ج) اکسیتونی با توابع موج جایگزیده (اکسیتون فرنکل).

### • اکسیتون‌های آزاد (اکسیتون وانیر)

در هنگام جذب فوتون و تولید شبه ذرات الکترون و حفره، یک سری حالات انرژی مقید شده‌ی هیدروژن‌گونه، به سیستم تحمیل می‌کند. این شبه ذرات (الکترون-حفره)

می‌توانند تابع موج یک مجموعه دو ذره‌ای جایگزیده در ابعاده اتمی داشته باشند (اکسیتون فرنکل<sup>۱</sup>) و یا در شبکه به‌ازای چندین سلول واحد گسترده باشند (اکسیتون وانیر<sup>۲</sup>) (شکل (2-38)).

بر هم‌کنش این دو شبه ذره (الکترون-حفره) در یک محیط نیم‌رسانا (الکترون در نوار رسانش و حفره در نوار ظرفیت) به دلیل پدیده‌ی استتار<sup>۳</sup> به نسبت ضریب دی‌الکتریک محیط  $\epsilon_r$  کاهش می‌یابد که در رابطه‌ی (2-117) نشان داده شده است.

$$f(r) = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \epsilon_r r^2} \quad (117-2)$$

ترازهای انرژی مجموعه‌ی شبه ذرات الکترون و حفره در محیطی با ضریب دی‌الکتریک نسبی  $\epsilon_r$  که از حل معادله شرودینگر با هامیلتونی (2-118) نتیجه می‌شود، به‌دست می‌آید. در رابطه (2-118)  $m_e^*$  و  $m_h^*$  جرم‌های مؤثر شبه ذرات الکترون و حفره می‌باشند.

$$H = \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 + \frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla_h^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \epsilon_r r^2} \quad (118-2)$$

در رابطه‌ی (2-118) الکترون دارای بار الکتریکی منفی  $-e$  و حفره دارای بار الکتریکی مثبت  $+e$  می‌باشند. دو جمله اول رابطه‌ی (2-118) انرژی جنبشی الکترون و حفره و جمله‌ی سوم پتانسیل برهم‌کنشی بین الکترون و حفره می‌باشد.<sup>۴</sup> هامیلتونی (2-118) همان هامیلتونی اتم هیدروژن است با این تفاوت که در اتم هیدروژن به‌جای جرم‌های مؤثرها از جرم‌های واقعی الکترون و پروتون و ضریب دی‌الکتریک نسبی را برابر با یک  $\epsilon_r = 1$ ، در نظر گرفته می‌شود (محیط خلاء).

۱. Frenkel exciton

۲. Wannier exciton

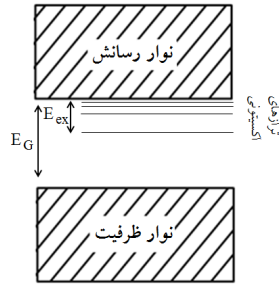
۳. به دلیل پدیده قطبیدگی الکتریکی محیط توسط بار الکتریکی شبه ذرات و اثرات پوششی بارالکتریکی اطرافشان، به‌طور جداگانه باعث کاهش بار الکتریکی شبه ذرات می‌شود. این کاهش برهم‌کنش، توسط ضریب دی‌الکتریک محیط مشخص می‌گردد.

۴. این دو شبه ذرات به دور مرکز جرمشان به مانند اتم هیدروژن‌گونه دوران می‌کنند.

در یک نیم‌رسانا، با توجه به دو نوار انرژی رسانش و ظرفیت با گاف انرژی  $E_G$  که از یکدیگر جدا شده‌اند و از طرفی این مجموعه‌ی دو ذره‌ی اکسی‌تونی (الکترون-حفره)، طوری در محیط نیم‌رسانا حرکت می‌کنند که تابع موج اکسی‌تونی نسبت داده‌شده به آن دارای اندازه حرکت بلوری  $\hbar \mathbf{k}$  باشد، از این‌رو انرژی یک چنین مجموعه‌ای به صورت زیر می‌باشد.

$$E(\mathbf{k}) = E_G - \frac{m_e^4}{2(4\pi\epsilon_0 e_T)^2 \hbar^2 n^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2M^*} \quad (119-2)$$

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \quad M^* = m_e^* + m_h^*$$



شکل 2-39. طرحواره‌ای از ترازهای اکسی‌تونی در ناحیه‌ی گاف انرژی.

جمله دوم از عبارت (119-2) همان ترازهای انرژی اتم هیدروژن با جرم کاهش‌یافته  $m$  در محیطی با ضریب دی‌الکتریک نسبی  $\epsilon_T$  می‌باشد که به ترازهای اکسی‌تونی معرف می‌باشند. این ترازها درست زیر نوار رسانش به اندازه انرژی  $E_{ex}$  قرار می‌گیرند (رابطه (120-2)). با ضرب صورت و مخرج کسر  $E_{ex}$  بر جرم الکترون آزاد  $m$  و به کار بردن عبارت انرژی ریدبرگ (عبارت  $13/6\text{eV} = 1R_H$ )،  $\left(\frac{m_e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = 13/6\text{eV} = 1R_H\right)$ ، اندازه‌ی جمله‌ی دوم از رابطه‌ی (119-2) به صورت رابطه‌ی (120-2) باز نویسی می‌شود.

$$E_{ex} = \frac{m}{m\epsilon_T^2} \frac{1}{n^2} (13/6\text{eV}) = \frac{R_x}{n^2} \quad (120-2)$$

$$R_x = \frac{m}{m e_F^2} (13/6 eV) \text{ ثابت اکسیتونی ریدبرگ نامیده می‌شود که برابر است با}$$

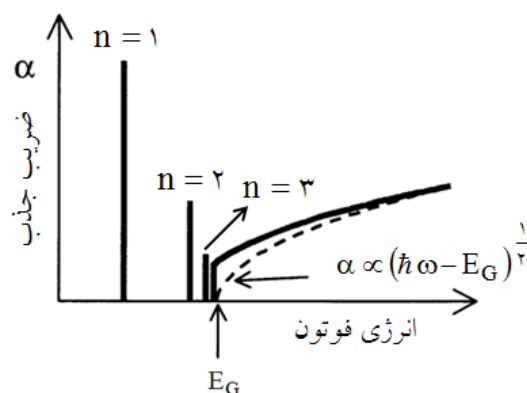
جمله سوم عبارت (2-119)، انرژی جنبشی مجموعه‌ی اکسیتونی آزاد با جرم مؤثر کل  $M^*$  و اندازه حرکت بلوری  $\hbar k$  می‌باشد. با توجه به شکل (2-38) (ب) می‌توان شعاع اکسیتونی را بر حسب شعاع اتمی هیدروژن  $a_H = 0/529 \text{ \AA}$  به صورت زیر بیان نمود.

$$a_{ex} = 0/529 \frac{e_F m}{m} n^2 \text{ انگسترم} \quad (2-121)$$

به‌ازای  $n=1$  کوچکترین شعاع اکسیتونی با بیشترین انرژی بستگی می‌باشد. با توجه به شکل (2-36) ب این شعاع اکسیتونی  $a_{ex}$  می‌تواند برای برخی از مواد تا چند 10 برابر شعاع اتمی هیدروژن باشد که گستردگی تابع موج اکسیتونی بر روی چندین سلول واحد را نشان می‌دهد (جدول 2-3).

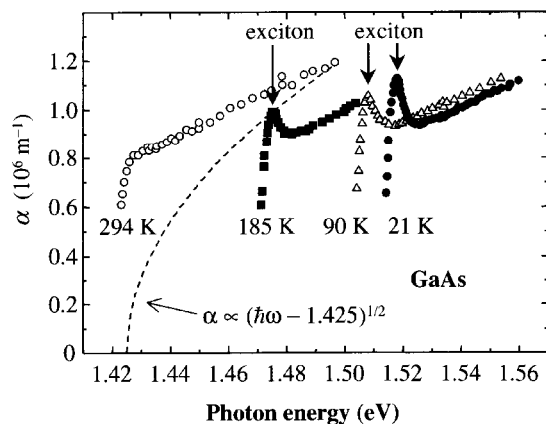
جدول 2-3: نمایش انرژی اکسیتون آزاد ریدبرگ  $R_x$ ، شعاع اکسیتونی  $a_x$  به‌ازای  $n=1$  و گاف انرژی  $E_G$ ، مربوط به نیم‌رساناهای ترکیبی از گروه‌های V - III و VI - II جدول تناوبی. در خصوص اعداد داخل نیم‌رسانای GaSb تاییدیه تجربی موجود نمی‌باشد.

بلور	$E_G$ (eV)	$R_x$ (meV)	$a_x$ (nm)
GaN	3/5	23	3/1
ZnSe	2/8	20	4/5
CdS	2/6	28	2/7
ZnTe	2/4	13	5/5
CdSe	1/8	15	5/4
CdTe	1/6	12	6/7
GaAs	1/5	4/2	13
InP	1/4	4/8	12
GaSb	0/8	2/0	23
InSb	0/2	(0/4)	(100)



شکل 2-40. طرحواره‌ای از ضریب جذب یک نیم‌رسانا با گاف انرژی  $E_G$  همراه با جذب اکسیونی می‌باشد.

کمترین جذب انرژی ناشی از ترازهای انرژی اکسیونی و جدایی الکترون-حفره به عنوان شبه ذرات آزاد الکترون-حفره به ترتیب در نوارهای رسانش و ظرفیت پدیدار می‌گردد که طیف جذبی آن قله‌هایی در لبه جذب مطابق شکل (2-41) مشاهده می‌شود.



شکل 2-41. جذب اکسیون GaAs بین 21 کلوین و 294 کلوین. خط چین نشان داده شده یک کوشش برای فیت کردن بر روی لبه جذب که با استفاده از رابطه‌ی جذب  $\alpha \propto \sqrt{(h\nu - E_G)}$  با یک مقدار  $E_G$  برابر الکترون ولت که از مشخصه GaAs در 294 کلوین می‌باشد. این نمودار از کتاب خواص نوری جامدات نویسنده مارک فوکس اقتباس شده است.

### • اکسیتون فرنکل

معادلات (2-120) و (2-121) نتیجه‌ای از اکسیتون آزاد می‌باشد. این مدل زمانی به شکست منتهی می‌شود که شعاع اکسیتون بسیار قابل ملاحظه با فاصله بین اتمی باشد و گسترده نباشند. این شرایط در موادی دیده می‌شوند که دارای گاف انرژی بسیار بالا، ثابت دی‌الکتریک کوچک و جرم مؤثر بزرگی باشند. در این نوع مواد، اکسیتون‌های جایگزیده (فرنکل) بیشتر از اکسیتون آزاد مشاهده می‌شود.

همانطور که در شکل (2-38) نشان داده شده است، اکسیتون فرنکل بر روی هر اتم که می‌تواند ناشی از یک برانگیختگی اتمی و یا مولکولی باشد، جایگزیده است. اکسیتون‌ها دارای شعاع کوچک و انرژی پیوندی بزرگ از مرتبه  $0/1$  تا چند الکترون‌ولت هستند که حتی در دمای اتاق نیز می‌توانند پایدار و قابل مشاهده باشند. این اکسیتون‌ها قادرند از مکانی به مکان دیگر پرش<sup>1</sup> کنند و در بلور به مانند انتشار اسپینی (مگنون‌ها) که در فصل 3 به آن خواهیم پرداخت انتشار یابند.

اکسیتون‌های فرنکل، در بلورهای یونی که متشکل از ترکیب عناصر گروه اول و هفتم از جدول تناوبی می‌باشند<sup>2</sup> دیده می‌شوند. در این دسته از بلورها توزیع حداکثری الکترونی‌شان بر روی اتم‌هایشان می‌باشند<sup>3</sup>. این بلورها گاف انرژی بزرگی دارند و در خانواده نارساناها قرار می‌گیرند مانند NaI با گاف انرژی از مرتبه  $5/9$  الکترون‌ولت و LiF با گاف انرژی از مرتبه  $13/7$  الکترون‌ولت. از این رو این مواد به دلیل گاف انرژی بزرگ‌شان از نظر خواص نوری از اهمیت خوبی برخوردار هستند و بسیار شفاف در برابر نور مرئی می‌باشند<sup>4</sup>. حضور اکسیتون‌های فرانکل در آن‌ها باعث رنگدانه‌های نوری را پدید می‌آورد. دسته دیگر از بلورها با گاف انرژی بزرگ، بلورهای گازهای نجیب

۱. Hopping

2. در بلورهای یونی مانند NaI سدیم با ازدست دادن الکترون بالاترین اربیتال تک الکترونی خود به یونی با اربیتال کاملاً پر تبدیل می‌کند و در عوض ید با دریافت یک الکترون بالاترین اربیتال تک الکترون خالی خود را کاملاً پر می‌کند و تابع توزیع الکترونی هر دو اتم به مانند گازهای نجیب خواهند شد. این توزیع الکترونی تقریباً به مانند توزیع الکترونی تک اتم مجزا می‌باشد که به روش تنگ‌بست به خوبی قابل توصیف می‌باشد.

3. به مانند روش تنگ‌بست که در فصل یک آورده شده است.

4. این مواد شفاف نور مرئی هستند.

گروه هشتم می‌باشند. این جامدات به دلیل ماهیت پیوندی ضعیف‌شان که از نوع نیروی واندروالسی است در دمای اتاق جامد نیستند.

**نکته 2-15:** مدلی که بتواند برای توصیف اکسیتون‌های فرنکل ارایه داد در مقایسه با اکسیتون‌های آزاد، ساده نمی‌باشد. شاید مناسب‌ترین رویکردی که بتوان ساختار الکترونی اکسیتون فرنکل را توصیف نماید رویکرد تنگ‌بست<sup>1</sup> باشد. زیرا این روش به حفظ حالت‌های اتمی و مولکولی (که اکسیتون‌ها نیز از آن‌ها مشتق می‌شوند)، تاکید می‌کند. جفت‌شدگی بین اکسیتون با شبکه بلوری مسئله را پیچیده‌تر خواهد کرد که به خود-تله افتادن منتهی می‌شود که باعث ایجاد یک به هم‌رختگی محلی در شبکه می‌شود که خود آن مسبب بیشتر جایگزیده شدن تابع موج اکسیتون می‌شود. همچنین وجود تهی‌جاها در بلور نیز از دیگر عاملین مراکز اکسیتونی فرنکل می‌باشد.

جدول 3-4. خواص اکسیتون‌های فرنکل در گازهای نجیب.

بلور	دمای ذوب ( $T_m(K^\circ)$ )	گاف انرژی $E_G (eV)$	انرژی اکسیتون به ازای $n=1$ $E_{ex} (eV)$	انرژی پیوندی اکسیتونی به ازای $n=1$ $E_b (eV)$
Ne	25	21/6	17/5	1/4
Ar	84	14/2	12/1	1/2
Kr	116	11/7	10/2	1/5
Xe	161	9/3	8/3	1/0

## پیوست 2-1

### محاسبه احتمال حضور الکترون در تراز بخشنده و حفره در تراز پذیرنده

به سادگی می‌توان توابع پرشدگی را برای هر حالت انرژی از ترازهای ناخالصی و نوار انرژی اتم‌های میزبان (رسانش و ظرفیت) را با توجه به حالت‌های پرشدگی در اولین ستون سمت چپ جدول (2-3) و عبارت آماری (رابطه (2-122))، به دست آورد.

۱. که در فصل 1 به آن اشاره شد.

که در عبارت (122-2)  $E_m$  انرژی سیستم به ازای پرشدگی شان با  $N_m$  الکترون که با توجه به جدول (3-2) می توان جایگذاری نمود.

$$\langle n_i \rangle = \frac{\sum_m N_m e^{-(E_m - Nm)/k_B T}}{\sum_m e^{-(E_m - Nm)/k_B T}} \quad (122-2)$$

عبارت (122-2) برای نوارهای رسانش به صورت زیر می باشد.

$$\langle n_i \rangle = \frac{e^{-(e-m)/k_B T} + e^{-(e-m)/k_B T} + 2e^{-(2e-2m)/k_B T}}{1 + e^{-(e-m)/k_B T} + e^{-(e-m)/k_B T} + e^{-(2e-2m)/k_B T}} =$$

$$\langle n_i \rangle = \frac{2e^{-(e-m)/k_B T} [1 + e^{-(e-m)/k_B T}]}{[1 + e^{-(e-m)/k_B T}] [1 + e^{-(e-m)/k_B T}]}$$

همچنین برای ترازهای بخشنده تابع توزیع پرشدگی به صورت زیر محاسبه

می شود.

$$\langle n_i \rangle = \frac{e^{-(E_D - m)/k_B T} + e^{-(E_D - m)/k_B T}}{1 + e^{-(E_D - m)/k_B T} + e^{-(E_D - m)/k_B T}} =$$

$$\langle n_i \rangle = f_D = \frac{1}{e^{-(E_D - m)/k_B T} + 1}$$

$$\langle n_i \rangle = f(e) = \frac{1}{e^{-(e-m)/k_B T} + 1} \quad (123-2)$$

برای به دست آوردن تابع توزیع پرشدگی حفره در ترازهای پذیرنده  $f_A$ ، ابتدا تابع توزیع پرشدگی الکترونی  $\langle n_i \rangle$  آن را محاسبه کرده و با استفاده از رابطه  $\langle p_i \rangle = 2 - \langle n_i \rangle$  می توان تابع توزیع پرشدگی حفره  $f_A = \langle p_i \rangle$  را محاسبه نمود.



$$\langle n_i \rangle = \frac{e^{-(E_A - m)/k_B T} + e^{-(E_A - m)/k_B T} + 2e^{-(2E_A - 2m)/k_B T}}{1 + e^{-(E_A - m)/k_B T} + e^{-(E_A - m)/k_B T} + e^{-(2E_A - 2m)/k_B T}} =$$

$$\langle n_i \rangle = 2 - \frac{1}{\frac{e^{-(E_A - m)/k_B T}}{e^{-(E_A - m)/k_B T} + 1}}$$

$$\langle p_i \rangle = f_A = \frac{1}{\frac{e^{-(E_A - m)/k_B T}}{e^{-(E_A - m)/k_B T} + 1}} \quad (124-2)$$

از حاصل ضرب تابع عدم پرشدگی الکترون در ترازهای بخشنده  $(1 - f_D)$  در تعداد کل اتم‌های بخشنده  $N_D^t$ ، تعداد الکترون‌های گذار  $N_D$  به نوار رسانش را نتیجه می‌دهد:

$$N_D = \frac{1}{\frac{e^{-(E_D - m)/k_B T}}{e^{-(E_D - m)/k_B T} + 1}} N_D^t \quad (125-2)$$

به طور مشابه،  $N_A$  تعداد الکترون‌های گذار از نوار ظرفیت به تراز پذیرنده را می‌توان محاسبه نمود که برابر با حاصل ضرب احتمال تمایل پرشدگی الکترونی تراز پذیرنده  $(1 - f_A)$  در تعداد کل اتم‌های پذیرنده  $N_A^t$  است.

$$N_A = (1 - f_A) N_A^t = \frac{N_A^t}{\frac{e^{-(E_A - m)/k_B T}}{e^{-(E_A - m)/k_B T} + 1}} \quad (126-2)$$

از اختلاف تعداد الکترون‌های گذار به تراز پذیرنده  $N_A$  با تعداد کل اتم‌های پذیرنده (تعداد کل ترازهای پذیرنده)  $N_A^t$ ، تعداد حفره‌ها در تراز پذیرنده را نتیجه می‌دهد (رابطه‌ی (127-2)).

$$N_A^t - N_A = \frac{N_A}{e^{(m^* E_A)/k_B T} + 1} \quad (127-2)$$

## پیوست 2-2

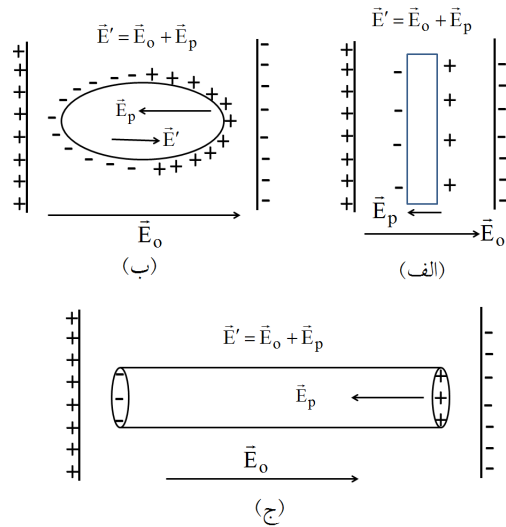
### میدان الکتریکی در داخل یک دی‌الکتریک (از منظر کلاسیکی)

اولین سوالی که می‌توان مطرح نمود این است که: وقتی یک دی‌الکتریک را در معرض یک میدان الکتریکی قرار می‌دهیم میدان محلی حاصله از این میدان خارجی، روی هر اتم از اتم‌های دی‌الکتریک چیست؟ برای پاسخ به آن، به یک خازن با یک تیغه دی‌الکتریک بین دو صفحه فلزی آن که به یک باطری با پتانسیل  $V$  وصل شده است در نظر می‌گیریم. بدون تیغه دی‌الکتریک میدان الکتریکی در هر نقطه بین دو صفحه فلزی خازن برابر است با  $E_0 = V/d$ . با قرار دادن تیغه دی‌الکتریک در بین صفحات خازن، به دلیل قطبیده شدن دی‌الکتریک، میدان الکتریکی در داخل دی‌الکتریک کاهش یافته و برابر با مجموع میدان خارجی  $E_0$  و میدان‌های ناشی از قطبش الکتریکی  $E_p$  است که در این جا آن را با  $E_{\phi}$  نمایش خواهیم داد. با فرض پیوسته بودن دی‌الکتریک (در نگاه کلاسیکی) به حل مسئله می‌پردازیم. میدان‌های ناشی از قطبش‌های سطحی در دی‌الکتریک‌ها (شکل (2-42)) بسیار به شکل هندسه‌ی سطح خارجی آن وابسته می‌باشد که به خوبی با رابطه‌ی (2-128) توصیف می‌شود.

$$\mathbf{E}_p = -\frac{\mathbf{P}}{\epsilon_0} \mathbf{G}_s \quad (128-2)$$

در رابطه‌ی (2-128)  $G_s$  برای یک تیغه‌ی مستطیلی طویل که بر جهت میدان خارجی عمود می‌باشد برابر با یک می‌باشد (شکل (2-42) الف). همچنین برای اشکال بیضوی که میدان در جهت محورهای اصلی آن‌ها باشد نیز برابر با 1 است (شکل (2-42) ب) ولی مقدار آن در لوله بسیار طویل که میدان خارجی در راستای محور اصلی آن قرار گرفته باشد بسیار کوچک خواهد بود و اگر میدان عمود بر محور اصلی لوله طویل باشد به

سمت یک نزدیک خواهد شد (شکل (2-42) ج). برای اشکال مختلف  $G_s$  می‌تواند مقادیر بین صفر و یک را به خود گیرند.



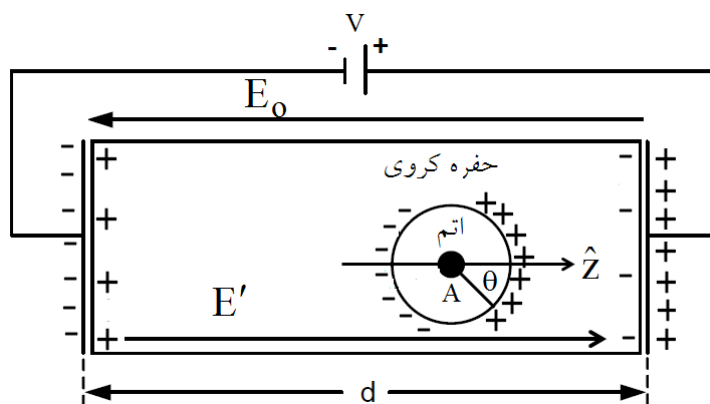
شکل 2-42. نمایش میدان الکتریکی در داخلی دی‌الکتریک  $\epsilon$  که برابر است با مجموع میدان قطبشی دی‌الکتریک  $E_p$  و میدان خارجی یکنواخت  $E_0$ . ملاحظه می‌شود میدان قطبش در اشکال مختلف متفاوت است.

هر ماده‌ای از اتم و مولکول‌هایی تشکیل شده‌اند که تقریب پیوسته بودن دی‌الکتریک که در بالا از آن صحبت شده است نمی‌تواند تقریب درستی باشد. از این رو میدان در داخل یک بلور فقط در نقاطی که یون، اتم یا مولکول وجود دارد مورد توجه می‌باشد زیرا بر قطبش الکتریکی آن‌ها اثر می‌گذارد. در ادامه با توجه به گسسته بودن بلور میدان محلی  $E_{local}$  بر روی اتم  $A$ ، علاوه بر میدان‌هایی که از تقریب پیوستار به دست می‌آید ( $E = E_0 + E_p$ ) میدان‌های دیگر که به نام میدان‌های لورنتس<sup>1</sup> ( $E_s, E_d$ )، نیز به آن اضافه می‌گردد.

$$E_{local} = E + E_s + E_d \quad (129-2)$$

<sup>1</sup>. Lorentz

برای محاسبه میدان‌های لورنتس، حفره‌ای تصوری به شعاع  $r \gg a$  اطراف اتم A در نظر می‌گیریم (شکل (2-43)) که در اینجا a اندازه متوسط اضلاع سلول واحد می‌باشد. با توجه به توزیع بار الکتریکی که بر روی سطح حفره ایجاد می‌شود (ناشی از قطبش الکتریکی  $\vec{p}$  داخل دی‌الکتریک)، میدان حاصله از این توزیع بار را  $\vec{E}_s$  و میدان ناشی از دو قطبی الکتریکی همسایگان اتم A که در داخل این حفره قرار می‌گیرند را  $\vec{E}_d$  می‌نامیم. به سادگی می‌توان نشان داد، در ساختارهای بلورهای متقارن (مانند بلورهای که دارای ساختارهای مکعبی هستند) میدان الکتریکی  $\vec{E}_d$  برابر با صفر می‌باشد.



شکل 3-43. میدان‌های الکتریکی که بر اتمی در داخلی یک بلور دی‌الکتریک اعمال می‌شود برابر است با میدان الکتریکی خارجی، میدان الکتریکی ناشی بر قطبش سطح خارجی دی‌الکتریک  $\vec{E}_p$  و میدان‌های لورنتس  $\vec{E}_s$ ،  $\vec{E}_\phi$  برابر است با مجموع میدان قطبشی دی‌الکتریک  $\vec{E}_p$  و میدان خارجی یکنواخت  $\vec{E}_0$  و  $\vec{E}_d$ .

**نکته 2-16:** فلسفه در نظر گرفتن حفره لورنتس این است که هر اتم در یک شبکه‌ی بلوری تا یک فاصله مشخصی محیط خود را ناپیوسته می‌بیند که توسط دو قطبی‌های الکتریکی همسایگان احاطه شده است، میدان حاصله از این دو قطبی‌ها همان  $\vec{E}_d$  می‌باشد و بعد از آن فاصله محیط را پیوسته با قطبش الکتریکی P که میدان حاصله از آن را  $\vec{E}_s$  می‌باشد.

• محاسبه میدان الکتریکی حفره‌ی لورنتس

با در نظر گرفتن یک قطبش الکتریکی ثابت در داخل دی الکتریک در جهت مثبت محور z مطابق شکل (2-43)، چگالی بار الکتریکی روی سطح حفره (اطراف اتم A) ناشی از قطبش دی الکتریک  $\mathbf{s} = \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{n}}$  بین زاویه q و  $q + dq$  برابر با  $s_q = p \cos(q)$  می‌باشد.

با توجه به توزیع متقارن بار در راستای x و y (تقارن استوانه‌ای حول محور z) و فاصله این توزیع بار نسبت به مرکز کره r، میدان الکتریکی در مرکز کره برابر خواهد شد:

$$E_s = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_0^p \frac{p \cos(q)}{r^2} r^2 2\pi \sin(q) dq = \frac{p}{3\epsilon_0} \quad (130-2)$$

در رابطه‌ی (2-130) فاصله r از اتم A به اندازه‌ای است هم‌پوشی ابر الکترونی یا میدان‌های دوقطبی یک توزیع همگنی را ایجاد می‌کند. از طرفی می‌توان این میدان را با ضریب نیمه تجربی g تصحیح نمود. بنابراین میدان محلی روی هر اتم را می‌توان به صورت رابطه‌ی (2-131) باز نویسی تصحیح نمود.

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{g} \frac{\mathbf{p}}{3\epsilon_0} \quad (131-2)$$

حالت g برابر صفر هیچ تمایزی بین میدان محلی و میدان متوسط  $\mathbf{E}_0$  نمی‌باشد (این برای یک سیستم گاز الکترونی یا برای سیستمی که توابع موج گسترده دارند درست می‌باشد). در حالت g برابر یک، برای یک بلور با تقارن بسیار بالا با دوقطبی‌هایی الکترونی که قویاً با تقارن بالا جایگزیده می‌باشند.

• رابطه‌ی کلاؤسیوس-موسوتی<sup>1</sup>

سیستمی متشکل از N اتم (یا مولکول) در واحد حجم را تصور کنید. برای سادگی ساده‌سازی مسئله برهم‌کنش الکتریکی بین قطبش اتم‌ها و مولکول‌ها را صرف‌نظر کنید.

<sup>1</sup>. Clausius-Mossotti

حال با استفاده از رابطه‌ی قطبش الکتریکی بر روی هر اتم  $\mathbf{p}$  با میدان محلی  $\mathbf{E}_{local}$  (رابطه‌ی (2-132))، عبارت ثابت دی‌الکتریک نسبی  $\epsilon_r$  از آن استخراج می‌شود.

$$\begin{aligned}\mathbf{r} \mathbf{p} &= Na \mathbf{E}_{local} \\ \mathbf{r} \mathbf{p} &= Na \left( \frac{a}{e} \mathbf{E} \phi + g \frac{\mathbf{p}}{3e_0} \frac{\partial}{\partial t} \right) \\ \mathbf{r} \mathbf{p} &= \frac{Na}{1 - g(1/3e_0)Na} \mathbf{E} \phi\end{aligned}\quad (132-2)$$

با توجه به رابطه‌ی (2-132) به ازای شرایطی که مخرج کسر برابر صفر شود  $1 - g(1/3e_0)Na = 0$ ، فاجعه‌ی قطبشی رو خواهد داد. برای یک دی‌الکتریک معمولی این اتفاق به ندرت پیش می‌آید.

**نکته 2-17:** از آن‌جا که ضریب قطبش‌پذیری  $a$  طبق رابطه‌ی (2-65)، وابسته به دما است از این رو می‌تواند به‌ازای دماهای مختلف مقادیر متفاوتی را به خود بگیرد و از طرفی در یک نمونه بلوری به‌ازای یک دمای خاصی (دمای بحرانی) می‌تواند شرط فاجعه‌ی قطبشی را ایجاد نماید از این رو در این دمای خاص، در حضور هر میدان الکتریکی خارجی، به یک‌باره این مجموعه به یک بلور فروالکتریک تبدیل می‌شود و یک گذار فاز از نوع مرتبه دوم به وقوع می‌پیوندد. نکته مهم در این است که با توجه به مخرج کسر رابطه‌ی (2-132)، این فاجعه قطبشی، فقط به‌ازای دی‌الکتریک‌هایی که قطبش‌های اتم‌های شان جایگزیده هستند و عبارت  $g^1 0$  در آن‌ها برقرار باشد، دیده می‌شود.

با توجه به رابطه‌ی ضریب دی‌الکتریک با قطبش و میدان الکتریکی به صورت:

$$\epsilon = \frac{D}{E_0} = \epsilon_r \epsilon_0 = \frac{e_0 E_0 + \mathbf{p}}{E_0} \quad (133-2)$$

$$\epsilon_r = 1 + \frac{\mathbf{p}}{e_0 E} \quad (134-2)$$

با استفاده از رابطه‌ی (2-132) می‌توان ضریب دی‌الکتریک نسبی را نتیجه گرفت.

$$\epsilon_r = 1 + \frac{(1/\epsilon_0)Na_e}{1 - g(1/3\epsilon_0)Na_e} \quad (135-2)$$

به ازای شرایط  $g=1$

$$\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} = (1/3\epsilon_0)Na_e \quad (136-2)$$

می‌توان رابطه‌ی (2-136) را برای موادی با چند نوع اتم متفاوت با چگالی  $N_i$  و ضریب قطبش  $a_i$  برای هر نوع از اتم‌ها، تعمیم داد.

$$\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} = (1/3\epsilon_0) \sum_j N_j a_{ej} \quad (137-2)$$

رابطه‌ی (2-137) به رابطه‌ی کلاؤسیوس-موسوتی معروف می‌باشد. با استفاده از رابطه بین ضریب دی‌الکتریک نسبی و ضریب شکست محیط به صورت  $n^2 = \epsilon_r$ ، رابطه‌ی (2-137) به صورت زیر باز نویسی می‌شود.

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = (1/3\epsilon_0) \sum_j N_j a_{ej} \quad (138-2)$$

رابطه‌های بالا با فرض این‌که قطبش الکترونی ناشی از ابرالکترونی اطراف هر اتم می‌باشد. با حضور میدان الکتریکی، یون‌ها به دلیل سنگین بودن‌شان نسبت به ابرالکترونی با تقریب خوبی می‌توان مکان‌شان را ثابت در نظر گرفت و جابه‌جایی الکترون‌ها می‌تواند مسئول اصلی قطبش الکتریکی  $a_e$  بر روی هر اتم دانست. در ادامه می‌توان سهم قطبش ایجاد شده در بلور به دلیل خارج شدن یون‌ها از مکان تعادلی‌شان را نیز در نظر گرفت که به قطبش‌پذیری یونی  $a_i$  معرفی می‌باشد.

## مسائل:

1-2. الف) تراکم حاملین و رسانش الکتریکی یک بلور ژرمانیوم را در دمای 300 کلوین محاسبه کنید.  $E_g = 0.68 \text{ eV}$  و  $m_e^* = m_h^* = 9/10 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$  و  $\eta = 0.38 \text{ m}^2/\text{Vsec}$

$$\eta_h = 0.18 \text{ m}^2/\text{Vsec}$$

ب) با افزودن ناخالصی از نوع بخشنده با چگالی  $10^{20} \text{ atoms/m}^2$  به بلور ژرمانیوم، تراکم الکترون و حفره و رسانش الکتریکی مجموعه را محاسبه کنید.

ج) برای مشاهده تشدید سیکلوترونی چه شرایطی مورد نیاز می باشد. (قطر برخورد اتم های بخشنده برابر با 300 آنگستروم است)

د) با چه مقدار از تراکم حاملین، رسانش نیم رسانا به حداقل خود می رسد.

2-2. یک نیم رسانا با گاف انرژی  $E_g = 1.0 \text{ eV}$  و جرم مؤثر الکترون  $m_e^* = 0.1 m$

و  $m_h^* = m$  با دو ناخالصی از نوع بخشنده و پذیرنده با انرژی یونیزاسیون یکسان برای هر نوع برابر  $0.1 \text{ eV}$  را در نظر بگیرید. اگر تحرک پذیری هال در دمای صفر باشد، نسبت تحرک پذیری الکترون به حفره در آن دما چیست.

3-2. ایندیم آنتیمونید دارای  $E_g = 0.23 \text{ eV}$ ؛ ثابت دی الکتریک  $\epsilon = 18$ ؛ جرم مؤثر

الکترون  $m_e = 0.015 \text{ eV}$  است. الف) انرژی یونش دهنده و (ب) شعاع یونش مدار حالت پایه را محاسبه کنید. (ج) مینیموم تراکم دهنده ها باید چقدر باشد تا رویهم افتادگی قابل ملاحظه بین مدارهای اتم های ناخالصی مجاور رخ دهد.

4-2. در یک نیم رسانای به خصوص  $10^3$  اتم بخشنده در سانتی متر مکعب با انرژی

یونش  $E_D$  برابر با  $1 \text{ meV}$  و جرم مؤثر  $0.01 m$  وجود دارند. الف) تراکم الکترون های رسانش را در  $4 \text{ K}$  برآورد کنید. ب) مقدار ضریب هال چقدر است؟ فرض کنید که هیچ اتم پذیرنده ای وجود ندارد و  $E_G \gg k_B T$  می باشد.

5-2. ضریب هال در آلومینیم  $10^{10} \text{ Vm}^2 \text{ A}^{-1} \text{ T}^{-1}$  است. چند الکترون به ازای هر اتم

در رسانش الکتریکی شرکت می کنند؟ (برای  $Al$ ، وزن اتمی برابر 27 با چگالی  $2700 \text{ kgm}^{-3}$  است).

6-2. با این که در نیم رسانای ذاتی ساده انرژی فرمی،  $E_F$ ، تقریباً مستقل از دما است،

جمله تصحیح کوچکی وجود دارد. نشان دهید که  $E_F = 1/2(E_c + E_v) + aT$ ؛ که  $E_c$  و  $E_v$  به ترتیب انرژی حالت ها در ته نوار رسانش و قله ی نوار ظرفیت



هستند و  $a$  یک ثابت است. در این نوارها چگالی حالت‌ها را می‌توان به شکل  $A(E - E_c)^{1/2}$  و  $B(E_v - E)^{1/2}$  در نظر گرفت.

7-2. یک نمونه‌ی سیلیسیم دارای  $10^{-2}$  درصد اتمی بخشنده فسفری است که تمام آن‌ها در دمای اتاق یکبارہ یونیده هستند. تحرک الکترونی  $0/15 \text{ m}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  است. مقاومت ویژه ذاتی نمونه را حساب کنید. (برای Si، وزن اتمی برای است با 28 و چگالی آن برای  $2300 \text{ kgm}^{-3}$ ).

8-2. جرم مؤثر الکترون در ایندیم-آنتیمونید تقریباً  $0/01$  جرم الکترون است. ثابت دی‌الکتریک 17 است. انرژی یونش اتم‌های بخشنده و شعاع مداری الکترون آن را محاسبه کنید.

9-2. رابطه‌ی  $E \mu k$  در ته نوار رسانش یک نیم‌رسانا به صورت  $E \mu Ak^2$  است. که در آن  $A = 5 \cdot 10^{37} \text{ Jm}^2$ . جرم مؤثر الکترون‌های رسانش را محاسبه کنید.

10-2 فرض کنید اتم از کره یکنواختی با بار منفی به شعاع  $R$  که بار نقطه‌ای مثبتی را در میان گرفته است، تشکیل شده است؛ نشان دهید که قطبش‌پذیری عبارات است از  $4\pi\epsilon_0 R^3$  (می‌توان فرض کرد که بار منفی در میدان اعمال شده یکنواخت باقی می‌ماند) قطر اتم آرگون  $0/3 \text{ nm}$  است، ضریب شکست گاز آرگون را در فشار متعارف به دست آورید.

11-2 ثابت دی‌الکتریک جامدی 5 است آن‌را بین صفحات خازنی قرار می‌دهیم که تا  $100 \text{ V}$  باردار شده‌اند و از هم  $1 \text{ nm}$  فاصله دارند. میدانی موضعی را که بر اتم در دی‌الکتریک وارد می‌آید محاسبه کنید.

### سؤالات تستی:

1-2. کدام یک از عبارت زیر در خصوص تولید زوج الکترون-حفره در نیم‌رساناها درست نمی‌باشد.

الف) جرم حفره مثبت با بار مثبت در نقاط اکسترمم.

ب) جرم الکترون مثبت با بار منفی در نقاط اکسترمم.

ج) انرژی حفره مثبت است.

د) انرژی الکترون منفی است.

2-2. چگالی حالت نوار رسانش  $D_V(E)$  و ظرفیت  $D_C(E)$  در نقاط اکسترمم یک نیم‌رسانا برابر است با:

$$\begin{aligned} \text{الف)} \quad D_V(E) &\gg (E_V - E)^{1/2} & \text{ب)} \quad D_V(E) &\gg (E_G - E)^{1/2} \\ \text{د)} \quad D_C(E) &\gg (E - E_C)^{1/2} & \text{ج)} \quad D_C(E) &\gg (E - E_G) \\ \text{ب)} \quad D_C(E) &\gg (E - E_G) & \text{د)} \quad D_C(E) &\gg (E - E_C) \end{aligned}$$

3-2. حضور میدان الکتریکی یکنواخت بر روی یک نیم‌رسانا؛

الف) الکترون و حفره جریان هم‌سویی ایجاد می‌کنند.

ب) حفره و الکترون هم‌سوی میدان حرکت می‌کنند.

ج) حفره در جهت میدان و الکترون در خلاف میدان، جریان الکتریکی ایجاد می‌کنند.

د) جریان حاصل فقط توسط الکترون‌ها رسانش ایجاد می‌شوند.

4-2. پتانسیل شیمیایی یک نیم‌رسانای ذاتی برابر است با:

$$\begin{aligned} \text{الف)} \quad m &= E_G + \frac{1}{2} k_B T \ln\left(\frac{m_e^*}{m_h^*}\right) & \text{ب)} \quad m &= E_G + \frac{1}{2} k_B T \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right) \\ \text{ج)} \quad m &= \frac{1}{2} E_G + \frac{1}{2} k_B T \ln\left(\frac{m_e^*}{m_h^*}\right) & \text{د)} \quad m &= \frac{1}{2} E_G + \frac{1}{2} k_B T \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right) \end{aligned}$$

5-2. کدام یک از عبارات زیر در خصوص چگالی الکترون در یک نیم‌رسانا دردماهای بالا و پایین دست می‌باشد.

الف) در دما بالا چگالی الکترون به صورت  $n \gg e^{\frac{E_G - E_d}{2k_b T}}$

ب) دردماهای پایین چگالی الکترون به صورت  $n \gg e^{\frac{E_G - E_d}{2k_b T}}$

ج) دردماهای پایین چگالی الکترون به صورت  $n \gg e^{\frac{E_G - E_d}{2k_b T}}$

د) در دما بالا چگالی الکترون به صورت  $n \gg e^{\frac{E_G - E_d}{2k_b T}}$

6-2. ضریب هال یک نیم‌رسانا برابر است با:

$$R_H = (pm_h - nm_e) / e (nm_e + pm_h) \quad \text{الف}$$

$$R_H = (pm_h - nm_e) / e (nm_e + pm_h)^2 \quad \text{ب}$$

$$R_H = (pm_h^2 - nm_e^2) / e (nm_e + pm_h) \quad \text{ج}$$

$$R_H = (pm_h^2 - nm_e^2) / e (nm_e + pm_h) \quad \text{د}$$

7-2. کدام یک از موارد زیر جزء رفتارهای دی الکتریک ها می باشند.

الف) قطبش الکترونی اطراف اتم.

ب) حرکت یون های باردار شبکه در حضور میدان الکتریکی خارجی.

ج) چرخش مولکول های قطبیده مواد.

د) هرسه.

8-2. کدام یک از عبارتهای زیر می تواند ضریب قطبش یک دی الکتریک  $a_0$  را

به درستی بیان می کند.

الف) با دما رابطه ی خطی دارد.

ب) با عکس دما رابطه ی مستقیم دارد.

ج) با عکس مجذور دما رابطه ی مستقیم دارد.

د) با مجذور دما رابطه ی مستقیم دارد.

9-2. کدام مواد زیر می تواند به نور مرئی باشد.

الف) موادی با گاف انرژی کمتر از  $3/26$  الکترون ولت.

ب) موادی با گاف انرژی بیشتر از  $3/26$  الکترون ولت.

ج) موادی با گاف انرژی در محدوده ی  $1/65$  و  $3/26$  الکترون ولت.

د) موادی با گاف انرژی خارج از محدوده ی  $1/65$  و  $3/26$  الکترون ولت.

10-2. کدام یک از عبارتهای زیر صحیح می باشد.

الف) نور میدان الکترومغناطیس می باشد.

ب) امواج الکترومغناطیس تشکیل شده است دو میدان الکتریکی و مغناطیسی که

برهم عمود می باشند.

ج) امواج الکترومغناطیس بر بردار انتشارشان عمود می باشد.



# فصل سوم

## خواص مغناطیسی جامدات

### هدف کلی

این فصل با معرفی منشاء خواص مغناطیسی مواد آغاز می‌شود و الکترون را به عنوان اصلی‌ترین منشاء خواص مغناطیسی مواد معرفی می‌کند. رفتار حرکتی و اسپینی الکترون در حضور میدان مغناطیسی می‌تواند در خواص مغناطیسی مواد نقش آفرینی کند. نکته مهمی که در انتهای این فصل به آن پرداخته می‌شود که در جامدات خواص مغناطیسی مواد نشأت گرفته از ساختار الکترونی جامدات است که توسط هامیلتونی هایزنبرگ مشخص می‌گردد. با به‌کارگیری از این هامیلتونی می‌توان به دسته‌بندی مواد از نظر مغناطیسی (فرومغناطیس، فری‌مغناطیس و پادفرومغناطیسی) و توصیف پدیده موج اسپینی به عنوان حالت‌های برانگیخته مجموعه، پرداخت.

### هدف‌های یادگیری

دانشجو پس از مطالعه این فصل باید،

1. با رفتار پارامغناطیسی گاز الکترونی ناشی از اسپین الکترون در حضور میدان مغناطیسی (پارامغناطیسی پائولی) و دیامغناطیس گاز الکترونی ناشی از حرکتشان در حضور میدان مغناطیسی آشنا شود (دیامغناطیس لاندائو).
2. با ترازهای لاندائو و وابستگی تبهگنی آنها به شدت میدان مغناطیسی آشنا شود.
3. نگاه نیمه‌کلاسیکی و کوانتومی قطبش مغناطیسی سیستم و محاسبه مغناطش مجموعه به روش میدان‌های متوسط آشنا شوند.
4. با مدل کوری و مدل کوری-وایس با گذار فاز مغناطیسی و دمای بحرانی در این گذار آشنا شود.

6. با قانون هوند آشنا شود.

1. با نظریه هایزنبرگ و منشاء انرژی تبادل و انواع برهم کنش تبدالی مواد (فرومغناطیسی و پادفرومغناطیسی) آشنا شود.

5. با پارامتر نظم در مواد فرومغناطیس و پادفرومغناطیس و نیز گذار فار مرتبه دوم و انواع دمای بحرانی، دمای کوری و نل آشنا شود.

7. با موج اسپینی ایجاد شده در هر دو ماده فرومغناطیسی و پادفرومغناطیسی آشنا شود.

### مقدمه

یکی دیگر از شاخص های مهم در طبقه بندی مواد خواص مغناطیسی آنها است. خواص مغناطیسی مواد یک پدیده کاملاً کوانتومی است که با دانش فیزیک کوانتومی به خوبی قابل توصیف می باشد. به مانند فصل های گذشته برای مشاهده این خاصیت از ماده و بررسی ساختار مغناطیسی آن، ماده را در معرض یک میدان مغناطیسی خارجی یا پرتوی نوترونی قرار داده می شود. شناخت این ساختار مغناطیسی (به مانند ساختارهای الکتریکی و مکانیکی مواد)، کمک به توصیف پدیده های برانگیختگی مغناطیسی که صورت دیگری از برانگیختگی انرژی در مواد است، می کند. این پدیده برانگیختگی حاصل از نظم مغناطیسی در مواد و ایجاد شبه ذرات کوانتومی به نام مگنون می باشد. در این فصل تلاش می شود تا حدودی به معرفی منشاء مغناطیسی، ساختار مغناطیسی و پدیده های برانگیختگی انرژی در مواد پرداخته شود. همچنین به پدیده های مغناطیسی بلند برد (فرومغناطیس، پارامغناطیس و دیامغناطیس) خواهیم پرداخت و نشان خواهیم داد که چگونه مکانیک کوانتومی با معرفی برخی چشمه های مغناطیسی که از عوامل این نظم مغناطیسی هستند، قادر به توصیف خواص مغناطیسی مواد می باشد. این موضوع ما را به سوی مباحث جالبی همچون: مدل هایزنبرگ، نظریه میدان متوسط<sup>1</sup>، امواج اسپینی<sup>2</sup> و مگنون ها (کوانتوم امواج اسپینی) هدایت می کند. رفتار این دسته از مواد که در نزدیکی دمای بحرانی، به طور باور نکردنی، یک نظم مغناطیسی پیدا می کنند<sup>3</sup> و نیز

1. Mean field theory

2. Spin waves

3. که پدیده شکست تقارن به وقوع می پیوندد.

شناخت حوزه‌های مغناطیسی<sup>1</sup> و اثرات آن در مغناطش مواد از موضوعات پر اهمیت در فیزیک مواد مغناطیسی خواهد بود. مطالعه تشدید مغناطیسی مواد، یکی دیگر از مهم‌ترین روش‌ها برای شناخت خواص مغناطیسی مواد است. این روش به تغییرات سطوح انرژی در جامدات مغناطیسی حساس می‌باشد. از موضوعات جالب دیگر در این حوزه که خارج از حوصله این سطح از کتاب می‌باشند عبارت هستند از: اثرات کاندو، شیشه‌های اسپینی، مگنتوالکترونیک<sup>2</sup> و سالیتون.

با شناخت خواص مغناطیسی یک تک اتم منزوی و به‌کارگیری آن در شبکه‌ی بلوری جامدات، می‌توان به توصیف خواص مغناطیسی جامدات پرداخت. رابطه‌ی مستقیم ما بین هر دو ساختار الکترونی و مغناطیسی با رفتار شیمیایی مواد، می‌تواند وسیله‌ای برای شناخت یکدیگر باشند. مواد مغناطیسی پاسخ‌های متفاوتی در حضور میدان مغناطیسی خارجی از خود نشان می‌دهند که از درس الکترومغناطیس به یاد داریم مغناطش مواد  $\mathbf{M}$  با ضربی  $\mathbf{C}$  با شدت میدان مغناطیسی  $\mathbf{H}$  به‌ازای میدان‌های ضعیف رابطه‌ی خطی دارد ( $\mathbf{M} = \mathbf{C}\mathbf{H}$ ). در این جا  $\mathbf{C}$  را پاسخ خطی سیستم به میدان اعمالی است که آن را پذیرفتار مغناطیسی<sup>3</sup> می‌نامند.  $\mathbf{C}$  مثبت به معنی هم‌سویی مغناطش مواد با میدان مغناطیس اعمالی است (پارامغناطیس) و در صورت منفی بودن  $\mathbf{C}$ ، مغناطش مواد در خلاف جهت میدان مغناطیس اعمالی قرار می‌گیرد (دیامغناطیس). از این رو این رفتار مغناطیسی مواد در حضور میدان مغناطیسی خارجی، از مهم‌ترین ویژگی‌هایی است که براساس آن می‌توان مواد را دسته‌بندی کرد. حتی برخی از آن‌ها بدون حضور میدان مغناطیسی نیز رفتار مغناطیسی دارند (فرومغناطیس و فری‌مغناطیس). اکنون این سوال مطرح است که منشأ خواص مغناطیسی مواد چیست؟

با توجه به اجزای تشکیل دهنده مواد (الکترون، پروتون و نوترون)، هر کدام می‌توانند سهمی در مغناطش مواد  $\mathbf{M}$  داشته باشند. هسته (پروتون و نوترون) سهم کمتری در مغناطش مواد نسبت به الکترون دارند، از این رو در ادامه فقط به خواص

1. Magnetic domains

2. Magnetoelectronics

3. Susceptibility

اسپینی و اربیتال<sup>1</sup> الکترون که از مهمترین منشأ اصلی خواص مغناطیسی در مواد هستند، خواهیم پرداخت.

همانطور که در فصل‌های قبل به آن اشاره شد، در جامدات با دو دسته الکترون (تقریباً آزاد و مقید به هسته) سروکار داریم که هر کدام در حضور میدان مغناطیسی  $\vec{B}$  می‌توانند رفتار متفاوتی از خود نشان دهند. ولی نکته قابل ذکر در این است که هر دو اثر (پارامغناطیسی و دیامغناطیسی) برای هر دو دسته الکترون با شدت‌های متفاوت دیده می‌شوند.

**$\vec{u}$  الکترون‌های مغزی** (مقید به هسته) به واسطه‌ی اسپین‌شان  $S$  (چرخش به دور خود (نگرش کلاسیکی))، با اندازه حرکت مداری  $L$  (چرخش زاویه‌ای به دور هسته)، می‌توانند عامل مغناطش  $\vec{M}$  در مواد باشند که با حضور میدان  $\vec{B}$  هر دو کمیت فیزیکی  $S$  و  $L$  رفتار پارامغناطیسی (هم‌سو شدن با میدان  $\vec{B}$ ) را به محیط القاء می‌نمایند.

**$\vec{u}$  الکترون‌های تقریباً آزاد** (الکترون‌های رسانش) در حضور میدان مغناطیسی نیز قادرند هر دو رفتار مغناطیسی (پارامغناطیسی و دیامغناطیسی) از خود نشان دهند. اسپین این دسته الکترون، رفتار پارامغناطیسی (پارامغناطیسی اسپینی پائولی) و حرکت انتقالی آن‌ها در حضور میدان  $\vec{B}$  طوری خواهد بود که طبق قانون لنز رفتار دیامغناطیسی (دیامغناطیس لاندائو) به خود می‌گیرد، که در این فصل به توصیف چگونگی این دو رفتار برای هر دو دسته از الکترون (مغزی و غیرمغزی) خواهیم پرداخت.

### 3-1 خواص مغناطیسی گاز الکترونی بدون برهم‌کنش در حضور میدان $B$

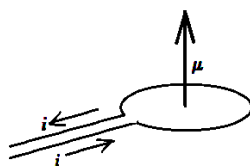
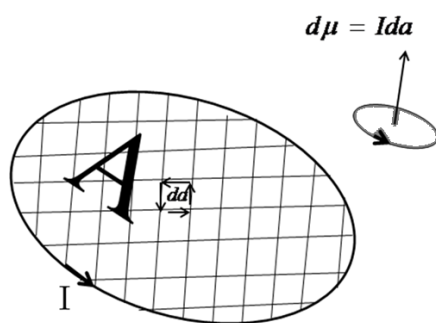
#### • گشتاور مغناطیسی

از فیزیک کلاسیک به یاد داریم یک حلقه سیم رسانا حامل جریان الکتریسته، می‌تواند گشتاور دوقطبی مغناطیسی  $\vec{m}$  را تولید نماید که مقدارش با حاصل ضرب مساحت حلقه  $A$  در جریان عبوری  $I$  از آن برابر است (شکل (3-1)). در الکترومغناطیس نشان داده می‌شود هر حلقه جریان را می‌توان به بی‌نهایت حلقه کوچک در داخل آن تبدیل نمود و یا برعکس جمع جریان حلقه‌های کوچک برابر با جریان حلقه محیطی آن‌ها

1. از منظره کلاسیکی اسپین الکترون چرخش به دور خود و اربیتال حرکت الکترون به دور هسته.



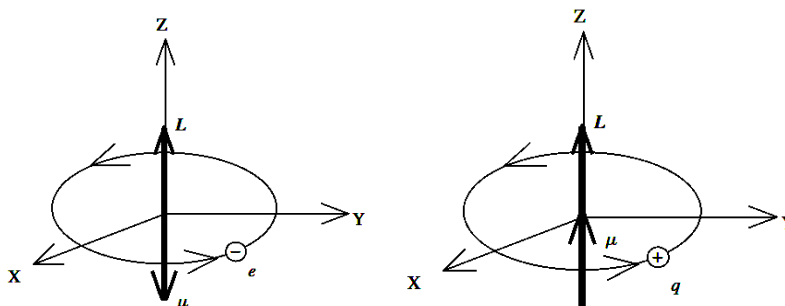
می‌باشد (شکل (1-3)). با توجه به شکل (1-3) به هر حلقه کوچک جریان  $I$  و گشتاور دو قطبی مغناطیسی  $d\vec{m}$  نسبت داده می‌شود.



شکل 1-3. سیم حامل جریان که گشتاور مغناطیسی تولید می‌کند.

از جمع روی کل گشتاور دو قطبی مغناطیسی موضعی  $d\vec{m}$  (گشتاور دو قطبی حلقه‌های کوچک)، گشتاور مغناطیسی کل سیستم به دست می‌آید.

$$\vec{m} = \oint d\vec{m} = I \oint d\vec{a} \quad (1-3)$$



شکل 2-3. هم‌سوئی و عدم هم‌سوئی گشتاور مغناطیسی با اندازه حرکت مداری برای دو بار مثبت و منفی.

چرخش الکترون‌ها به دور هسته اتم را می‌توان مانند حلقه‌های جریان بسیار کوچک تصور نمود. یک بار الکتریکی  $q$  مسیر دایره‌ای با شعاع  $r$  با سرعت  $v$  را طی می‌کند را در نظر بگیرید. جریان حاصل و اندازه حرکت مداری آن به ترتیب برابر با  $i = q/t = qv/2\pi r$  و  $L = mvr$  می‌باشند. با توجه به گشتاور دوقطبی مغناطیسی  $\mathbf{\mu}$  مربوط به هر اربیتال اتمی  $\mu_L = qvr/2$  <sup>1</sup> و با استفاده از عبارت اندازه حرکت مداری  $L = mvr$ ، می‌توان رابطه‌ی (2-3) که مابین گشتاور دوقطبی مغناطیسی الکترون با اندازه حرکت مداری است را نتیجه گرفت.

$$\mathbf{\mu}_L = g\mathbf{L} \quad (2-3)$$

که در رابطه‌ی (2-3)  $g$  را ضریب ژیرومغناطیسی می‌نامند که برابر است با  $g = q/2m$ . گشتاور مغناطیسی  $\mathbf{\mu}_L$  هر اتم منزوی را با در دست داشتن اندازه حرکت مداری  $L = \sqrt{I(I+1)} \hbar$  و ضریب ژیرومغناطیسی، طبق رابطه‌ی (2-3) می‌توان به دست آورد. برای مثال الکترون اتم هیدروژن که به دور هسته (پروتون) می‌چرخد را در نظر بگیرید. با توجه به جهت حرکت و علامت بار آن  $q = -e$  مقدار گشتاور مغناطیسی آن برابر است با

$$|\mathbf{\mu}_L| = \left| -\frac{\sqrt{I(I+1)} e\hbar}{2m} \right| = \sqrt{I(I+1)} \mu_B \quad (3-3)$$

در رابطه‌ی (3-3)  $\mu_B$  گشتاور مغناطیسی بور می‌باشد. مقدار گشتاور مغناطیسی زاویه‌ای  $\mathbf{\mu}_L$  هر ماده برحسب گشتاور مغناطیسی بور  $\mu_B$  <sup>2</sup> مشخص می‌شود. به دلیل منفی بودن بار الکترون، جهت گشتاور دوقطبی مغناطیسی الکترون  $\mathbf{\mu}_L$  خلاف جهت اندازه حرکت مداری الکترون  $\mathbf{L}$  خواهد بود <sup>3</sup>.

1. که برابر است با حاصل ضرب مساحت حلقه  $\pi r^2$  در جریان حلقه  $i = qv/2\pi r$ .  
 2. گشتاور مغناطیسی بور (مگنتون بور) به صورت  $\mu_B = e\hbar/2m$  تعریف شده که مقدارش برابر است با  $9.274 \times 10^{-24}$  آمپر مترمربع.  
 3. با توجه به جرم پروتون و نوترون که تقریباً 2000 برابر جرم الکترون است، عبارت مگنتون بور  $\mu_B = e\hbar/2m$  برای پروتون و نوترون تقریباً 2000 برابر کوچک‌تر از مگنتون بور برای الکترون می‌باشد.

**نکته 3-1:** با اعمال میدان مغناطیسی  $\dot{\mathbf{B}}$  بر روی مواد، الکترون‌های اتمی مواد انرژی پتانسیلی  $U = -\dot{\mathbf{m}} \times \dot{\mathbf{B}}$  را کسب می‌کنند<sup>1</sup> که در آن  $\dot{\mathbf{m}}$  گشتاور مغناطیسی کل هر اتم است و برابر خواهد بود با مجموع گشتاور دو قطبی مغناطیسی اسپینی و زاویه‌ای ( $\dot{\mathbf{m}}_L$  و  $\dot{\mathbf{m}}_S$ ) که هر دو آن‌ها تمایل به هم‌سو شدن با میدان مغناطیسی خارجی  $\dot{\mathbf{B}}$  را دارند (رفتار پارامغناطیسی).

جمع روی کلیه گشتاورهای دو قطبی مغناطیسی اتمی ( $\dot{\mathbf{m}} = \dot{\mathbf{m}}_L + \dot{\mathbf{m}}_S$ ) هر جامد، می‌تواند گشتاور مغناطیسی کل جامد  $\dot{\mathbf{m}}$  را نتیجه دهد که تعداد آن‌ها بر واحد حجم جامد برابر با مغناطش جامد خواهد بود.

### 3-1-1 مغناطش الکترون‌های سرگردان<sup>2</sup> در فلزات

الکترون‌های رسانش در جامدات فلزی تقریباً مانند الکترون‌های شبه آزاد رفتار می‌کنند. سهم اسپینی این دسته الکترون‌های شبه آزاد در حضور میدان مغناطیسی  $\dot{\mathbf{B}}$ ، مغناطش اسپینی سیستم  $\dot{\mathbf{M}}_{spin}$  را نتیجه می‌دهد. در حالت پایه (دمای صفر) با هم‌سو شدن اسپین الکترون‌ها با میدان  $\dot{\mathbf{B}}$  (خاصیت پارامغناطیس اسپینی)، انرژی کل سیستم به پایین‌ترین حالت ممکن و مغناطش اسپینی  $\dot{\mathbf{M}}_{spin}$  به بالاترین مقدار خود خواهد رساند<sup>3</sup>. دما (عامل بی‌نظمی) سبب عدم هم‌سوئی اسپینی الکترون‌ها با میدان  $\dot{\mathbf{B}}$  است که تابع توزیع بولتزمن  $\exp(-m_S > B/k_B T)$  احتمال هم‌سوئی و  $(1 - \exp(-m_S > B/k_B T))$  احتمال عدم هم‌سوئی اسپینی الکترون‌ها با میدان  $\dot{\mathbf{B}}$  در دمای  $T$  را نشان می‌دهند.

#### • سهم اسپینی الکترون‌های سرگردان (پارامغناطیسی پائولی)

مدل الکترون آزاد هنوز به عنوان یک تقریب اولیه خوب در توصیف کیفی خواص الکتریکی و مغناطیسی فلزات به کار برده می‌شود. همان‌طور که در بالا به آن اشاره شد، الکترون‌های سرگردان در حضور میدان  $\dot{\mathbf{B}}$  به واسطه اسپین‌شان، رفتار پارامغناطیسی و حرکت چرخش محوری‌شان (اندازه حرکت مداری که ناشی از حضور میدان به خود

1. که به پتانسیل زمین معروف است.

2. Itinerant

3. در این‌جا برهم‌کنش اسپینی بین الکترون‌ها نادیده گرفته شده است.

می‌گیرند) طبق قانون لنز رفتاری دیامغناطیسی را به سیستم تحمیل می‌کنند (دیامغناطیسی لاندائو).

مسئله را با الکترون که یک ذره کوانتومی است آغاز می‌کنیم. از این رو اسپین الکترون به عنوان یک عدد کوانتومی در مسئله ظاهر می‌گردد که قطبش مغناطیسی آن به صورت زیر داده می‌شود.

$$\mathbf{m}_B = g \frac{e}{2m} \mathbf{r} \cdot \mathbf{S} = g m_B \frac{\mathbf{S}}{\hbar} \quad m_B = \frac{e\hbar}{2m} \quad (4-3)$$

که در این جا  $m_B$  را مگنتون بور الکترون و  $g$  ضریب شکافتگی طیف‌نمایی یا عبارت لاند<sup>1</sup> (پیوست (3-3)) می‌باشند که برای اسپین الکترون این ضریب تقریباً برابر با 2 است.

سهم انرژی پتانسیل در هامیلتونی برای یک دسته الکترون آزاد (الکترون‌های سرگردان)، در حضور میدان  $\mathbf{B}$  به صورت زیر است.

$$U = - \mathbf{m}_B \cdot \mathbf{B} \quad (5-3)$$

همان‌طور که در فصل اول به آن اشاره شد، مسئله‌ی الکترون در جعبه با ابعاد  $L$  از نظر ساختار الکترونی، منجر به یک سری ترازهای انرژی مجزا خواهد شد. در دمای صفر کلونین، هر تراز تا سطح انرژی فرمی کاملاً با دو الکترون با اسپین‌های مخالف پر می‌شود (طبق اصل طرد پائولی). انرژی فرمی حالت‌های پر را از حالت‌های خالی جدا می‌کند. در دمای  $T$ ، احتمال پرشدگی در هر تراز تنها حول حوش سطح فرمی (با تابع فرمی-دیراک) تغییر می‌کند (شکل (3-3)).

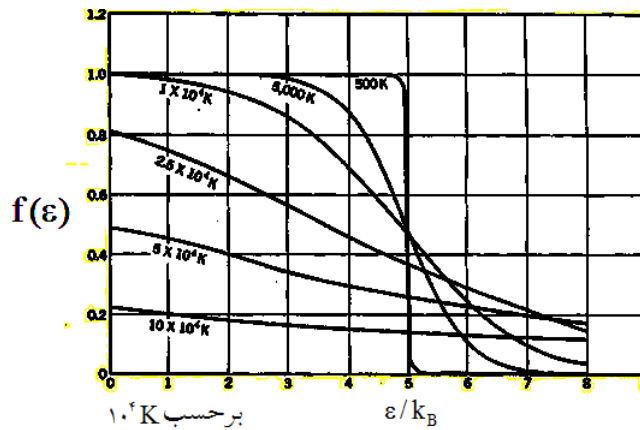
$$\langle n \rangle = f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}} + 1} \quad (6-3)$$

---

1. Landé

با توجه به تعریف چگالی حالت انرژی  $D(\epsilon)$ ، نشان داده می‌شود که چگالی حالت انرژی برای یک گاز الکترونی بدون برهم‌کنش<sup>1</sup> متناسب با جذر انرژی افزایش می‌یابد. از این رو مقدار چگالی حالت انرژی  $D(\epsilon)$  در سطح انرژی فرمی برابر است با:

$$D(\epsilon_F) = \frac{mp_F}{p^2 h^3} = \frac{m}{p^2 h^3} \sqrt{2m\epsilon_F} \quad (7-3)$$



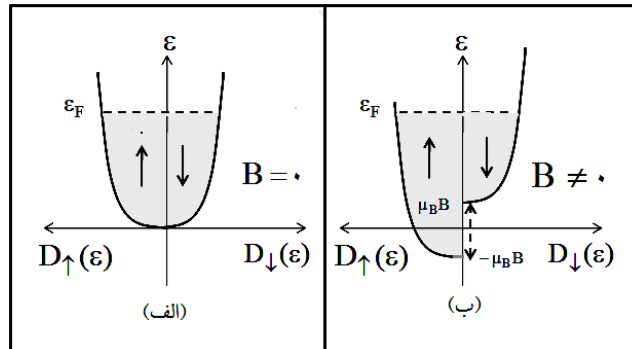
شکل 3-3. احتمال پرشدگی هر تراز انرژی با تابع فرمی-دیراک داده می‌شود.

همانطور که در فصل یک اشاره شد گاز الکترون آزاد دارای یک نوار انرژی

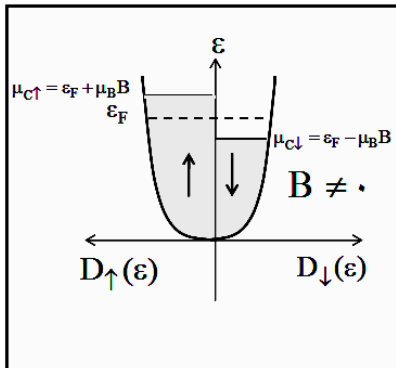
سه‌می‌گون است  $E(k) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$  از این رو چگالی حالت کل طبق عبارت (9-2) داده می‌شود. در عبارت (9-2) یک ضریب 2 ضرب شده است که به دلیل یکسان بودن نوار انرژی برای هر دو نوع الکترون با اسپین‌های بالا و پایین می‌باشد. ولی در ادامه قصد داریم چگالی حالت الکترون را برای هر دو دسته الکترون از نظر اسپینی (بالا و پایین) تفکیک نماییم  $D_-(\epsilon)$  و  $D_+(\epsilon)$ . بدون اعمال میدان  $\vec{B}$  این دو تابع کاملاً برابر هستند و نمودار چگالی حالت برای هر دو اسپین (بالا و پایین) در دمای صفر کلین، تا انرژی فرمی پر می‌باشد (شکل (4-3) الف). ولی با اعمال میدان مغناطیسی، برهم‌کنش گشتاور مغناطیسی اسپینی الکترون‌ها با میدان  $\vec{B}$   $(U = -\vec{m}_s \cdot \vec{B})$ ، باعث می‌شوند تا چگالی

1.  $\epsilon(k) = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$

حالت آن‌ها با یکدیگر متفاوت شوند (شکل ب(4-3)). این تفاوت به صورت یک جابه‌جایی انرژی به اندازه  $m_B B$  - برای اسپین - و  $+m_B B$  برای اسپین  $-$  در چگالی حالت‌ها ایجاد می‌شود (شکل ب(4-3))<sup>1</sup>.



شکل 3-4. چگالی حالت انرژی برای هر دو حالت اسپینی: الف) بدون حضور میدان  $B=0$  ب) با حضور میدان  $B \neq 0$  پتانسیل شیمیایی هر دو نمودار (سطح انرژی فرمی) یکسان باقی می‌ماند و فقط نمودار چگالی حالت‌ها جابه‌جا می‌شوند.



شکل 3-5. چگالی حالت‌های انرژی یک گاز الکترونی بدون برهم‌کنش در حضور میدان مغناطیسی با پتانسیل شیمیایی متفاوت برای هر اسپین، بدون تغییر چگالی حالت‌های انرژی. این شکل با شکل ب(4-3) معادل می‌باشد.

بدون اعمال میدان  $B$  تعداد الکترون‌های که دارای اسپین بالا هستند با تعداد الکترون‌هایی که دارای اسپین پایین هستند در واحد حجم برابر هستند  $n_+ = n_-$ .

1. ترازهای انرژی به طور مساوی، به بالا و پایین جابه‌جا می‌شود.

از این رو مجموعه اسپینی این الکترون‌ها هیچ‌گونه مغناطشی در سیستم ایجاد نمی‌کنند. ولی با اعمال میدان مغناطیسی این توازن به هم می‌ریزد ( $n_+ - n_-$ ) که باعث مغناطیسی شدن سیستم می‌شود (رابطه‌ی (8-3)).

$$M_z = m_B (n_+ - n_-) \quad (8-3)$$

میدان  $\vec{B}$  را همیشه در جهت مثبت محور Z در نظر می‌گیریم و  $m_B$  اندازه گشتاور مغناطیسی اسپینی هر الکترون می‌باشد. برای به دست آوردن مغناطش چنین سیستمی (رابطه‌ی (8-3)) نیاز به محاسبه چگالی الکترونی برای هر دو دسته از الکترون‌ها ( $n_+$  و  $n_-$ ) داریم. برای این کار با توجه به شکل (4-3) ب، به جای ثابت در نظر گرفتن پتانسیل شیمیایی برای هر دو دسته از الکترون‌ها ( $m_{\pm} = e_F$ ) ولی با چگالی حالت‌های متفاوت  $D_-(e) - D_+(e)$  (که مطابق شکل نسبت به چگالی حالت قبل از اعمال میدان مغناطیسی به اندازه‌ی  $\pm m_B B$  جابه‌جا شده‌اند (شکل (4-3) ب))، بهتر است چگالی حالت‌ها را یکسان ولی پتانسیل شیمیایی‌شان به اندازه‌ی  $\pm m_B B$  جابه‌جا شوند (شکل (5-3)). از این رو با حضور میدان  $\vec{B}$ ، پتانسیل‌های شیمیایی برای الکترون‌هایی با اسپین بالا و پایین به ترتیب  $m_{\pm} = e_F + m_B B$  و  $m_{\pm} = e_F - m_B B$  در نظر می‌گیریم.

#### - محاسبه چگالی الکترونی $n_-$

با استفاده از تابع چگالی حالت انرژی  $D_-(e)$  و توزیع فرمی-دیراک  $f(e)$ ، می‌توان چگالی تعداد الکترون برای هر دو اسپین  $-$  را به صورت زیر به دست آورد.

$$n_- = \int_{-\infty}^{+\infty} f(e) D_-(e) de \quad (9-3)$$

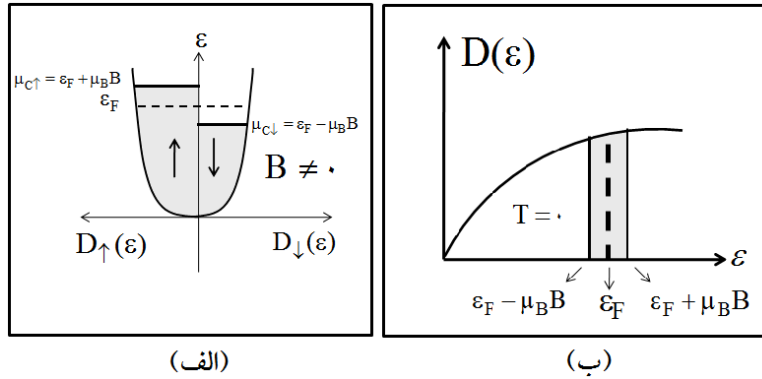
با توجه به شکل (5-3) و با جایگذاری رابطه‌ی (9-3) در معادله‌ی مغناطش رابطه‌ی (8-3) و برابری شکل چگالی حالت‌های انرژی برای هر دو اسپین الکترون

$$D_-(e) = \frac{1}{2} \frac{m}{p^2 \hbar^3} \sqrt{2me}$$

به عبارت مغناطش اسپینی زیر خواهیم رسید:

$$M_z = m_B \int_{e_F - m_B B}^{e_F + m_B B} f(e) D_-(e) de \quad (10-3)$$

در دمای صفر کلونین تابع پرشدگی (تابع فرمی-دیراک  $f(\epsilon)$ ) برابر واحد است، از این رو کلیه حالت‌های انرژی تا انرژی فرمی پر خواهد بود. با توجه به این که حداکثر میدان مغناطیسی ایجاد شده در آزمایشگاه بیش از چند تسلا نمی‌باشد (که آن را می‌توان معادل دمایی چند کلونین دانست)، از این رو در این محدوده‌ی میدان مغناطیسی، مقدار عبارت  $m_B B$  در مقایسه با انرژی حرارتی  $k_B T$  بسیار کوچک است که باعث کوچک شدن حدود انتگرال (3-10) می‌شود (شکل (3-6)).<sup>1</sup>



شکل 3-6. الف) نمودار چگالی حالت  $D(\epsilon)$  با پتانسیل‌های شیمیایی متفاوت به دلیل حضور میدان مغناطیسی. سطح هاشور خورده در آن معرف پرشدگی حالت‌ها برای هر دو چگالی حالت انرژی را نشان می‌دهد (ب) تفاضل چگالی حالت‌ها از نمودار (الف) سطح هاشور خورده در نمودار (ب) را نشان می‌دهد. در این جا تابع توزیع فرمی-دیراک را تقریباً به‌ازای حالت‌های انرژی پایین‌تر از انرژی پتانسیل شیمیایی را یک در نظر گرفته شده است.

با استفاده از عبارت انتگرالی که در پاورقی<sup>1</sup> به‌ازای حدود انتگرالی کوچک آورده شده است می‌توان عبارت مغناطش چنین سیستمی را به صورت زیر نتیجه گرفت:

$$M_z = m_B^2 B D(\epsilon_F) = m_B^2 m_0 H D(\epsilon_F) \quad (11-3)$$

۱. عبارت انتگرالی  $\int_a^b g(x) dx \approx (b-a) g\left(\frac{a+b}{2}\right)$  به‌ازای حدود انتگرال بسیار نزدیک به هم  $|b-a| \ll 1$  برقرار می‌باشد.



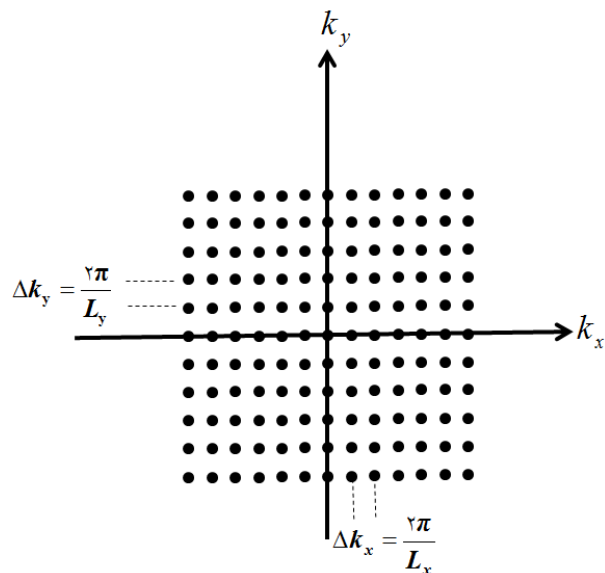
در عبارت (11-3)  $\dot{\mathbf{B}} = \dot{\mathbf{H}}$  که در آن  $\dot{\mathbf{B}}$  ضریب نفوذپذیری مغناطیسی مواد می باشد، استفاده شده است.

از مکانیک آماری می دانیم که پذیرفتار مغناطیسی  $C$  از مشتق مغناطش نسبت به شدت میدان مغناطیسی  $H$  در حد میدان صفر به دست می آید (رابطه های (11-3) و (3-12)).

$$C = \left. \frac{\partial M_z}{\partial H} \right|_{H=0} \quad (12-3)$$

$$C = m_B^2 D(\epsilon_F) = \frac{m m_B^2 m_0}{p^2 h^3} \sqrt{2m\epsilon_F}$$

در عبارت (12-3) از عبارت (7-3) استفاده شده است.



شکل 7-3. کوانتیزه شدن فضای  $k$  به دلیل قرار گرفتن الکترون در جعبه با ابعاد متناهی. در شکل فقط حالت های قرار گرفته شده در صفحه  $(k_x, k_y)$  به ازای  $k_z$  ثابت نمایش داده شده است.

همان طور که اشاره شد الکترون به دو طریق (اسپینی و حرکتی) می تواند مسبب مغناطش در سیستم باشد. تاکنون فقط به اثرات اسپینی الکترون ها در مغناطش سیستم توجه شده است. حال می خواهیم در ادامه به رفتار حرکتی الکترون مربوط به حرکت

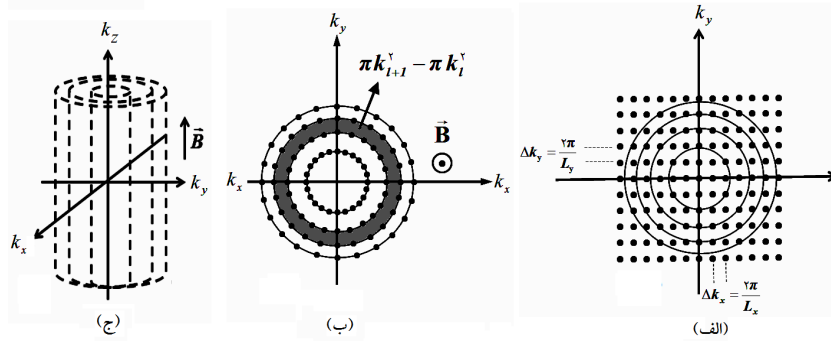
اربیتالی الکترون‌های مقید به هسته با اندازه حرکت مداری ذاتی  $\mathbf{L}$  و حرکت مداری ناشی از حضور میدان  $\mathbf{B}$  مربوط به الکترون‌های رسانش (سرگردان) که قید کمتری به هسته اتم‌هایشان دارند، را بررسی نماییم.

• سهم حرکتی الکترون‌های سرگردان (ترازهای لانداو)

در فصل اول مسئله گاز الکترونی بدون برهم‌کنش در یک جعبه با ابعاد متنهائی را به‌طور کامل بررسی شد. به علت متنهائی بودن ابعاد جعبه مؤلفه‌های بردار موج الکترون  $k = (k_x, k_y, k_z)$  کوانتیزه می‌باشند (مطابق شکل (3-7)).

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} \quad (13-3)$$

با حضور میدان مغناطیسی در راستای  $z$  مقادیر مجاز  $k$  طوری تغییر می‌کنند که در مؤلفه‌های کوانتیزه  $k_z$  آن‌ها تغییری حاصل نگردند<sup>1</sup> و مؤلفه‌های مجاز کوانتیزه  $k_x$  و  $k_y$  آن‌ها بر روی حلقه‌هایی واقع می‌گردند که سطوح استوانه‌های لانداو<sup>2</sup> را تشکیل می‌دهند (شکل (3-8)).



شکل 3-8. حضور یک گاز بدون برهم‌کنش در جعبه با اعمال میدان مغناطیسی و تشکیل سطوح استوانه‌های لانداو (الف) بدون حضور میدان  $B=0$  (ب) و (ج) با حضور میدان  $B \neq 0$ .

1. ایجاد تقارن استوانه‌های با مؤلفه‌ی کوانتیزه شده در راستای میدان  $k_z = 2\pi n/L_z$  که در آن  $n$  متعلق است به اعداد صحیح

2. Landau tubes

حال اگر اسپین الکترون‌های رسانش را در نظر نگیریم و فقط به سهم حرکت مداری آن‌ها که ناشی از حضور میدان مغناطیسی است توجه کنیم، خواهیم دید که حرکت مداری الکترون‌های رسانش بر اساس قانون لنز طوری است تا شار عبوری از خود را ثابت نگاه دارد<sup>1</sup> که گشتاور مغناطیسی حاصل آن خلاف میدان مغناطیسی اعمالی خواهد بود (دیامغناطیس لاندائو). در آزمایشگاه دیده می‌شود که عبارت پذیرفتار مغناطیسی  $C$  با تغییرات میدان مغناطیسی رفتاری نوسانی از خود نشان می‌دهد<sup>2</sup> که در ادامه همین فصل به آن اشاره خواهد شد.

همان‌طور که از مکانیک کوانتومی به یاد داریم برای نوشتن هامیلتونی یک سیستم گاز الکترونی، تحت میدان مغناطیسی خارجی، کافی است که فقط اندازه حرکت الکترون را از  $\hat{p} = -i\hbar\hat{\nabla} + e\hat{A}$  به  $\hat{p} = -i\hbar\hat{\nabla}$  تبدیل نماییم. در اینجا  $\hat{A}$  پتانسیل برداری است و رابطه‌ی آن با میدان مغناطیسی به صورت  $\hat{B} = \hat{\nabla} \times \hat{A}$  می‌باشد.

$$H = \frac{1}{2m} \frac{\hbar^2 \hat{\nabla}^2}{\epsilon_0} + e\hat{A} \cdot \hat{p} + \frac{e^2}{2m} \hat{A}^2 \quad (14-3)$$

در کل روابط  $e > 0$  است و میدان مغناطیسی  $\hat{B}$  در جهت مثبت محور  $Z$  می‌باشد. با انتخاب مناسب پتانسیل برداری  $\hat{A}$  و با استفاده از اتحاد  $\hat{N} \times (\hat{A}_y) = \hat{A}_x \hat{N}_y - y \hat{N}_x \hat{A}_x$  می‌توان هامیلتونی یک گاز الکترونی بدون برهم‌کنش در حضور یک میدان مغناطیسی به صورت زیر نوشت.

$$H = \frac{1}{2m} \frac{\hbar^2 \hat{\nabla}^2}{\epsilon_0} + e\hat{A} \cdot \hat{p} + \frac{e^2}{2m} \hat{A}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\nabla}^2 + \frac{e\hbar}{2mi} \hat{N} \times \hat{A} + \frac{e\hbar}{2mi} \hat{A} \times \hat{N} + \frac{e^2}{2m} \hat{A}^2 \quad (15-3)$$

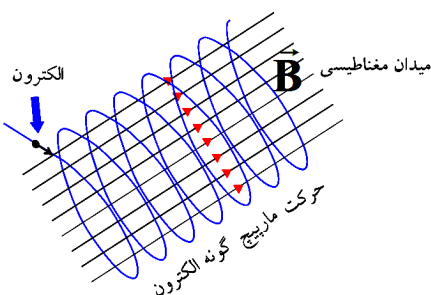
کلی‌ترین انتخاب برای پتانسیل برداری  $\hat{A}$  که نه فقط تقارن استوآن‌های در هامیلتونی آن دیده شود بلکه با کرل گرفتن از آن، میدان مغناطیسی  $\hat{B}$  اعمال شده به سیستم را نیز نتیجه دهد، به صورت  $\hat{A} = (-\frac{yB}{2}, \frac{xB}{2}, 0)$  پیشنهاد می‌گردد. از سوی دیگر انتخابی بودن  $\hat{A}$ ، می‌تواند شرط انتخابی دیگری را به  $\hat{A}$  نسبت داده شود

1. اثر بوهم-هارونوف.

2. اثر دوہانس-ون‌آلفن.

$(\dot{\mathbf{N}} \times \mathbf{A} = 0)$  که به پیمانه کولمب معروف است. در این پیمانه، هامیلتونی به صورت زیر نوشته می شود.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{e\hbar B}{2mi} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{e^2 B^2}{8m} (x^2 + y^2) \quad (16-3)$$



شکل 9-3. حرکت مارپیچ گونه یک الکترون آزاد در حضور یک میدان مغناطیسی.

عبارت (16-3) از سه جمله تشکیل شده است که می توان نکات زیر را از آن

استخراج نمود:

(1) جمله اول: همان عبارت انرژی جنبشی الکترون می باشد.

(2) جمله دوم: با توجه به عملگر اندازه حرکت مداری  $L_z = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$  و قانون لنز<sup>1</sup>، با اعمال میدان  $\mathbf{B}$  در جهت مثبت محور  $z$ ، الکترون ها اندازه حرکت زاویه ای در جهت میدان به خود می گیرند که گشتاور دوقطبی مغناطیسی القایی  $\mathbf{\mu}$  آن ها طبق رابطه ی  $(\mathbf{m}_L = (-e/2m)\mathbf{L})$  در جهت عکس میدان مغناطیسی قرار می گیرند. پتانسیل برهم کنشی گشتاور مغناطیسی القایی  $\mathbf{\mu}$  با میدان  $\mathbf{B}$  جمله مثبتی (به صورت  $(e/2m) \mathbf{L} \times \mathbf{B} = -\mathbf{m}_L \times \mathbf{B} > 0$ ) را به هامیلتونی تحمیل می کند که معادل با یک پذیرفتاری مغناطیسی منفی در سیستم برای این دسته الکترون سرگردان می باشد (رفتار دیامغناطیسی).

(3) جمله سوم، نیز دارای رفتار دیامغناطیسی در حضور میدان  $\mathbf{B}$  است که در ادامه به آن می پردازیم.

1. طبق قانون لنز، الکترون های آزاد در حضور میدان  $\mathbf{B}$  گشتاور مغناطیسی حرکتی  $\mathbf{\mu}$  را طوری به خود می گیرند تا با تغییر شار میدان مغناطیسی مخالف کنند.

دیامغناطیسی بودن جمله سوم رابطه‌ی (3-16) را می‌توان به صورت زیر نشان داد. با استفاده از روش اختلال، مسئله را به صورت اختلالی تا اختلال مرتبه اول پیش می‌بریم:

$$\mathbf{e} = \frac{e^2 B^2}{8m} \langle \mathbf{e} | x^2 + y^2 | \mathbf{e} \rangle \quad (17-3)$$

در اینجا  $\mathbf{e}$  اختلال مرتبه اول و  $|\mathbf{e}\rangle$  ویژه حالت مجموعه بدون اختلال است. در این مجموعه گاز الکترونی بدون برهم‌کنش، با متقارن بودن ویژه حالت  $|\mathbf{e}\rangle$  نسبت به مؤلفه‌های مختصات فضایی  $x$ ،  $y$  و  $z$ ، می‌توان رابطه‌ی (3-18) را نتیجه گرفت.

$$\langle \mathbf{e} | x^2 + y^2 | \mathbf{e} \rangle = \frac{2}{3} \langle \mathbf{e} | r^2 | \mathbf{e} \rangle \quad (18-3)$$

انرژی مرتبه اول برای یک الکترون به صورت زیر باز نویسی می‌شود.

$$\mathbf{e} = \frac{2e^2 B^2}{24m} \langle \mathbf{e} | r^2 | \mathbf{e} \rangle \quad (19-3)$$

چگالی انرژی (انرژی بر واحد حجم) یک گاز الکترونی بدون برهم‌کنش برابر است  $\mathbf{E} = n\mathbf{e}$ . از ترمودینامیک به یاد داریم در دمای صفر کلوین با مشتق‌گیری از انرژی نسبت به میدان مغناطیسی  $\mathbf{B}$ ، کمیت مغناطش سیستم  $\mathbf{M}$  محاسبه می‌گردد (رابطه‌ی (3-20)).

$$\mathbf{M} = - \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{B}} = - \frac{e^2 B}{6m} \langle \mathbf{e} | r^2 | \mathbf{e} \rangle = - \frac{e^2 m_b H}{6m} \langle \mathbf{e} | r^2 | \mathbf{e} \rangle \quad (20-3)$$

برای یک سیستم الکترونی بدون برهم‌کنش با چگالی الکترونی  $n$  مغناطش سیستم برابر است با:

$$\mathbf{c} = \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \mathbf{H}} = - \frac{ne^2 m_b H}{8m} \langle \mathbf{e} | r^2 | \mathbf{e} \rangle < 0 \quad (21-3)$$

حاصل عبارت (3-21) منفی است که نشان دهنده‌ی رفتار دیامغناطیسی این سهم

از پذیرفتار مغناطیسی  $\mathbf{c}$  می‌باشد.

به معادله‌ی (3-15) برمی‌گردیم و دوباره سهم کامل دیامغناطیسی چنین سیستمی را برآورد می‌نماییم. این بار با انتخاب یک پتانسیل برداری  $\mathbf{A}$  که حل معادله شرودینگر

را برای ما آسان تر می سازد شروع می کنیم. انتخاب بردار پتانسیل  $\vec{A}$  به صورت  $\vec{A} = (0, xB, 0)$  و حل معادله شرودینگر آن  $H\psi = eY\psi$ ، ما را به ویژه تابع  $\psi(x, y, z)$  و ویژه مقدار  $E$  سیستم سوق می دهد. هر چند در نگاه اول تقارن استوانه های در هامیلتونی دیده نمی شود، ولی این تقارن در بطن نتیجه معادله شرودینگر نهفته است.

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + eBx \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = eY\psi \quad (22-3)$$

با انتخاب مناسب ویژه تابع موج برای معادله ی (22-3) به صورت رابطه ی (23-3) (23) به معادله ی (24-3) خواهیم رسید.

$$\psi(x, y, z) = e^{ik_z z} e^{ik_y y} j(x) \quad (23-3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 j}{\partial x^2} + \frac{e^2 B^2}{2m} x + \frac{p_y}{eB} \frac{\partial j}{\partial x} = \frac{eY}{\hbar^2} - \frac{p_z^2}{2m} j(x) \quad (24-3)$$

در رابطه ی (23-3) با توجه به پاسخ موج تخت گونه در راستاهای  $z$  و  $y$ ، روابطه  $k_z = p_z/\hbar$  و  $k_y = p_y/\hbar$  بین مؤلفه های اندازه حرکت و بردار موج برقرار می باشند. با یک تغییر متغیرهای ساده به صورت:  $w_L = eB/m$ ،  $\tilde{x} = x + p_y/eB$  و  $E = eY - p_z^2/2m$  در رابطه ی (24-3)، معادله شرودینگر بالا به معادله دیفرانسیل نوسانی ساده تبدیل می شود (رابطه ی (25-3)).

$$j(\tilde{x}) + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{eY}{e} - \frac{1}{2} m w_L^2 \tilde{x}^2 j(\tilde{x}) = 0 \quad (25-3)$$

با توجه به معادلات بالا می توان نتیجه گرفت که پاسخ سیستم در راستای  $z$  یک حرکت آزاد و در صفحه  $xy$  یک حرکت ساده نوسانی در جهت محور  $x$  است که مرکز نوسان آن با توجه به عبارت  $\tilde{x} = x + p_y/eB$  توسط مؤلفه  $p_y$  به صورت  $x_0 = p_y/eB$  مشخص می گردد.

همان طور که از مکانیک کوانتومی به یاد داریم انرژی یک معادله نوسانی ساده کوانتیزه است که به صورت رابطه ی (26-3) نوشته می شود.

$$E = \hbar \omega_L \left(1 + \frac{1}{2}\right) = m_B B (2l + 1) \quad (26-3)$$

$$E = e - \frac{p_z^2}{2m}$$

$$e = \hbar \omega_L \left(1 + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m}$$

پاسخ در راستای محور z مانند الکترون آزاد است ولی با ویژه مقادیر کوانتیزه مؤلفه‌های z اندازه حرکت به صورت  $p_z = \hbar(2n\pi/L_z)$  به دست می‌آید<sup>1</sup> که می‌توان با استفاده از آن رابطه‌ی (27-3) را نتیجه گرفت.

$$e = \hbar \omega_L \left(1 + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m L_z^2} \quad (27-3)$$

در رابطه‌های (26-3) و (27-3)، 1 یک عدد طبیعی و n یک عدد صحیح می‌باشند. **نکته 2-3:** تقارن استوانه‌های مسئله برای مؤلفه‌های x و y ایجاب می‌کند که با انتخاب پتانسیل برداری دیگری به صورت  $\vec{A} = (-yB, 0, 0)$  به یک معادله دیفرانسیل دیگر تبدیل شود که تنها تفاوت آن‌ها در تغییر نقش متغیر x به y است، به عبارت دیگر، به یک پاسخ نوسانی در جهت محور y با مراکز نوسانی که توسط مؤلفه اندازه حرکت  $p_x$  مشخص می‌گردد.

با مشاهده به شکل (8-3) در هر دو حالت: الف) آرایش حالت‌های کوانتیزه الکترون‌ها در یک جعبه بدون حضور میدان مغناطیسی  $\vec{B}$  (شکل (8-3) الف)، ب) با حضور میدان  $\vec{B}$ ، آرایش حالت‌های (الف) طوری تغییر آرایش می‌دهند که تقارن استوانه‌های بر آن‌ها حاکم شود (شکل (8-3) ب و ج). تقارن استوانه‌های و کوانتیزه بودن حرکت نوسانی در صفحه x y باعث می‌شود تا حالت‌های کوانتیزه مجاز سیستم بر روی حلقه‌های در صفحه  $k_x$  و  $k_y$  با انرژی‌های یکسان برابر با  $\hbar \omega_L \left(1 + \frac{1}{2}\right)$  قرار گیرند. کم‌ترین انرژی حلقه  $\frac{1}{2} \hbar \omega_L$  می‌باشد که به‌ازای  $l=0$  نتیجه می‌دهد. هر حلقه معادل با

1. به دلیل منتهای بودن ابعاد جعبه.

یک تراز انرژی لاندائو می‌باشد که تعداد حالت‌های قرار گرفته شده بر روی هر حلقه برابر با تبهگنی ترازهای لاندائو است (شکل (8-3) ب).

در ادامه خواهیم دید تعداد حالت‌های مجاز روی هر حلقه، ثابت و برابر با درجه تبهگنی هر تراز انرژی لاندائو (شکل (10-3)) می‌باشد.

به‌سادگی نشان داده می‌شود، اندازه مساحت بین هر دو حلقه مجاز متوالی در فضای  $k$  در حضور یک میدان مغناطیسی ثابت  $\mathbf{B}$ ، با یکدیگر برابر می‌باشد (شکل (8-3) ب) و یا به زبان ساده‌تر، اندازه مساحت بین هر دو حلقه مجاز برابر با مضرب صحیحی از مساحت مابین هر دو حلقه متوالی است.

حالت‌های انرژی به‌دست آمده (رابطه‌ی (3-27)) وابسته به اعداد کوانتومی  $n$  و  $l$  می‌باشند. سطوح انرژی لاندائو با عدد کوانتومی  $l$  مشخص می‌شوند که این سطوح انرژی به‌ازای یک  $k_z$  ثابت (یا به‌ازای  $n$  ثابت) که مربوط به نقاطی از فضای  $k$  که نسبت به صفحه‌ی  $x,y$  به یک فاصله قرار دارند و سهمی از فضای  $k_x$  و  $k_y$  با یک  $k_z$  ثابت را در بر می‌گیرند، می‌باشند. انرژی این حالت‌ها پرشده از یک حداکثری با انرژی  $E_n$  کمتر می‌باشند<sup>1</sup> (شکل (3-10)).

با توجه به شکل (8-3) ب و با استفاده از عبارت انرژی مربوط به هر تراز  $\mathbf{h}^2 k_1^2 / 2m$ ، اختلاف انرژی مابین هر دو تراز انرژی متوالی برابر است با:

$$\frac{\partial \mathbf{h}^2 k_{l+1}^2}{\partial \mathbf{e}} - \frac{\mathbf{h}^2 k_l^2}{2m} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial \mathbf{e}} = \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial \mathbf{e}} + 1 + \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{h} w_L}{\partial \mathbf{e}} - \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial \mathbf{e}} + \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{h} w_L}{\partial \mathbf{e}} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial \mathbf{e}} = \mathbf{h} w_L \quad (28-3)$$

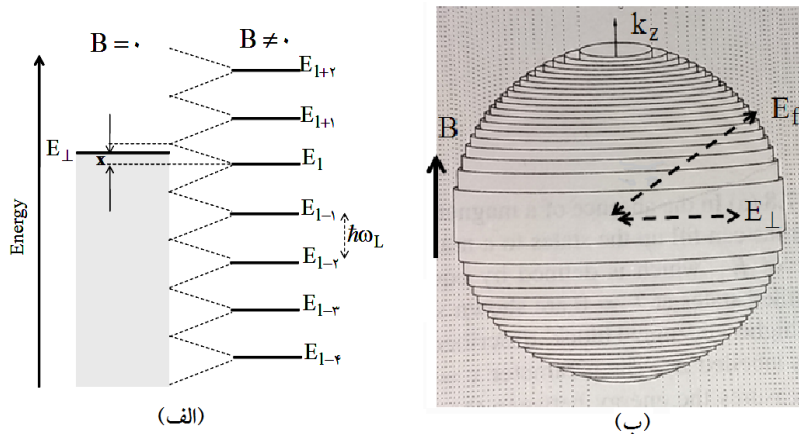
با استفاده از عبارت (3-28)، مساحت ما بین هر دو تراز انرژی متوالی لاندائو (  $l$  و  $l+1$ ) برابر است با:

$$p k_{l+1}^2 - p k_l^2 = \frac{2mp}{\mathbf{h}^2} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial \mathbf{e}} + 1 + \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{h} w_L}{\partial \mathbf{e}} - \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial \mathbf{e}} + \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{h} w_L}{\partial \mathbf{e}} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial \mathbf{e}} = \frac{2mp w_L}{\mathbf{h}} \quad (29-3)$$

1. مکان هندسی از فضای  $k$  که نسبت به محور  $z$  به یک فاصله باشند (سطح جانبی استوانه) که حداکثر سهم انرژی مربوط به این مکان هندسی متعلق به مؤلفه‌های  $k_x$  و  $k_y$  به‌ازای یک  $k_z$  ثابت را با  $E_n$  نمایش می‌دهیم.



نکته 3-3: رابطه‌های (28-3) و (29-3) نشان می‌دهد که مساحت سطح واقع بین هر دو تراز متوالی و اختلاف انرژی آن‌ها، فقط به  $w_L$  بستگی دارند که خودش طبق رابطه‌ی  $w_L = eB/m_e$  با شدت میدان مغناطیسی  $B$  متناسب می‌باشد.



شکل 3-10 الف) تراز لاندائو با تبهگنی  $p$ ، فاصله هر تراز برابر است با  $\hbar\omega_L$ . ب) لوله‌های لاندائو.

در ادامه دو روش را برای محاسبه تبهگنی هر تراز لاندائو<sup>1</sup> ارائه می‌دهیم.

(1) در این محاسبه از نکات زیر استفاده می‌کنیم:

$\vec{n}$  مراکز نوسانی تابع  $\vec{x}$   $z$  بایستی در طول جعبه در راستای محور  $x$  که گاز الکترونی را در بر می‌گیرند، قرار دارند  $0 < (p_y/eB) < L_x$ .

$\vec{n}$  از طرفی چگالی تعداد حالات مجاز در واحد طول در امتداد محور  $k_y$  برابر با  $L_y/2\pi$  می‌باشد.

$\vec{n}$  با استفاده از  $0 < (p_y/eB) < L_x$  و  $p_y = \hbar k_y$ ، دامنه‌ی تغییرات  $k_y$  برابر است با  $L_x eB/\hbar$  (زیرا  $0 < k_y < L_x eB/\hbar$ ). حاصل ضرب این دامنه‌ی تغییرات در چگالی حالات مجاز در راستای  $y$ ، تعداد مراکز نوسانی و یا تبهگنی محاسبه می‌گردد (رابطه‌ی (30-3)).

1. یا تعداد حالت‌های مجاز روی هر حلقه انرژی.

$$P = \frac{e \mathbf{L}_x e B \mathbf{L}_y}{\hbar \hbar} \cdot \frac{\hbar}{2p} = \frac{e B L_x L_y}{2p \hbar} \cdot 2 = \frac{m \omega_L L_x L_y}{2p \hbar} \cdot 2 \quad (30-3)$$

ضرب عدد 2 در رابطه‌ی بالا، در خصوص تبهگنی اسپینی است. (2) روش دیگر محاسبه‌ی تبهگنی  $p$  (با توجه به شکل (8-3)ب)، محاسبه تعداد حالات مجاز قرار گرفته در فضای اندازه حرکت ما بین هر دو تراز متوالی لاندائو می‌باشد. حاصلضرب مساحت به دست آمده در تعداد حالات مجاز در واحد سطح (که برابر است با  $(2p)^2/L_x L_y$ )، تبهگنی هر تراز لاندائو به دست می‌آید.

$$p = (p k_{1+1}^2 - p k_1^2) \times \frac{e L_x L_y}{\hbar (2p)^2} \cdot \frac{\hbar}{2} = \frac{m \omega_L L_x L_y}{2p \hbar} \cdot 2 \quad (31-3)$$

ضرب عدد 2 در رابطه‌ی (31-3)، در خصوص تبهگنی اسپینی است.

**نکته 3-4:** از دو روش بالا می‌توان این نتیجه را گرفت که تعداد کل حالات مجاز یک گاز الکترونی آزاد با حضور میدان و بدون حضور میدان با هم برابر و فقط نحوه آرایش فضایی‌شان در فضای  $k$  تغییر می‌کنند.

#### • سهم حرکتی الکترون‌ها در پذیرفتاری مغناطیسی الکترون‌های سرگردان (دیامغناطیس لاندائو)

در بخش قبل به خواص پارامغناطیسی اسپینی و رفتار حرکتی یک گاز الکترونی بدون برهم‌کنش در حضور میدان مغناطیسی پرداخته شد. در پیوست (3-1) به محاسبه پذیرفتاری مغناطیسی ناشی از سهم حرکتی الکترون‌ها در مغناطیسی نمودن گاز الکترونی در حضور میدان مغناطیسی پرداخته می‌شود. با در نظر گرفتن سهم حرکتی الکترون‌ها و محاسبه اختلاف انرژی  $DU$  مجموعه با حضور و بدون حضور میدان مغناطیسی  $B$ ، می‌توان نشان داده شود که پاسخ سیستم به میدان مغناطیسی اعمالی چگونه خواهد بود. این اختلاف انرژی، همان کار انجام شده بر مجموعه توسط میدان  $B$  است که می‌تواند باعث مغناطیسی کردن سیستم شود. این اثر

با نام دیامغناطیس لاندائو<sup>1</sup> به صورت یک پدیده کاملاً شناخته شده معروف می‌باشد. مقدار پذیرفتار به دست آمده برابر است با:

$$c_L = -\frac{1}{3} m_0 m_B^2 D(E_F) \quad (32-3)$$

که در رابطه‌ی (32-3) از عبارت‌های  $m_B = \frac{e\hbar}{2m}$  و  $D(E_F) = \frac{4\pi m k_F}{\hbar^2} \frac{dN}{dE}$  به ترتیب مگنتون بور و چگالی حالت انرژی گاز یک الکترونی بدون برهم‌کنش در سطح فرمی استفاده شده است. منفی بودن پذیرفتاری مغناطیسی، نشان دهنده دیامغناطیس بودن سیستم به‌ازای سهم حرکتی الکترون می‌باشد که به دیامغناطیس لاندائو معروف می‌باشد. به این معنی که مغناطش  $M$  القاء شده به مجموعه توسط میدان خارجی طوری است که طبق قانون لنز با میدان اعمالی مخالفت می‌کند. با توجه به سهم اسپینی  $c_P$  (پارامغناطیس پائولی رابطه‌ی (3-12)) در مغناطش سیستم می‌توان رابطه‌ی (3-33) را نتیجه گرفت.

$$c_L = -\frac{c_P}{3} \quad (33-3)$$

با در نظر گرفتن هر دو سهم اسپینی و حرکتی الکترون برای یک گاز الکترونی آزاد، پذیرفتار مغناطیسی مثبتی را نتیجه می‌دهد (3-34).

$$c = c_L + c_P = -\frac{c_P}{3} + c_P = \frac{2}{3} c_P \quad (34-3)$$

بنابراین در کلیه فلزات به خاطر سه برابر بودن اثرات پارامغناطیس نسبت به دیامغناطیس، رفتار پارامغناطیسی بر سیستم غالب می‌باشد. شاید این گفته کمی عجولانه باشد. در رابطه‌های به دست آمده بالا از تقریب الکترون آزاد استفاده شده است و هیچ‌گونه اثرات ساختار نواری در آن دیده نشده است. الکترون‌های نوار رسانش در فلزات دارای جرم مؤثر  $m^*$  هستند، از این رو چگالی حالت در سطح فرمی  $D(E_F)$  در ساختار نواری با ضریب  $m^*/m$  هر دو حالت پارامغناطیس و دیامغناطیس، بهبود می‌یابند. عبارت مگنتون بور  $m_B$  یک مقدار ثابت جهانی است که برحسب جرم آزاد

1. به دلیل داشتن پذیرفتاری مغناطیسی منفی.

الکترون  $m$  تعریف می‌شود. از این رو عبارت  $m_B$  در حالت پارامغناطیس اسپینی همان ثابت مگنتون بور است در صورتی که برای محاسبه پذیرفتاری دیامغناطیسی الکترون‌های رسانش به دلیل رفتار حرکتی آن‌ها در نوارهای انرژی، جرم مؤثر در عبارت  $m_B$  ظاهر می‌شود که دیگر ثابت مگنتون بور نخواهد بود و برای تصحیح پذیرفتاری دیامغناطیسی بایستی عبارت (33-3) را در عبارت  $(m/m^*)^2$  ضرب نمود. با توجه به این موارد، می‌توان نسبت پذیرفتاری دیامغناطیسی به پذیرفتاری پارامغناطیسی را به صورت زیر نتیجه گرفت.

$$\frac{c_L}{c_p} = -\frac{1}{3} \frac{\mu_B m \sigma^2}{\epsilon m^* \phi} \quad (35-3)$$

و پذیرفتاری کل مجموعه برابر خواهد شد:

$$c = c_p \frac{\epsilon}{\epsilon} - \frac{1}{3} \frac{\mu_B m \sigma^2 \dot{U}}{\epsilon m^* \phi \dot{U}} \quad (36-3)$$

**نکته 3-5:** فلزاتی که رابطه‌ی جرم مؤثر الکترون‌شان با جرم آزاد الکترون  $m^* < m/\sqrt{3}$  باشد، سیستم رفتار دیامغناطیسی به خود می‌گیرد. مانند بیسموت که الکترون دارای جرم مؤثر  $m^* \sim 0.01m$  است.

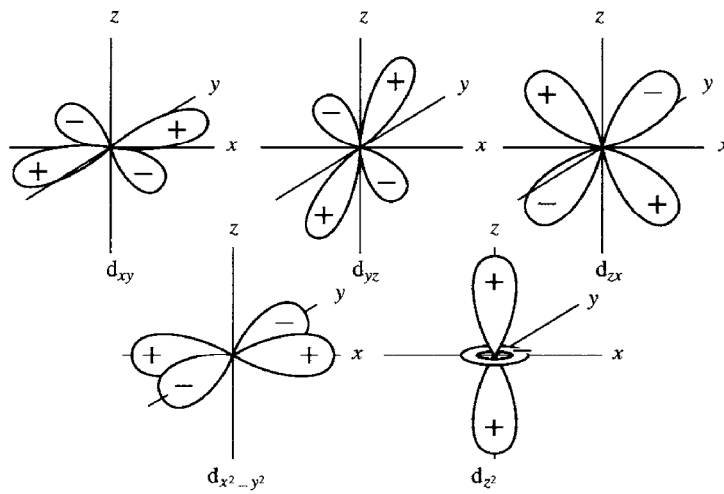
تاکنون به فلزاتی توجه شده است که نوار رسانش آن‌ها از اربیتال‌های قسمتی پر  $s$  و  $p$  تشکیل شده‌اند. خصوصیت این اربیتال‌ها غیرجایگزیده بودن‌شان می‌باشند که نوارهای انرژی پهنی را تولید می‌کنند و الکترون در آن نوارها به مانند الکترون‌های تقریباً آزاد، رفتار می‌کنند.

**نکته 3-6:** اتم‌ها به واسطه‌ی قرار گرفتن در شبکه بلوری و اثرات شبکه‌ای<sup>1</sup> بر روی اربیتال آن‌ها ساختار یونی به خود می‌گیرند که با استفاده از قانون هوند که در ادامه به آن خواهیم پرداخت، می‌توانند رفتار مغناطیسی داشته باشند که نتیجه آن می‌تواند به مغناطیسی شدن ماده منتهی گردد.

در ادامه به موادی خواهیم پرداخت که متشکل از اتم‌هایی با اربیتال‌های قسمتی پر  $d$  و یا  $f$  باشند (یعنی کامل پر نباشند). از ویژه‌گی‌های مهم این نوع اربیتال‌ها

<sup>1</sup>. Crystal field

می‌توان به جایگزیده بودن آن‌ها اشاره نمود. این جایگزیدگی سبب می‌شود که شکل اربیتال خود را حفظ کنند و مانند الکترون‌های مغزی در مجموعه رفتار کنند. قسمتی پر بودن آن‌ها گاهی وقت‌ها باعث غیر صفر شدن اندازه حرکت مداری این نوع اتم‌ها خواهد شد که طبق رابطه‌ی (2-3) یک گشتاور دوقطبی مغناطیسی ذاتی  $m$  را می‌توان به آن‌ها نسبت داد. این دسته از الکترون‌های شبه مغزی در بلور، علاوه بر خواص مغناطیسی، خواص فیزیکی بسیار جالبی دیگری از نوع سیستم‌های همبسته قوی را به سیستم تحمیل می‌کند که خارج از حوصله این کتاب می‌باشد.



شکل 3-11. نمایش پنج اربیتال d.

هامیلتونی یک چنین اربیتال‌های (که شکل اتمی خود را حفظ می‌کند) می‌توان با اضافه کردن یک پتانسیل کولنی  $V(r) = -Ze^2/r$  به رابطه (3-15) به دست آورد. این الکترون‌های شبه مغزی به واسطه‌ی این پتانسیل مرکزی اندازه حرکت مداری ذاتی  $\hat{L}$  و گشتاور دوقطبی مغناطیسی اتمی ذاتی  $\hat{m}$  پیدا می‌نمایند. در حضور میدان مغناطیسی  $\hat{B}$  و برهم‌کنش آن با گشتاور مغناطیسی اتمی، پتانسیل منفی را به سیستم به صورت  $U = -\hat{m} \times \hat{B}$  تحمیل می‌کند که پذیرفتاری مغناطیسی  $c = \frac{\partial M_z}{\partial H} \Big|_{H=0} > 0$  مثبتی به سیستم می‌دهد (رفتار پارامغناطیسی).

### 3-2 اثرات میدان مغناطیسی بر الکترون‌های شبه مغزی مواد

در بخش 3-1 با در نظر گرفتن الکترون‌های رسانش به مانند یک گاز الکترونی بدون برهم‌کنش (با تقریب اول)، به بررسی خواص مغناطیسی آن‌ها در حضور میدان مغناطیسی  $B$  پرداخته است. در ادامه سهم الکترون‌های شبه‌مغزی در خواص مغناطیسی مواد خواهیم پرداخت. اثرات پارامغناطیسی الکترون‌های شبه‌مغزی در حضور میدان مغناطیسی خارجی همراه با میدان مغناطیسی متوسط داخلی که ناشی از برهم‌کنش‌های اسپینی بین گشتاور دوقطبی مغناطیسی اتم‌های مغناطیسی مجموعه می‌باشند را بررسی خواهیم نمود.

### 3-2-1 رفتار پارامغناطیسی الکترون‌های شبه‌مغزی مغناطیسی در حضور میدان

#### • نگاه نیمه‌کلاسیکی به پارامغناطیسی سیستم

هر اتم متشکل از هسته و مجموعه‌ای از الکترون‌ها است که پیرامون هسته در حال چرخش هستند و اندازه حرکت زاویه‌ای کل  $\mathbf{J}$  (و گشتاور مغناطیسی  $\mathbf{m}$ ) را به اتم تحمیل می‌نماید. گشتاور مغناطیسی هر اتم در حضور میدان مغناطیسی خارجی  $\mathbf{B}$ ، باعث هم‌سو شدن آن‌ها با میدان شده و مجموعه رفتار پارامغناطیسی را به خود می‌گیرد. در چنین شرایطی، مغناطش سیستم دارای یک حداکثر مقدار  $\mathbf{M}_s = n\mathbf{m}$  (مغناطش اشباع) است.

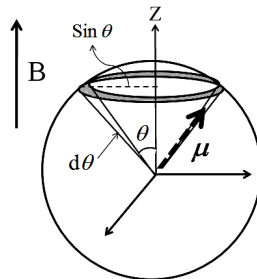
از نگاه کلاسیکی اندازه حرکت الکترون پیوسته است ( $\mathbf{J} = \hbar j$ ) و می‌تواند کلیه اندازه حرکت زاویه‌ای را به خود بگیرد، در صورتی که از نگاه کوانتومی، اندازه حرکت زاویه‌ای کل الکترون کمیتی گسسته و مضربی از ثابت پلانک ( $\mathbf{J} = \sqrt{j(j+1)}\hbar$ ) می‌باشد.

دما و برهم‌کنشی مغناطیسی هر اتم با اتم‌های پیرامون، باعث تغییر مغناطش مجموعه می‌شود. دما باعث به هم‌ریختگی جهت گشتاورهای دوقطبی مغناطیسی هر اتم شده که مغناطش سیستم را از حالت اشباع  $\mathbf{M}_s$  (در دمای صفر مطلق) دور می‌سازد. مغناطش چنین مجموعه‌ای برابر با  $\mathbf{M} = n\langle\mathbf{m}_z\rangle$  خواهد شد که در آن  $\langle\mathbf{m}_z\rangle$  متوسط مؤلفه‌ی گشتاور مغناطیسی هر اتم در راستای محور  $Z$  (همان سوی میدان مغناطیسی  $B$ ) و  $n$  چگالی تعداد قطبش مغناطیسی  $\mathbf{m}$  موجود در مجموعه می‌باشد.

برای محاسبه کلاسیکی مغناطش یک ماده مغناطیسی (متشکل از اتم‌های مغناطیسی با قطبش اتمی  $\vec{m}$ ) در حضور یک میدان مغناطیسی خارجی  $\vec{B}$ ، ابتدا متوسط قطبش مغناطیسی یک اتم مغناطیسی  $\langle \vec{m} \rangle$  را در دمای  $T$  به صورت زیر به دست می‌آوریم.

احتمال قرار گرفتن قطبش هر اتم  $\vec{m}$  در یک بازه فضایی  $dW$  (نمایه شده در شکل (3-12))، توسط تابع توزیع بولتزمن  $\exp(-U/k_B T)$  داده می‌شود (نگرش هنگرد کانونیکی<sup>1</sup>). تعداد حالت‌های ممکن در این بازه فضایی  $dW$  برابر است با:

$$N(q)dW = A e^{-U/k_B T} 2\pi \sin(q) dq \quad (37-3)$$



شکل 3-12. قرار گرفتن یک دوقطبی مغناطیسی  $\vec{m}$  در حضور یک میدان  $\vec{B}$ .

با استفاده از رابطه‌ی (37-3) و پتانسیل برهم‌کنشی بین قطبش هر اتم با میدان مغناطیسی (رابطه‌ی (38-3)) و با انتگرال‌گیری بر روی تمامی حالت‌های فضایی  $(0 < q < p$  و  $0 < z < 2p$ )، متوسط قطبش مغناطیسی هر اتم مجزا  $\langle \vec{m} \rangle$  در حضور میدان به دست می‌آید. با حاصل ضرب آن در چگالی تعداد اتم‌های مغناطیسی  $(N/V)$ ، مغناطش مجموعه در حضور میدان، نتیجه می‌دهد (رابطه‌ی (39-3)).

$$U = - \vec{\mu} \cdot \vec{B} = - mB \cos(q) \quad (38-3)$$

با حضور میدان مغناطیسی در راستای  $Z$  سهم متوسط مؤلفه‌های  $X$  و  $Y$  قطبش مغناطیسی هر اتم برابر با صفر می‌گردد  $(\langle \vec{m}_x \rangle = \langle \vec{m}_y \rangle = 0)$  و تنها مؤلفه‌ی راستای  $Z$  آن غیر صفر باقی می‌ماند  $0 \neq \langle m_z \rangle = \langle m \cos(q) \rangle$ .

1. این هنگرد آماری برای سیستمی کوچک که با یک حمام گرمایی (یا یک سیستم بزرگ) به‌ازای دما و تعداد ذرات ثابت در تعادل می‌باشند، به‌کار برده می‌شود.

$$M = \frac{\frac{N}{V} \int_0^{\pi} m \cos(q) e^{mB \cos(q)/k_B T} 2p \sin(q) dq}{\int_0^{\pi} p \sin(q) e^{mB \cos(q)/k_B T} dq} \quad (39-3)$$

با کمی محاسبات ساده ریاضی و تغییر متغیر  $x = \cos(q)$ ، عبارت (39-3) به صورت زیر بازنویسی می‌شود.

$$M = \frac{\frac{N}{V} m \int_{-1}^1 x e^{\frac{mBx}{k_B T}} dx}{\int_{-1}^1 e^{\frac{mBx}{k_B T}} dx} = \frac{N}{V} m \left[ \frac{e^{\frac{mBx}{k_B T}}}{\frac{mB}{k_B T}} - \frac{k_B T}{mB} \right]_{-1}^1 \quad (40-3)$$

**نکته 3-7:** اعمال میدان مغناطیسی خارجی  $\vec{B}$  انرژی پتانسیل  $U = -mB \cos(q)$  را به سیستم تحمیل می‌نماید که سیستم را منظم می‌سازد از طرفی انرژی حرارتی  $k_B T$  باعث بهم ریختگی مغناطیسی در سیستم می‌شود، از این رو تقابل این دو در مغناطش سیستم نقش مهمی را بازی می‌کند. نسبت این دو انرژی  $x = mB/k_B T$  کمیت بی‌بعدی را مشخص می‌سازد که مغناطش مجموعه فقط به این نسبت بستگی دارد.

با یک ساده سازی به صورت  $x = mB/k_B T$ ، عبارت داخل کروشه (رابطه‌ی 3-40)، به عبارت مشهور لانژون<sup>1</sup>  $f(x) = \coth(x) - 1/x$  تبدیل می‌گردد (رابطه‌ی 3-41).

$$M = \frac{N}{V} m \left[ \coth(x) - \frac{1}{x} \right] = \frac{N}{V} m f(x) = M_s f(x) \quad (41-3)$$

که در آن  $M_s = (N/V)m$  همان کمیت مغناطش اشباع مجموعه می‌باشد.

**نکته 3-8:** پذیرفتاری مغناطیسی سیستم در حقیقت پاسخ سیستم به شدت میدان مغناطیسی خارجی  $H$  است. این کمیت  $C$ ، یکی از ویژه‌گی‌های ذاتی هر ماده است. مواد مغناطیسی با اعمال میدان مغناطیسی خارجی می‌توانند مغناطیسی شوند (مانند آهن)، از این رو پاسخ سیستم به شدت میدان مغناطیسی به صورت مغناطش  $M$  در

<sup>1</sup> Langevin function



محیط ظاهر می‌شود. رابطه‌ی بین مغناطیش سیستم  $M$  با شدت میدان مغناطیسی خارجی در حد میدان‌های ضعیف ( $H \rightarrow 0$ ) یک رابطه خطی است (3-42).  
 از این رو طبق تعریف، حد نسبت مغناطش محیط به شدت میدان مغناطیسی خارجی  $H$ ، پذیرفتاری مغناطیسی محیط می‌گویند.

$$C_m = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{M}{H} = \frac{\int M}{\int H} \quad (42-3)$$

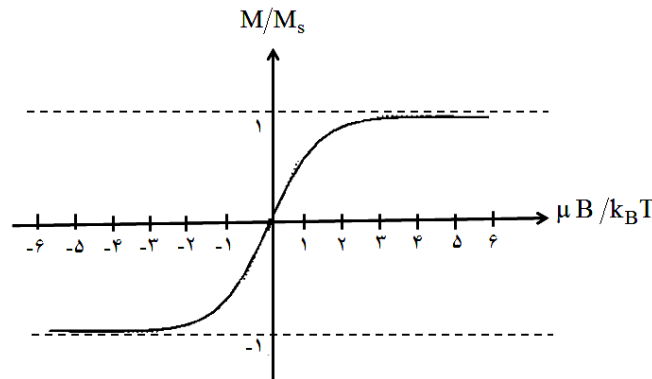
که در آن  $H$  شدت میدان مغناطیسی است ( $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$ ):

$$C_m = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{M_s \mathcal{L}\left(\frac{\mu_0 m H}{k_B T}\right)}{H} = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{M_s \frac{e}{e} \coth\left(\frac{\mu_0 m H}{k_B T}\right) - \frac{k_B T}{\mu_0 m H}}{H} \quad (43-3)$$

با توجه به بسط  $\coth(x) = 1/x + x/3 - x^3/45$ ، به ازای  $x \ll 1$  (دماهای بالا برای یک میدان ثابت  $H$  یا میدان‌های بسیار ضعیف در یک دمای ثابت  $T$ ) عبارت لانژون  $\mathcal{L}(x)$  متناسب با  $x/3$  می‌باشد.

$$C_m = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{M}{H} = \lim_{H \rightarrow 0} M_s \mu_0 \frac{m}{3k_B T} = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{N \mu_0 m^2}{3k_B T} = \frac{C}{T} \quad (44-3)$$

در رابطه‌ی (3-44)  $\mu_0$  ضریب گذردهی مغناطیسی در خلأ و  $C$  ثابت دمای کوری می‌باشند.



شکل 3-13. مغناطش سیستم نسبت به  $x = \mu_B/k_B T$ .

عکس پذیرفتاری مغناطیسی  $C_m^{-1}$  با دما رابطه‌ی خطی دارد که به قانون کوری

معرف می‌باشد. با توجه به رابطه‌ی (3-44) ثابت کوری به صورت  $C = \frac{g^2 N \mu_B^2}{6V} \frac{m^2}{3k_B}$  تعریف می‌شود.

در حد دماهای بسیار پایین و یا میدان‌های بسیار بالا  $x = mB/k_B T$ ، مقدار  $x$  به سمت مقادیر بزرگ میل می‌کند و عبارت لانژون معادل خواهد شد با:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \mathcal{L}(x) = \coth(x) - 1/x \approx 1 + 2e^{-2x} - 1/x \approx 1 - 1/x \quad (45-3)$$

از سوی دیگر، در یک میدان ثابت در دماهای بسیار کوچک مقدار مغناطش  $M$  به حداکثر اشباع خود رسیده  $M_s = (N/V)m$  و تمامی گشتاورهای دوقطبی مغناطیسی ماده هم‌راستا با میدان مغناطیسی می‌شوند.

**نکته 3-9:** عبارت کوری به دست آمده در رابطه‌ی (3-44) فقط ناشی از اثرات میدان خارجی  $\vec{B}$  با هر گشتاور مغناطیسی  $\vec{m}$  بوده و برهم‌کنش بین گشتاور دوقطبی مغناطیسی اتم‌ها  $(\vec{m}_i, \vec{m}_j)$  در نظر گرفته نشده است. با لحاظ کردن اثرات برهم‌کنشی بین گشتاورها<sup>1</sup> یک جابه‌جایی دمایی در رابطه‌ی پذیرفتاری دمایی (رابطه‌ی (3-44)) حادث می‌گردد. این اثر باعث می‌شود تا قانون کوری به قانون کوری-وایس<sup>2</sup> تصحیح یابد که در ادامه به آن خواهیم پرداخت.

یکی از روش‌های کاربردی برای در نظر گرفتن اثرات برهم‌کنشی بین دوقطبی‌های یک ماده مغناطیسی، نگرش **میدان‌های متوسط** می‌باشد<sup>3</sup>. به این معنی که میدان مغناطیسی بر روی هر دوقطبی مغناطیسی  $\vec{m}$  برابر است با مجموع مؤثر اثرات میدان مغناطیسی ناشی از همه‌ی دوقطبی‌ها دیگر می‌باشد. از این رو در ادامه سهم برهم‌کنشی بین دوقطبی‌ها را، به صورت یک میدان مغناطیسی مؤثر مولکولی  $\vec{B}_{mf}$  در شبکه در نظر می‌گیریم. بنابراین میدان مغناطیسی  $\vec{B}$  را می‌توان به صورت مجموع میدان‌های مغناطیسی خارجی  $\vec{B}_{ext}$  و میدان‌های مغناطیسی مؤثر مولکولی همسایگان  $\vec{B}_{mf}$  در مواد مغناطیسی، دانست. به میدان مغناطیسی مؤثر مولکولی (که ناشی از مولکول‌های

1. که می‌تواند یک حافظه مغناطیسی و یا پسماند مغناطیسی به سیستم تحمیل کند.

۲. Curie-Weiss

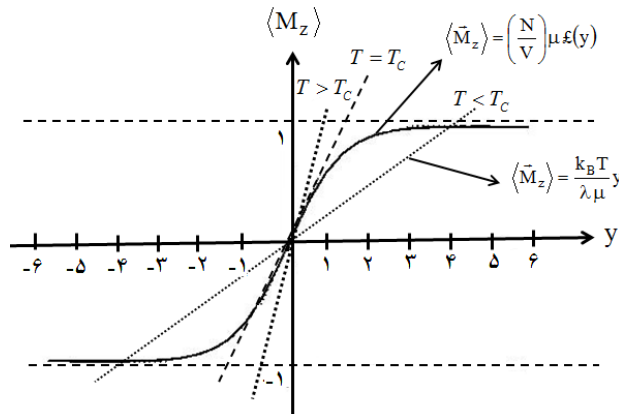
3. هر چندکه، این روش در بعضی از شرایط پاسخ مناسبی در اختیار نمی‌گذارد ولی همچنان به عنوان یک روش قدرتمند، امروزه مورد استفاده می‌باشد.

مغناطیسی مواد می باشد  $(\mu_1 \neq 0)$ ، میدان وایس<sup>1</sup> یا میدان متوسط<sup>2</sup> گفته می شود. بدون حضور میدان مغناطیسی خارجی (و یا با یک نگاه حدی میدان شدت مغناطیسی خارجی به سمت صفر) این میدان مؤثر خود را به صورت حافظه مغناطیسی (مغناطش  $\langle \mathbf{M} \rangle$ ) در سیستم نشان می دهد. در واقع میدان مولکولی مؤثر  $\mathbf{B}_{mf}$  می تواند به طور غیرمستقیم با میدان خارجی متناسب باشد زیرا متوسط مغناطش  $\langle \mathbf{M} \rangle$  متأثر از میدان مغناطیسی خارجی  $\mathbf{B}_{ext}$  می باشد هر چند که در محاسبات پذیرفتار مغناطیسی مجموعه، در حد  $\mathbf{B}_{ext}$  صفر می باشد.

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_{ext} + \mathbf{B}_{mf} \quad \mathbf{B}_{mf} = I \langle \mathbf{M}_z \rangle \quad (46-3)$$

I یک کمیت ثابت که بیانگر قدرت میدان مؤثر مولکولی برحسب مغناطش مجموعه می باشد. با قرار دادن رابطه ی (46-3) در رابطه ی (43-3)، رابطه ی زیر به دست می آید:

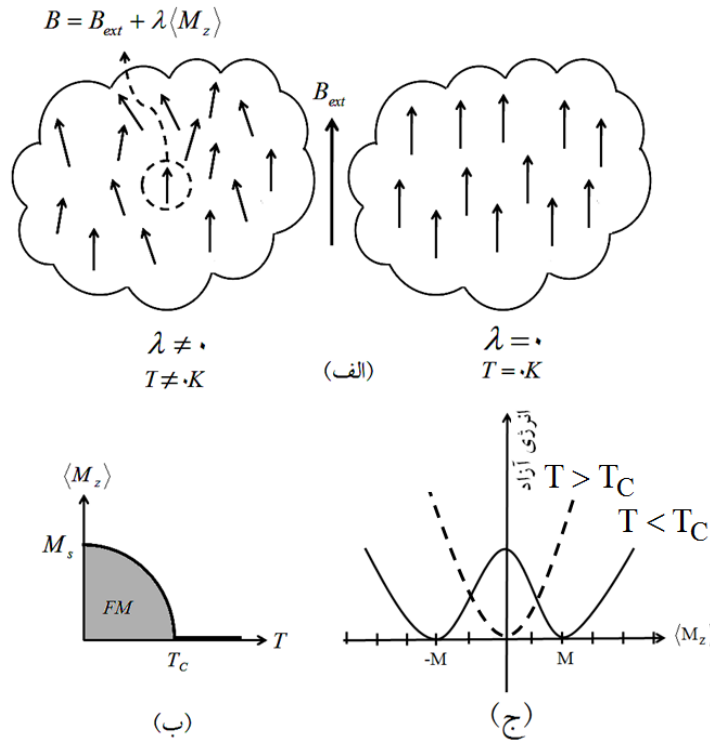
$$\langle \mathbf{M}_z \rangle = \lim_{H_{ext} \rightarrow 0} M_s \frac{\partial}{\partial H_{ext}} \left( \frac{\langle \mathbf{B}_{ext} + I \langle \mathbf{M}_z \rangle \rangle}{k_B T} \right) \quad (47-3)$$



شکل 3-14. ترسیم عبارات (48-3) و (49-3) به طور جداگانه و پیدا نمودن نقاط تلاقی به ازای دماهای مختلف، پاسخ سیستم را نتیجه می دهد.

۱. Weiss field  
۲. mean field

با توجه به عبارت حدی رابطه‌ی (3-47) (در حد شدت میدان مغناطیسی خارجی صفر  $\mathbf{H}_{ext} \rightarrow 0$ )، میدان مغناطیسی در هر نقطه‌ای از محیط تنها ناشی از میدان مغناطیسی مولکولی  $\mathbf{B}_{mf}$  می‌باشد. با استفاده از رابطه‌ی (3-41) متوسط مغناطش سیستم برابر خواهد بود با:



شکل 3-15. الف) طرحواره‌ای که نشان دهنده‌ی دو وضعیت می‌باشد: 1) اثرات برهم‌کنشی و حرارتی  $(T \neq 0, \lambda \neq 0)$  بدون برهم‌کنشی  $\lambda = 0$  در دمای مطلق  $T = 0$  (ب) اثرات دمایی بر مغناطش یک مجموعه‌ی مغناطیسی. ج) انرژی آزاد هلمولتز برای یک سیستم مغناطیسی در دمای پایین‌تر از دمای بحرانی و به‌ازای دمای بالاتر از دمای بحرانی.

$$\langle \mathbf{M}_z \rangle = \lim_{\mathbf{H}_{ext} \rightarrow 0} \frac{\partial \langle \mathbf{M}_z \rangle}{\partial \mathbf{H}_{ext}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{H}_{ext}} \left( \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \mathbf{M}_z \rangle} \right) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{H}_{ext}} \left( \frac{\partial}{\partial \langle \mathbf{M}_z \rangle} \left( -k_B T \ln Z \right) \right) \quad (48-3)$$

در رابطه‌ی (3-48)  $y = \lambda m \langle M_z \rangle / k_B T$  که با استفاده از آن می‌توان رابطه‌ی خطی دیگری از مغناطش  $\langle \mathbf{M}_z \rangle$  نسبت به متغیر  $y$  به‌دست آورد (رابطه‌ی (3-49)).

$$\langle M_z \rangle = \frac{k_B T}{l m} y \quad (49-3)$$

با در نظر گرفتن عبارت‌های (48-3) و (49-3) در حد میدان‌های خارجی صفر و با استفاده از روش ترسیم به حل مسئله می‌پردازیم. با ترسیم هر دوی این عبارت‌ها در یک نمودار برحسب  $y$ ، نقاط تلاقی آن‌ها می‌تواند پاسخ‌های مسئله باشند. با توجه به وابستگی دمایی هر دو عبارت‌های (48-3) و (49-3) و ترسیم جداگانه آن‌ها می‌توان دمای بحرانی  $T_c$  را مشخص نمود. به‌ازای دماهای بالاتر و یا کوچکتر از دمای بحرانی، مجموعه رفتار مغناطیسی و غیرمغناطیسی به خود می‌گیرد. در محدوده دمایی  $T < T_c$  تلاقی نمودارها در یک نقطه است و فقط می‌تواند یک پاسخ داشته باشد ( $M=0$ ) که در این شرایط مجموعه کاملاً غیر مغناطیسی است. به‌ازای  $T < T_c$ ، تلاقی نمودارها در سه نقطه می‌باشند که پاسخی مغناطیسی در بردارد  $M \neq 0$  (شکل (3-14)). با استفاده از انرژی آزاد هلمهولتز<sup>1</sup> و نظریه پدیده شناختی لاندائو می‌توان به سادگی نشان داد که سیستم دارای دو مینیمم پایدار با مغناطش  $\pm M$  و یک ماکزیمم ناپایدار با مغناطش صفر می‌باشد (شکل (3-15) ح). وابستگی دمایی مغناطش نکته‌ای است که بایستی به آن توجه نمود. در دماهای بالا به علت افزایش درهم‌ریختگی گشتاورهای مغناطیسی هر اتم، انتظار می‌رود که مغناطش  $M$  کاهش و به سمت صفر میل نماید.

با توجه به عبارت  $y = l m \langle M_z \rangle / k_B T$  و بسط عبارت لانتزون  $\mathcal{F}(y)$  در دماهای بالا  $T \gg T_c$  و یا به عبارتی به‌ازای  $y$ ‌های بسیار کوچک ( $y/3 \ll \mathcal{F}(y)$ )، گشتاورهای مغناطیسی مجموعه برابر است با:

$$\langle M_z \rangle = \frac{\mu_B N}{V} \frac{1}{3} \frac{\langle M_z \rangle}{k_B T} \quad (50-3)$$

$$T_c = \frac{\mu_B N}{V} \frac{1}{3} \frac{m^2}{3 k_B} = M_s \frac{l m}{3 k_B}$$

بنابراین با توجه به شکل (3-15) به ازای  $T < T_c$  مجموعه کاملاً غیر مغناطیسی و به‌ازای  $T > T_c$  مجموعه یک فرومغناطیس FM است. همچنین رابطه‌ی (3-50) نشان

1. Helmholtz Free Energy

می‌دهد که دمای کوری به قدرت برهم‌کنشی بین اتم‌های مغناطیسی  $I$  رابطه‌ی مستقیم دارد که هرچه  $I$  بزرگ باشد مجموعه از لحاظ پایداری مغناطیسی پایدارتر خواهد بود که می‌توان به عنوان حافظه مغناطیسی از آن استفاده نمود<sup>1</sup>. پذیرفتاری مغناطیسی سیستم با برهم‌کنش، با استفاده از رابطه‌ی (3-47) به صورت رابطه‌ی (3-51) می‌باشد.

$$c_m = \lim_{H_{ext} \rightarrow 0} \frac{M_s I \left( \frac{mB}{k_B T} \right)}{H_{ext}} = \lim_{H_{ext} \rightarrow 0} \frac{M_s m_b \left( \frac{m(B_{ext} + I \langle M_z \rangle)}{3k_B T} \right)}{B_{ext}} \quad (51-3)$$

به‌ازای دماهای بالاتر از دمای کوری یا به عبارتی  $x$  بسیار کوچک ( $x = mB/k_B T$ )، عبارت لانژون برابر خواهد شد با:  $\langle x \rangle = x/3$ . در این محدوده‌ی دمایی رابطه‌ی (3-51) به رابطه‌ی (3-52) تبدیل می‌گردد.

$$c_m = \lim_{H_{ext} \rightarrow 0} M_s m_b \frac{\partial \langle M_z \rangle}{\partial B_{ext}} \quad (52-3)$$

$$= M_s m_b \left( \frac{m}{3k_B T} \right) + M_s m_b m \frac{1}{3k_B T} \lim_{H_{ext} \rightarrow 0} \frac{\partial \langle M_z \rangle}{\partial B_{ext}} \quad (53-3)$$

$$= M_s m_b \left( \frac{m}{3k_B T} \right) + M_s m \frac{1}{3k_B T} \lim_{H_{ext} \rightarrow 0} \frac{\partial \langle M_z \rangle}{\partial H_{ext}} \quad (54-3)$$

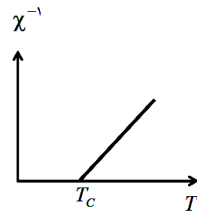
با استفاده از تعاریف عبارت کوری  $C$  و دمای کوری  $T_c$  به صورت زیر:

$$T_c = \frac{m N I}{3k_B} = M_s \frac{I m}{3k_B} \quad C = \frac{m N \mu_0}{3k_B} = M_s m_b \frac{m}{3k_B} \quad (55-3)$$

که در این جا  $M_s = N m$  مغناطش اشباع می‌باشد و تابع پاسخ سیستم به‌ازای  $T > T_c$  برابر خواهد بود با:

$$c_m = \frac{C}{T} + T_c \frac{c_m}{T} \quad \text{پ} \quad c_m = \frac{C}{T - T_c} \quad (56-3)$$

1. دارای پسماند مغناطیسی هستند.



شکل 3-16. نمودار عکس تابع پاسخ سیستم  $c_m^{-1}$  در مدل کوری- وایس به ازای  $T > T_C$ .

### 3-2-2 نگاه کوانتومی به پارامغناطیسی سیستم

گشتاور مغناطیسی یک اتم در فضای تهی از میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی، با رابطه‌ی (3-57) داده می‌شود.

$$\vec{\mu} = -g_L m_B \frac{\vec{J}}{\hbar} \quad (3-57)$$

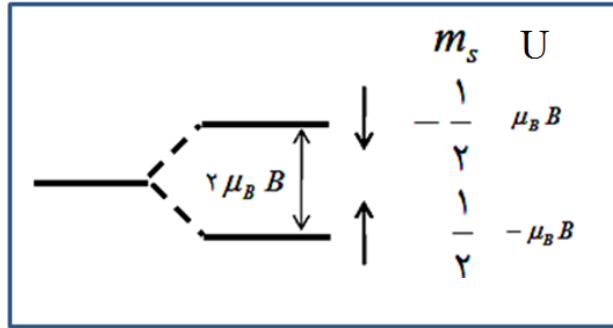
اندازه حرکت زاویه‌ای کل هر اتم  $\vec{J}$  برابر با حاصل جمع اندازه حرکت مداری  $\vec{L} = \sum_i \hbar \vec{L}_i$  و اسپینی  $\vec{S} = \sum_i \hbar \vec{S}_i$  است. به‌ازای هر عدد کوانتومی  $J$  تعداد تبهگنی مجموعه برابر با  $2J+1$  می‌باشد ( $J, J+1, \dots, -J, -J-1$ ) که در حضور میدان مغناطیسی خارجی تبهگنی رفع می‌شود و ترازهای تبهگن به ترازهای انرژی غیرتبهگن با فاصله‌های انرژی یکسانی از یکدیگر تبدیل می‌گردد (اثر زیمن).

در رابطه‌ی (3-57)  $m_B$  مگنتون بور در سیستم SI به صورت  $m_B = e\hbar/2m_e$  تعریف می‌گردد. ضریب  $g_L$  یا ضریب شکافتگی طیف‌نمایی با عبارت لاند<sup>1</sup> مشخص می‌شود. این ضریب شکافتگی برای اسپین  $1/2$  الکترون برابر با  $g_{1/2} = 2/0023$  می‌باشد.<sup>2</sup>

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (3-58)$$

۱. Landé

2. پیوست (3-3).



شکل 3-17. شکافتگی تراز اسپینی در حضور میدان.

• پذیرفتاری یک مجموعه‌ی اتمی با اندازه حرکت زاویه‌ای کل  $J = \frac{1}{2}$  ساده‌ترین حالت کاملاً کوانتومی، حالتی بدون اندازه حرکت مداری می‌باشد ( $L = 0$ ) که صرفاً حالت اسپینی است  $\vec{J} = \vec{S}$ . با استفاده از قطبش مغناطیسی اسپین  $\frac{1}{2}$  الکترون فقط می‌تواند دو حالت اسپینی در راستای میدان  $\vec{B} = B\hat{k}$  به خود بگیرد ( $m_s = \pm 1/2$ ). انرژی این دو حالت اسپین در حضور میدان برابر است با  $U = -g_s m_B m_s B$  که در این جا با قرار دادن  $m_s = \pm \frac{1}{2}$  و  $g_{1/2} = 2.0023$  (که معمولاً  $g = 2$  در نظر گرفته می‌شود) مقادیر انرژی به صورت  $U_{\pm} = \mp m_B B$  نتیجه می‌دهد. یک مجموعه  $N$  اتمی با اسپین  $S = \frac{1}{2}$  برای هر اتم در حضور میدان  $B$  که با یک حمام گرمایی در تعادل گرمایی می‌باشد را در نظر بگیرید. این شرایط باعث می‌شود که  $N_{\pm}$  اتم مجموعه دارای قطبش مغناطیسی بالا  $m_{\pm} = m_B$  (با انرژی  $U_{\pm} = -m_B B$ ) و  $N_{-}$  اتم آن دارای قطبش مغناطیسی پایین  $m_{\pm} = -m_B$  (با انرژی  $U_{-} = m_B B$ ) در سیستم ایجاد گردد. با توجه به هنگرد کانونیکی و فراوانی هر یک از حالت‌ها ( $N_{+}$  و  $N_{-}$ )، می‌توان احتمال آن‌ها ( $P_{+}$  و  $P_{-}$ ) را به دست آورد.



$$P_+ = \frac{N_+}{N} = \frac{e^{\frac{m_B B}{k_B T}}}{e^{\frac{m_B B}{k_B T}} + e^{-\frac{m_B B}{k_B T}}} \quad \text{و} \quad P_- = \frac{N_-}{N} = \frac{e^{-\frac{m_B B}{k_B T}}}{e^{\frac{m_B B}{k_B T}} + e^{-\frac{m_B B}{k_B T}}}$$

برای محاسبه مغناطش چنین سیستمی متوسط گشتاور مغناطیسی مجموعه در راستای میدان B برابر با  $\langle M_z \rangle = N_+ m_B + N_- (-m_B)$  خواهد بود.

$$\langle M_z \rangle = m_B (N_+ - N_-) = N m_B \frac{e^{\frac{m_B B}{k_B T}} - e^{-\frac{m_B B}{k_B T}}}{e^{\frac{m_B B}{k_B T}} + e^{-\frac{m_B B}{k_B T}}}$$

$$\langle M_z \rangle = m_B (N_+ - N_-) = N m_B \tanh\left(\frac{m_B B}{k_B T}\right)$$

$$\frac{\langle M_z \rangle}{M_s} = \tanh\left(\frac{m_B B}{k_B T}\right) \quad (59-3)$$

که در آن  $M_s = N m_B$  مغناطش اشباع می‌باشد<sup>1</sup>.

رفتار عبارت (59-3) به مانند شکل (3-13) می‌باشد. با بسط  $\tanh(x)$  در عبارت (59-3) برای  $x \ll 1$  (که معادل با دماهای بالا در یک میدان ثابت است) رفتار خطی نسبت به کمیت  $x = m_B B / k_B T$  به خود می‌گیرد.

$$\langle M_z \rangle = M_s \tanh(m_B B / k_B T) \approx m_B^2 B / k_B T = m_B x$$

و با توجه به تعریف پذیرفتار مغناطیسی در دماهای بالا خواهیم داشت.

$$C = \lim_{H_{ext} \rightarrow 0} \frac{\langle M_z \rangle}{H_{ext}} = \frac{n m_B m_B^2}{k_B T} = \frac{C}{T} \quad (60-3)$$

بنابراین عبارت (60-3) پذیرفتار مغناطیسی کوانتومی یک مجموعه دو حالتی  $S = \frac{1}{2}$  می‌باشد (شکل (3-17)).

در این جا قصد داریم با رویکرد تابع پارش که از مکانیک آماری به یاد داریم به محاسبه مغناطش و پذیرفتاری مغناطیسی، پردازیم.

1. به معنی این است که تمامی قطبش‌ها در جهت میدان مغناطیسی واقع می‌گردند.

طبق تعریف تابع پارش به صورت  $Z = \sum_E e^{-E/k_B T}$  (برای یک هنگرد کانونیک)، می توان کلیه عبارت های ترمودینامیکی مجموعه را نتیجه گرفت.<sup>2</sup> از جمله کمیت مهم ترمودینامیکی که از تابع پارش می توان نتیجه گرفت، انرژی آزاد هلمهولتز<sup>3</sup> می باشد که رابطه ی آن با تابع پارش  $Z$  به صورت زیر است.

$$F = -k_B T \ln(Z) \quad (61-3)$$

نشان خواهیم داد با استفاده از انرژی هلمولتز (61-3) می توان مغناطش و پذیرفتاری مغناطیسی مجموعه را محاسبه نمود. ابتداء برای آشنایی با این رویکرد از محاسبه مغناطش یک سیستم دو حالته  $J=1/2$  آغاز می کنیم و سپس کلی ترین حالت به ازای هر مقدار از  $J$  تعمیم خواهیم داد.

تابع پارش یک سیستم تک الکترونی دو حالته با اندازه حرکت زاویه ای کل  $J=1/2$  با دو انرژی غیر تبهگن  $E_{\pm} = \pm m_B B$  در حضور میدان  $\vec{B}$  برابر است با:

$$Z = e^{\frac{m_B B}{k_B T}} + e^{-\frac{m_B B}{k_B T}} = 2 \cosh\left(\frac{m_B B}{k_B T}\right) \quad (62-3)$$

تابع پارش برای یک گاز  $n$  الکترونی بر واحد حجم بدون برهم کنش برابر با  $Z = z^n$  است. با استفاده از رابطه های (61-3) و (62-3) انرژی آزاد هلمولتز یک چنین مجموعه ای بر واحد حجم برابر است با:

$$F = -k_B T \ln(Z^n) = -n k_B T \ln(z) \\ F = -n k_B T \ln\left[2 \cosh\left(\frac{m_B B}{k_B T}\right)\right] \quad (63-3)$$

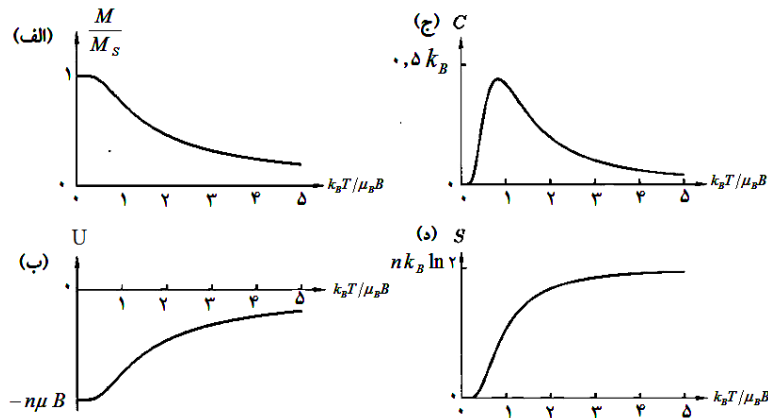
پارامتر ترمودینامیکی مغناطش  $M$  چنین سیستمی را می توان با مشتق گرفتن از انرژی آزاد هلمولتز نسبت به میدان  $B$  در دمای ثابت به دست آورد  $M = -\left(\frac{\partial F}{\partial B}\right)_T$ .

1. در تابع پارش عبارت جمع بر روی تمامی حالت های انرژی مجموعه است.  
2. برای آگاهی بیشتر می توان به کتاب های مکانیک آماری مراجعه نمود.

$$M = n m_B \frac{\int \hat{u} \tanh\left(\frac{m_B B}{k_B T}\right) \hat{u}}{\int \hat{u}} \quad (64-3)$$

بسط عبارت داخل کروشه (64-3) به ازای دماهای بسیار بالا  $m_B B \ll k_B T$  (و یا میدان‌های بسیار ضعیف)، به رابطه‌ی  $M \approx n \frac{m_B^2 B}{k_B T}$  خواهیم رسید. با مشتق‌گیری دوباره از  $M$  نسبت به شدت میدان مغناطیسی  $H$  پذیرفتاری آن متناسب با عکس دما خواهد شد  $\frac{C}{T} = n \frac{m_B^2 m_B}{k_B T} = C$ . نتیجه به دست آمده از طریق تابع پارش با رابطه‌ی (3-60) برابری می‌کند.

آنتروپی یکی دیگر از کمیت‌های مهم ترمودینامیکی است که با در اختیار داشتن انرژی آزاد هلمولتز می‌توان آن را نیز محاسبه نمود  $S = -(\partial F / \partial T)_B$ . با رسم کمیت‌های ترمودینامیکی (مانند مغناطش، ظرفیت گرمایی، انرژی و آنتروپی) برحسب  $k_B T / m_B B$  (شکل (3-18)) اطلاعات جالب و مفیدی از سیستم را در اختیار می‌گذارند. در دماهای بسیار پایین تمام اسپین الکترون‌ها هم‌سو با میدان مغناطیسی  $\vec{B}$  شده و در دماهای بسیار بالا، افزایش بی‌نظمی اسپینی را باعث می‌شود و مغناطش سیستم را از مغناطش اشباع  $M_s = N m_B$  دور و به سمت صفر میل نماید. بنابه تعریف ظرفیت گرمایی سیستم (مشتق انرژی  $U$  نسبت به دما  $C = -(\partial U / \partial T)$ ) و ترسیم آن نسبت به عبارت بدون بعد  $k_B T / m_B B$  نشان می‌دهد که در دماهایی که عبارت  $k_B T / m_B B$  برابر یک شود، ظرفیت گرمایی دارای یک حداکثری است که به آن ناهنجاری شاتکی گفته می‌شود.



شکل 3-18. الف) مغناطش ب) انرژی ج) ظرفیت گرمایی و د) آنتروپی بر حسب کمیت بی بعد  $k_B T / m_B B$  برای یک مجموعه  $n$  ذره‌ای در واحد حجم بدون برهم‌کنش و با اسپین  $1/2$  رسم شده است.

• محاسبه پذیرفتاری یک مجموعه‌ی اتمی با اندازه حرکت زاویه‌ای کل  $\mathbf{J}$  .  
 حال وقت آن رسیده تا مغناطش سیستم را به‌ازای هر مقداری از اندازه حرکت زاویه‌ای کل  $J = 1/2, 1, 3/2, \dots$  با تعداد  $2J + 1$  تبهگن به‌دست آوریم که با حضور میدان مغناطیسی این تبهگنی رفع می‌گردد. فرض براین است این مجموعه‌ی اتمی با یک‌دیگر برهم‌کنش ندارند و فقط با میدان مغناطیسی خارجی برهم‌کنش دارند.  
 برای محاسبه مؤلفه‌ی مغناطش متوسط مجموعه کل در راستای میدان مغناطیسی  $\mathbf{B} = B \hat{k}$  برابر با  $\langle M_z \rangle = n g_J m_B \langle m_J \rangle$  می‌باشد که ضریب  $g_J$  از معادله لاندر نتیجه می‌دهد. ابتدا بایستی متوسط مؤلفه‌ی قطبش هر یک از اتم‌ها  $\langle m_J \rangle$  در راستای میدان مغناطیسی  $\mathbf{B} = B \hat{k}$  را با استفاده از تابع توزیع بولتزمن  $e^{-U_{m_J}/k_B T}$  با انرژی‌های  $U_{m_J} = -m_J g_J m_B B$  (به‌ازای  $J \leq m_J \leq J$ ) به‌دست آورد.

$$\langle m_J \rangle = \frac{\sum_{m_J=-J}^J m_J \exp(m_J g_J m_B B / k_B T)}{\sum_{m_J=-J}^J \exp(m_J g_J m_B B / k_B T)} \quad (65-3)$$

با یک تغییر متغیر  $x = g_J m_B B / k_B T$  عبارت (65-3) به صورت رابطه‌ی (66-3) بازنویسی می‌شود.

$$\langle m_J \rangle = \frac{\sum_{m_J=-J}^J m_J \exp(m_J x)}{\sum_{m_J=-J}^J \exp(m_J x)} \quad (66-3)$$

از طرفی، تابع پاراش چنین سیستمی به‌ازای انرژی‌های  $U_{m_J}$  به صورت رابطه‌ی (67-3) نوشته می‌شود.

---

1. J دارای مقادیری صحیح و نیم فرد می‌باشد.

$$z = \sum_{m_j} \exp(-U_{m_j}/k_B T) = \sum_{m_j=-J}^J \exp(m_j g_J m_B B/k_B T) \quad (67-3)$$

رابطه‌ی (66-3) را با استفاده از تابع پارش (67-3)، می‌توان برحسب تابع پارش به صورت زیر باز نویسی نمود.

$$\langle m_j \rangle = \frac{\sum_{m_j=-J}^J m_j \exp(m_j x)}{\sum_{m_j=-J}^J \exp(m_j x)} = \frac{1}{z} \frac{\sum z}{\sum x} \quad (68-3)$$

که در این جا  $z = \sum_{m_j=-J}^J \exp(m_j x)$  می‌باشد. با استفاده از رابطه‌ی (68-3) و مغناطش متوسط کل مجموعه  $\langle M \rangle = n g_J m_B \langle m_j \rangle$ :

$$\langle M \rangle = n g_J m_B \langle m_j \rangle = n g_J m_B \frac{1}{z} \frac{\sum z}{\sum x} \quad (69-3)$$

$$\langle M \rangle = \frac{n g_J m_B}{z} \frac{\sum z \sum B}{\sum x} = \frac{n k_B T}{z} \frac{\sum z}{\sum B} \quad (70-3)$$

برای محاسبه رابطه‌ی (70-3)، ابتدا تابع پارش  $z$  (رابطه‌ی (67-3)) را محاسبه می‌نماییم. برای ساده‌سازی رابطه‌ی (67-3)، تغییر متغیرهایی مانند  $a = e^{-Jx}$  و  $r = e^x$  را به کار برده و تابع پارش را به یک تصاعد هندسی با قدر نسبت  $r$  که تعداد جملات آن  $N = 2J + 1$  می‌باشد، تبدیل می‌شود (عبارت (71-3)).

$$z = a + ar + ar^2 + ar^3 + \dots + ar^{N-1} = \sum_{j=1}^N ar^{j-1} = \frac{a(1-r^N)}{1-r} \quad (71-3)$$

عبارت (71-3) از جمع عبارت سری هندسی به دست آمده است. حال با قرار دادن عبارت‌های  $a = e^{-Jx}$  و  $r = e^x$  در رابطه‌ی (71-3) و استفاده از عبارت  $\sinh(q) = (e^q - e^{-q})/2$  تابع پارش به صورت زیر حاصل می‌شود.

$$z = \frac{\sinh[(2J+1)x/2]}{\sinh[x/2]} \quad (72-3)$$

با قرار دادن عبارت (72-3) در رابطه‌ی (70-3) و کمی بازی ریاضی و به کار بردن تغییر متغیر  $y = xJ = g_J \mu_B JB / k_B T$ ، متوسط مغناطش کل مجموعه به صورت زیر داده می‌شود.

$$\langle M \rangle = M_s \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J} y\right) - \frac{1}{2J} \coth\left(\frac{1}{2J} y\right) \quad (73-3)$$

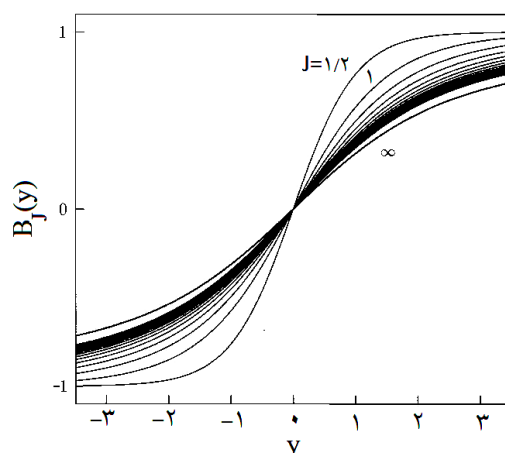
در رابطه‌ی (73-3) از رابطه‌ی مثلثاتی  $\coth(q) = \frac{e^q + e^{-q}}{e^q - e^{-q}}$  و مغناطش اشباع مجموعه  $M_s = ng_J \mu_B J$  استفاده شده است.

با استفاده از تعریف تابع بریلوئن<sup>1</sup>  $B_J(y)$  به صورت زیر:

$$B_J(y) = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J} y\right) - \frac{1}{2J} \coth\left(\frac{1}{2J} y\right) \quad (74-3)$$

می‌توان عبارت متوسط مغناطش کل مجموعه را بر حسب توابع تابع بریلوئن نوشت (75-3).

$$\langle M \rangle = M_s B_J(y) \quad (75-3)$$



شکل 3-19. نمایش تابع بریلوئن برای لهای از مقدار 1/2 تا بی‌نهایت.

<sup>1</sup> Brillouin function

**نکته 3-10:** رابطه‌ی (75-3) را نیز می‌توان از طریق معادله انرژی آزاد هلمولتز (رابطه‌ی (61-3)) نیز به دست آورد. برای این کار از تابع پارش به دست آمده (72-3) استفاده می‌کنیم. به سادگی انرژی آزاد هلمولتز محاسبه می‌گردد. با بکار بردن رابطه‌ی ترمودینامیکی  $\langle M \rangle = -(\partial F / \partial B)_T$ ، مغناطش متوسط کل مجموعه (75-3) نتیجه می‌شود.

تابع بریلوئن  $B_J(y)$  در حد کلاسیکی ( $J = \infty$ ) به تابع لانژون  $\mathcal{L}(x)$  تبدیل می‌گردد و نیز با قرار دادن  $J = 1/2$  در رابطه‌ی (74-3)  $(B_{1/2}(y) = \tanh(y))$  همان نتیجه‌ای را می‌دهد که قبلاً به طور جداگانه برای یک سیستم دو حالتی اسپین  $S = 1/2$  (بالا و پایین) به آن پرداخته شد. بنابراین با در نظر گرفتن  $J = 1/2$  و  $g_J \gg 2$  در یک میدان خارجی  $B = 1T$ ، مقدار  $y$  تقریباً در دمای اتاق برابر با  $2 \times 10^3$  می‌باشد که مقداری کوچک است.

به ازای  $y \ll 1$  می‌توان تابع بریلوئن (رابطه‌ی (74-3)) را به صورت زیر بسط داد.

$$B_J(y) = \frac{J+1}{3J} y + O(y^3) \quad (76-3)$$

با استفاده از تعریف پذیرفتاری مغناطیسی و رابطه‌های (75-3) و (76-3) در حد  $y \ll 1$ ، رابطه کوری به دست می‌آید (77-3).

$$\begin{aligned} \langle M \rangle &= M_s B_J(y) \\ c &= \lim_{H \rightarrow 0} \frac{M}{H} \gg \lim_{B \rightarrow 0} \frac{m_b M}{B} \\ c &= \frac{m_b n g_J^2 m_B^2 J(J+1)}{3 k_B T} = \frac{n m_b m_{\text{eff}}^2}{3 k_B T} = \frac{C}{T} \end{aligned} \quad (77-3)$$

در عبارت بالا  $m_{\text{eff}}$  برابر با  $g_J m_B \sqrt{J(J+1)}$  می‌باشد که نسبت آن با مگنتون بور  $(p = m_{\text{eff}}/m_B)$  تعداد مؤثر مگنتون‌های بور را می‌دهد.

در عبارت کوری به دست آمده هیچ گونه اثرات برهم‌کنشی بین دو قطبی‌های مغناطیسی ماده در نظر گرفته نشده است. به مانند قبل، با در نظر گرفتن اثرات برهم‌کنشی ما بین این دو قطبی‌ها با تقریب میدان‌های متوسط، یک نظم مغناطیسی یا حافظه مغناطیسی به سیستم تحمیل می‌کند. این اثر باعث می‌گردد تا قانون کوری به

قانون کوری-وایس<sup>1</sup> تصحیح یابد (رابطه‌ی (3-56)).

### 3-3-3 قانون هوند

آخرین پوسته الکترونی اشغالی هر اتم، پُر یا قسمتی پُر است. آن دسته از اتم‌ها که آخرین پوسته الکترونی شان پُر هستند اندازه حرکت زاویه‌ای کل آن‌ها برابر صفر می‌باشند.<sup>2</sup> یک پوسته الکترونی قسمتی پُر می‌تواند اسپین و اندازه حرکت مداری غیر صفری داشته باشد. برای مثال یک اتم دو الکترونی با اسپین  $\frac{1}{2}$ ، می‌تواند یک مجموعه اسپینی 1 را تشکیل دهند. برای یک اتم با اسپین S و اندازه حرکت مداری L، تعداد پیکربندی که می‌تواند داشته باشد برابر با  $(2L+1)(2S+1)$  است. این پیکربندهای مختلف<sup>3</sup> مجموعه اندازه حرکت زاویه‌ای کل متفاوتی را نتیجه می‌دهد که حاصل آن باعث تفاوت در انرژی خواهد شد. این تفاوت انرژی چگونه رخ می‌دهد؟ در ادامه نشان خواهیم داد، این تفاوت انرژی از تفاوت در تابع موج الکترون با پیکربندی‌های متفاوت ناشی می‌شود که خود به دلیل تفاوت در اندازه حرکت مداری سیستم و اصل طرد پائولی است. الکترون‌ها برای کاهش دافعه الکترونی و به حداقل رساندن انرژی مجموعه بایستی پیکربندی اسپینی و اندازه حرکت مداری خاصی را به خود بگیرند که به قاعده‌ی هوند معروف می‌باشد. همان‌طور که از مکانیک کوانتومی به یاد داریم حضور دو الکترون در یک حالت کوانتومی یکسان امکان پذیر نمی‌باشد<sup>4</sup> مگر این‌که اسپین‌هایشان پاد موازی باشند. با پادموازی شدن اسپین این دو الکترون، سبب می‌شود تا آن‌ها بتوانند به یکدیگر نزدیک شوند که افزایش دافعه الکترونی و افزایش انرژی سیستم را سبب می‌شود. از آنجا که طبیعت به کاهش انرژی تمایل دارد، با همسو شدن اسپین‌های دو الکترون، جدایی فضایی حداکثری که طبق اصل طرد پائولی برای آن‌ها به وجود می‌آورد، کاهش دافعه کولنی را در پی خواهد داشت. در این حالت، انرژی مجموعه کاهش و اسپین مجموعه (یا هم‌سو شدن اسپین الکترون‌ها) افزایش می‌یابد (قاعده اول هوند). مرحله بعد با توجه به برقراری قاعده‌ی اول هوند، تابع موج مجموع طوری است که اندازه حرکت مداری مجموعه حداکثر مقدار خود را داراست که باعث

1. Curie-Weiss

2. این اتم‌ها خاصیت مغناطیسی از خود نشان نمی‌دهد و گشتاور مغناطیسی آن‌ها طبق رابطه (2-4) صفر می‌باشند.

3. ترکیبی از اندازه حرکت مداری L و اسپینی S برای یک پوسته الکترونی که کاملاً پُر نمی‌باشند.

4. اصل طرد پائولی: هیچ دو فرمیونی نمی‌تواند در یک حالت کوانتومی یکسان قرار گیرد.



کاهش انرژی و افزایش مؤلفه اندازه حرکت مداری  $L$  در راستای میدان  $B$  می‌شود. دلیل آن را می‌توان چنین متصور شد که در این حالت الکترون‌ها در مدارهای‌شان دارای حرکت مداری هم‌سویی هستند که به طور مؤثر باعث دور نگاه داشتن آن‌ها از یکدیگر شده<sup>1</sup> و کاهش دافعه الکترونی را حادث می‌شود (قاعدۀ دوم هوند). حال اگر آخرین پوسته الکترونی کم‌تر از نصف پُر باشد، با در نظر گرفتن قاعدۀ اول و دوم هوند و با توجه به کمینه سازی برهم‌کنش اسپین مدار<sup>2</sup>، مقدار اندازه حرکت زاویه‌ای کل سیستم  $J$  برابر است با  $|L - S|$  (کمینه آن زمانی است که  $\vec{L}$  و  $\vec{S}$  در خلاف جهت یکدیگر باشند) و اگر آخرین پوسته الکترونی، بیش از نصف پُر باشند (کمینه انرژی زمانی صورت می‌پذیرد هر دو  $\vec{L}$ ،  $\vec{S}$  هم جهت باشند) برابر با  $|L + S|$  (قاعدۀ سوم هوند). است (پیوست 2-3).

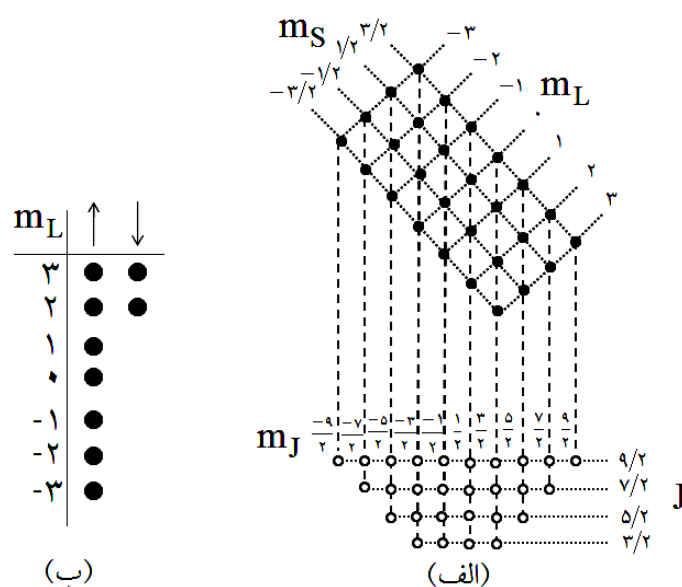
جدول 3-1. نمادهای قراردادی برای نمایش مقادیر متفاوت  $L$ .

$L$	۰	۱	۲	۳	۴	۵	۶
	S	P	D	F	G	H	I

مثال: برای یک سیستم با اندازه حرکت زاویه‌ای  $L = 3$  و اسپین  $S = 3/2$ ، تعداد ترکیبات مجموعه برابر است با  $(2L+1)(2S+1) = 28$ . حال اگر از طریق اندازه حرکت زاویه‌ای کل  $J$  به آن نگاه شود تعداد حالت ممکن به‌ازای  $L$  و  $S$  مشخص شده برای  $J$  برابر با  $|L - S| < J < |L + S|$  می‌باشد که به‌ازای هر  $J$ ی تعداد حالت‌های ممکنه برای مؤلفه‌ی اندازه حرکت زاویه‌ای کل  $J_z$ ، برابر با  $2J + 1$  است. با جمع روی کلیه حالت‌ها به صورت  $\sum_{|L-S|}^{|L+S|} 2J + 1 = 28$  که معادل است با  $(2L+1)(2S+1) = 28$  که تساوی مورد نظر به اثبات می‌رسد (شکل (20-3)). ترکیب اندازه حرکت مداری  $L = 3$  و اسپین  $S = 3/2$  مقادیری را برای  $J$  نسبت می‌دهد که عبارت هستند از:  $J = 3/2, 9/2$ ، بنابراین با توجه به

1. اگر دو الکترون با اسپین‌های غیرهمسان (بالا و پایین) در جهت‌های غیرهمسو حرکت کنند، احتمال نزدیک شدن آن‌ها به یکدیگر را می‌افزاید که آن باعث افزایش دافعه الکترونی مجموعه می‌شود.  
2. که متناسب با  $|\vec{L} \times \vec{S}|$  است. نشان داده می‌شود برای حالتی که آخرین اربیتال از نیمه کمتر پر باشد،  $a > 0$ ، و برای حالتی که از نیمه بیشتر پر باشد،  $a < 0$  و برای حالتی که کاملاً نیمه‌پر باشد عبارت  $(\vec{L} \times \vec{S})$  برابر صفر خواهد شد پیوست (2-3).

تعداد حالات مجاز بالا، سیستم حالتی از آن را می‌پذیرد که با قواعد هوند مطابقت داشته باشد. در ادامه برای نماد نویسی از نماد قراردادی نشان داده شده در جدول (1-3) استفاده می‌کنیم.



شکل 3-20. الف) نمایش تصویری از دو اندیس‌گذاری متفاوت ( $m_S, m_L$ ) و  $(m_J, J)$  برای بیان حالت سیستم به ازای  $L=3$  و  $S=3/2$  ب) نمایش مؤلفه‌ی اندازه حرکت مداری در راستای Z برای حالت پایه  $Dy^{3+}$ . جمع اندازه حرکت مداری در ستون اول صفر است  $m_l = 0$  و طبق قانون دوم هوند پُرشدگی بایستی طوری باشد که اندازه حرکت مداری بزرگ‌تری را برای سیستم نتیجه دهد. بر این اساس ستون دوم پُر می‌شود.

با استفاده از قواعد هوند برای مجموعه‌ای با اندازه حرکت مداری  $L$  و اسپین  $S$ ، سیستم  $L$  ای را به خود می‌گیرد که حالت پایه اتم را مشخص می‌کند و آن را با نماد  $^{2S+1}L_J$  معرفی می‌شود. به عنوان یک مثال، یک یون خاکی کمیاب  $Dy^{3+}$  را در نظر بگیرید. بیرونی‌ترین پوسته آن به صورت  $4f^9$  است. با توجه به جدول (3-3)، الکترون‌های  $f$  دارای اندازه حرکت مداری  $l=3$  می‌باشند از این رو تعداد حالات ممکن

(یا تعداد اربیتال‌ها) برابر با  $2l+1=7$  است. اربیتال  $l=3$ ، حداکثر 14 الکترون که 7 تایی آن با اسپین بالا و 7 تایی دیگر آن با اسپین پایین می‌تواند داشته باشند. در این مثال 9 الکترون داریم که طبق قاعده اول هوند برخی از آن‌ها دارای اسپین بالا و مابقی دارای اسپین پایین می‌باشند. بنابراین با 7 الکترون با اسپین بالا و دو الکترون با اسپین پایین داریم  $S = 7 \times 1/2 + 2 \times (-1/2) = 5/2$  (شکل (3-20)ب).

بر اساس قاعده دوم هوند<sup>1</sup>، اندازه حرکت مداری الکترون با اسپین بالا (متشکل از 7 الکترون) برای حالت‌های پُر شده برابر صفر  $\sum_{-l}^l m_l = 0$  و اسپین پایین برای حالت‌های پُر شده (2 الکترون با اندازه حرکت ماکزیمم) طبق قاعده دوم هوند برابر است با  $\sum_{-l}^l m_l = 3+2=5$ . از این رو اندازه حرکت مداری سیستم برابر با  $L=5$  است. با در نظر گرفتن قاعده سوم هوند، از آنجا که خارج‌ترین پوسته از نیمه بیشتر پُر می‌باشد، اندازه حرکت زاویه‌ای کل زاویه‌ای مجموعه برابر است با  $J = |L+S| = |5+5/2| = 15/2$ . بنابراین می‌توان (با استفاده از جدول (3-3) و نماد  $L_{2S+1}$ ) برای یون خاکی کمیاب  $Dy^{3+}$  عبارت  $H_{15/2}$  را نوشت.

جدول 3-2. تعداد مؤثر مگنتون‌ها برای یون‌های گروه آهن.

یون	پیگربندی	تراز اصلی	(محاسبه شده) $g[(J(J+1))]^{1/2}$	(محاسبه شده) $2[(S(S+1))]^{1/2}$	P (تجربه تقریبی)
Ti <sup>3+</sup> V <sup>4+</sup>	3d <sup>1</sup>	<sup>2</sup> D <sub>3/2</sub>	1/55	1/73	1/8
V <sup>3+</sup>	3d <sup>2</sup>	<sup>3</sup> F <sub>2</sub>	1/63	2/83	2/8
Cr <sup>3+</sup> V <sup>2+</sup>	3d <sup>2</sup>	<sup>4</sup> F <sub>3/2</sub>	0/77	3/87	3/8
Mn <sup>3+</sup> Cr <sup>2+</sup>	3d <sup>4</sup>	<sup>5</sup> D <sub>0</sub>	0/0	4/90	4/9
Fe <sup>3+</sup> Mn <sup>2+</sup>	3d <sup>5</sup>	<sup>6</sup> S <sub>5/2</sub>	5/92	5/92	5/9
Fe <sup>2+</sup>	3d <sup>6</sup>	<sup>5</sup> D <sub>4</sub>	6/70	4/90	5/4
Co <sup>2+</sup>	3d <sup>7</sup>	<sup>4</sup> F <sub>7/2</sub>	6/63	3/87	4/8
Ni <sup>2+</sup>	3d <sup>8</sup>	<sup>3</sup> F <sub>4</sub>	5/59	2/83	3/2
Cu <sup>2+</sup>	3d <sup>9</sup>	<sup>2</sup> D <sub>5/2</sub>	3/55	1/73	1/9

۱. اندازه حرکت ماکزیمم با توجه به اسپین به دست آمده از قاعده اول.

جدول 3-3. تعداد p مؤثر مگنتون‌ها برای یون‌های گروه لانتانید سه ظرفیتی (در حدودهای دمای اتاق).

یون	پیکربندی	تراز اصلی	(محاسبه شده) $g_J [(J(J+1))]^{1/2}$	P (تجربه) تقریبی
Ce <sup>3+</sup>	4f <sup>1</sup> 5s <sup>2</sup> p <sup>6</sup>	<sup>2</sup> F <sub>5/2</sub>	2/54	2/4
Pr <sup>3+</sup>	4f <sup>2</sup> 5s <sup>2</sup> p <sup>6</sup>	<sup>3</sup> H <sub>4</sub>	3/58	3/5
Nd <sup>3+</sup>	4f <sup>3</sup> 5s <sup>2</sup> p <sup>6</sup>	<sup>4</sup> I <sub>9/2</sub>	3/62	3/5
Pm <sup>3+</sup>	4f <sup>4</sup> 5s <sup>2</sup> p <sup>6</sup>	<sup>5</sup> I <sub>4</sub>	2/68	-
Sm <sup>3+</sup>	4f <sup>5</sup> 5s <sup>2</sup> p <sup>6</sup>	<sup>6</sup> H <sub>5/2</sub>	0/84	1/5
Eu <sup>3+</sup>	4f <sup>6</sup> 5s <sup>2</sup> p <sup>6</sup>	<sup>7</sup> F <sub>0</sub>	0/0	3/4
Cd <sup>3+</sup>	4f <sup>7</sup> 5s <sup>2</sup> p <sup>6</sup>	<sup>8</sup> S <sub>7/2</sub>	7/94	0/8
Tb <sup>3+</sup>	4f <sup>8</sup> 5s <sup>2</sup> p <sup>6</sup>	<sup>7</sup> F <sub>6</sub>	9/72	9/5
Dy <sup>3+</sup>	4f <sup>9</sup> 5s <sup>2</sup> p <sup>6</sup>	<sup>6</sup> H <sub>15/2</sub>	10/63	10/6
Ho <sup>3+</sup>	4f <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> p <sup>6</sup>	<sup>5</sup> I <sub>8</sub>	10/60	10/4
Er <sup>3+</sup>	4f <sup>11</sup> 5s <sup>2</sup> p <sup>6</sup>	<sup>4</sup> I <sub>15/2</sub>	9/59	9/5
Tm <sup>3+</sup>	4f <sup>12</sup> 5s <sup>2</sup> p <sup>6</sup>	<sup>3</sup> H <sub>6</sub>	7/57	7/3
Yb <sup>3+</sup>	4f <sup>13</sup> 5s <sup>2</sup> p <sup>6</sup>	<sup>2</sup> I <sub>7/2</sub>	4/53	4/5

نکته 3-11: قاعده هوند حالت پایه هر اتم را توصیف می‌نماید و از حالت‌های برانگیخته سخنی به میان نمی‌آورد.

نکته 3-12: در جدول (3-3) نشان می‌دهد تعداد تجربی مگنتون‌ها برای نمک‌های گروه واسطه آهن از جدول تناوبی توافق ضعیفی با رابطه‌ی  $p = g_J \sqrt{J(J+1)}$  دارد. این مقادیر غالباً با تعداد مگنتون‌های  $p = 2\sqrt{S(S+1)}$  توافق خوبی دارند، گویی که گشتاور مداری اصلاً وجود ندارد. در این مورد می‌گویند گشتاورهای مداری فرونشانده شده است.

### 3-3 مغناطش یک سیستم با برهم‌کنش

تاکنون به بررسی خواص مغناطیسی مواد در حضور میدان مغناطیسی خارجی و اثرات میدان  $B$  با هر یک از دوقطبی‌های مغناطیسی همراه با برهم‌کنش بین هر دوقطبی با میدان شبکه‌ای مؤثر دوقطبی‌ها (میدان‌های متوسط) مواد، پرداخته شد<sup>1</sup>.

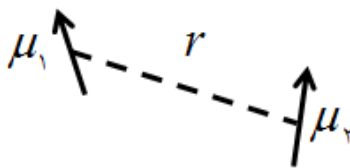
در این فصل به برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی و منشاء برهم‌کنش آن‌ها که به صورت مدل هایزنبرگ نشان داده می‌شود، خواهیم پرداخت. از طریق این مدل می‌توان مواد مغناطیسی به صورت‌های مختلف (فرومغناطیس، پادفرومغناطیس و فری‌مغناطیس) دسته‌بندی نمود. همچنین در ادامه نشان خواهیم داد چنین سیستم‌هایی دارای یک گذار فاز مرتبه دوم با یک دمای بحرانی و انرژی سیستم به نحوه‌ی آرایش اسپینی اتم‌ها بستگی دارد. حالت‌های برانگیخته چنین سیستم‌هایی به صورت موج اسپینی در مجموعه پدیدار می‌شود.

### 3-3-1 نظریه هایزنبرگ

#### • برهم‌کنش گشتاور دوقطبی‌های مغناطیسی

برای معرفی برهم‌کنش‌ها بهتر است در ابتدا از برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی مغناطیسی که از درس الکترومغناطیس با آن آشنا هستیم شروع کنیم. هامیلتونی برهم‌کنشی دوقطبی-دوقطبی مغناطیسی دو ذره با گشتاورهای مغناطیسی  $\vec{\mu}_1$  و  $\vec{\mu}_2$  که به فاصله  $\vec{r}$  از یکدیگر فاصله دارند را می‌توان به صورت زیر نوشت (شکل (3-21)).

$$E = \frac{m_b}{4\pi r^3} \frac{e\hbar}{e} \vec{\mu}_1 \times \vec{\mu}_2 - \frac{3}{r^2} (\vec{\mu}_1 \times \vec{r})(\vec{\mu}_2 \times \vec{r}) \cdot \hat{r} \quad (78-3)$$



شکل 3-21. نمایش برهم‌کنش کلاسیکی دوقطبی - دوقطبی

برای داشتن یک تصور عددی در این برهم‌کنش می‌توانید اندازه گشتاور هر دوقطبی  $m = 1m_B$  که به اندازه تقریباً یک آنگسترم از یکدیگر فاصله دارند را در نظر

1. بدون در نظر گرفتن برهم‌کنش‌های دوقطبی-دوقطبی بین اتم‌های مغناطیسی بطور مجزا و مستقیم.

بگیرید. حاصل انرژی آن برابر خواهد بود  $E = m^2/4\pi r^3 \sim 10^{-23} \text{J}$  که معادل انرژی گرمایی  $k_B T$  در دمای  $1 \text{k}$  می باشد که باعث هم‌سویی گشتاورهای دوقطبی مغناطیسی می شود. در دمای‌های بالا این برهم‌کنش برای ایجاد یک نظم مغناطیسی، بسیار کوچک می باشد. در مقابل برای دماهای تقریباً چند میلی کلون برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی قابل ملاحظه است و یک نظم مغناطیسی را حادث می شود. ولی بحث اصلی ما خواص مغناطیسی مواد در دمای اتاق یا دماهای بالای چند کلون است. از این رو، این نوع برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی که به طور کلاسیکی به دست می آید (رابطه‌ی (3-78)) قابل صرف نظر کردن است، به عبارت دیگر بایستی به دنبال عامل نظم مغناطیسی دیگری در مواد در دماهای بالا باشیم.

در ادامه نوع دیگری از برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی را معرفی می‌نماییم که از دل برهم‌کنش الکترواستاتیکی الکترون‌ها با یکدیگر و با یون‌های شبکه و قوانین بنیادی فیزیک کوانتومی استخراج می شود. اصل طرد پائولی و پادمتقارن بودن تابع موج یک سیستم فرمیونی<sup>1</sup> سبب می شود که از دل پدیده‌های کوانتومی، انرژی تبدلی<sup>2</sup> خارج شود. در سال 1928 هایزنبرگ عبارت انرژی تبدلی را به صورت رابطه‌ی (3-79) معرفی نمود که در بخش 3-3-2 به نحوی به دست آمدن آن خواهیم پرداخت. هر چند که اسپین الکترون یک پدیده برداری نیست ولی در برهم‌کنش با یکدیگر و یا با میدان مغناطیسی رفتاری بردارگونه از خود نشان می‌دهد از این رو در ادامه آن را به مانند یک بردار نمایش می‌دهیم.

$$H_{\text{ex}} = -2\mathfrak{a} \sum_{i>j} J_{ij}^{\text{ex}} \hat{S}_i \times \hat{S}_j \quad (79-3)$$

که در آن  $\hat{S}_i$  و  $\hat{S}_j$  برابر با اسپین الکترون به ترتیب روی اتم  $i$  و  $j$  می باشند و  $J_{ij}^{\text{ex}}$  انتگرال تبادل انرژی بین آن‌ها است. با توجه به رابطه‌ی (3-79)، برای سیستمی با  $J_{ij}^{\text{ex}}$  مثبت، کمترین مقدار انرژی زمانی حادث می شود که اسپین‌های مجموعه هم‌سو شوند. در این وضعیت مجموعه دارای یک مغناطش ذاتی  $M$  خواهد بود که به چنین

۱. تابع موج یک سیستم فرمیونی (مانند یک سیستم الکترونی) نسبت به تعویض هر دو فرمیون پادمتقارنی است  
 $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$

۲. Exchange Energy

موادی فرومغناطیس<sup>1</sup> می‌نامند ( $\dot{S}_i \times \dot{S}_j > 0$ ) و برای  $J_{ij}^{ex}$  منفی، کمترین مقدار انرژی زمانی است که اسپین‌های مجموعه غیرهم‌سو شوند. در این وضعیت مغناطش مجموعه صفر می‌باشد که به چنین موادی پادفرومغناطیس<sup>2</sup> می‌نامند ( $\dot{S}_i \times \dot{S}_j < 0$ ). با یک تحلیل کیفی توسط بتس<sup>3</sup> نشان داده شد، وقتی که فاصله بین اتم‌ها بسیار بزرگ‌تر از اندازه اربیتال بین دو اتم باشد انتگرال تبدلی انرژی  $J_{ij}^{ex}$  مثبت می‌باشد. به طور کمی اسلیتر نیز نشان داد اگر فاصله بین‌اتمی بیش از سه برابر اندازه اربیتال اتمی باشد سیستم فرومغناطیس است، مانند Fe و Co و اگر کمتر از سه برابر اندازه اربیتال باشد پادفرومغناطیس می‌باشد مانند Mn و Cr.

### 3-3-2 انرژی تبدلی

مفهوم برهم‌کنش تبدلی که از دل پدیده‌ای با نظم مغناطیسی بلند برد برمی‌خیزد یک اثر کاملاً کوانتومی است. این انرژی در نگاه اول کاملاً عجیب به نظر می‌رسد، ولی با کمی دقت با استفاده از مفاهیم مکانیک کوانتومی به منطقی بودن آن پی خواهیم برد.

#### • منشاء انرژی تبدلی چیست؟

از مکانیک کوانتومی به یاد داریم که الکترون یک فرمیون با اسپین 1/2 می‌باشد. فرض کنید هر الکترون مجزا توسط توابع موج  $\psi_{a-}(\mathbf{r})$  یا  $\psi_{a+}(\mathbf{r})$  در فضا مشخص می‌شود که در این جا a مشخص کننده‌ی حالت الکترون می‌باشد. برای یک سیستم دو فرمیونی، هر یک از فرمیون‌ها می‌توانند ویژه حالت‌های فضایی متفاوت  $\psi_{a+}(\mathbf{r}_1)$  و  $\psi_{b+}(\mathbf{r}_2)$  (بدون در نظر گرفتن سهم اسپینی آن‌ها) در نظر گرفت. تابع موج کل این سیستم دو فرمیونی با تقریب هارتری به صورت  $\psi_{a+}(\mathbf{r}_1) \psi_{b+}(\mathbf{r}_2)$  باشد ولی با توجه به این که تابع موج کل چنین سیستمی نسبت به جابه‌جایی هر دو فرمیون بایستی نامتقارن باشد از این رو می‌توان از تقریب هاتری-فوک به صورت دترمینان اسلیتر از این ویژه توابع استفاده نمود.<sup>4</sup>

با توجه به اصل طرد پائولی و فرمیون بودن این مجموعه‌ی دو فرمیونی، توابع موج الکترونی کل سیستم توسط توابع  $\psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  و  $\psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  نشان داده می‌شوند که هر

1. هم‌سویی اسپین‌ها با یکدیگر باعث غیر صفر شدن مغناطش مجموعه می‌شود.

2. عدم هم‌سویی اسپین هر اتم با اسپین اتم‌های همسایه خود که باعث صفر شدن مغناطش مجموعه می‌شود.

۳. Bethe

4. جهت یادآوری می‌توان به کتاب فیزیک کوانتومی گاسیورویچ بخش اتم هلیوم مراجعه نمود.

یک از این توابعها به ترتیب مربوط به حالت اسپینی تک گانه  $c_S$  ( $S=0$ ) و اسپینی سه گانه  $c_T$  ( $S=1$ ) می باشند.

$$c_S = \frac{1}{\sqrt{2}} (|-\rangle - |-\rangle) \quad (80-3)$$

$$c_T = \frac{1}{\sqrt{2}} (|-\rangle + |-\rangle) \quad (81-3)$$

حالت های  $|-\rangle$  و  $|-\rangle$  نمایش اسپینی تک الکترونی و  $|-\rangle$  نمایش حالت های اسپینی یک مجموعه ی دو الکترونی هستند. همانطور که در بالا به آن اشاره شد برای یک سیستم دو فرمیونی، به دلیل پادمتقارن بودن تابع موج مجموعه نسبت به جابه جایی هر دو فرمیون، حالت اسپینی تک گانه  $c_S$  سهم فضایی آن متقارن<sup>1</sup> و برای حالت اسپینی سه گانه  $c_T$  سهم فضایی آن پادمتقارن<sup>2</sup> می باشد.

$$y_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [y_a(\mathbf{r}_1)y_b(\mathbf{r}_2) + y_a(\mathbf{r}_2)y_b(\mathbf{r}_1)]' c_S \quad (82-3)$$

$$y_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [y_a(\mathbf{r}_1)y_b(\mathbf{r}_2) - y_a(\mathbf{r}_2)y_b(\mathbf{r}_1)]' c_T \quad (83-3)$$

که در روابط بالا اندیس های  $a$  و  $b$  نمایش دو حالت یک سیستم تک فرمیون هستند. انرژی سیستم نسبت به هر یک از حالت های تک گانه  $E_S$  و سه گانه  $E_T$  که توسط هامیلتونی مجموعه  $H$  مشخص می شود، به صورت زیر داده می شود:

$$E_S = \int \int \psi_S^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) H \psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (84-3)$$

$$E_T = \int \int \psi_T^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) H \psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (85-3)$$

با استفاده از روابط (84-3) و (85-3) اختلاف انرژی بین این دو حالت برابر است:

$$J^{ex} = \frac{E_S - E_T}{2} = \int \int \psi_a^*(\mathbf{r}_1) \psi_b^*(\mathbf{r}_2) H \psi_b(\mathbf{r}_1) \psi_a(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (86-3)$$

1. به دلیل پادمتقارن بودن بخش اسپینی آن.  
2. به دلیل متقارن بودن بخش اسپینی آن.



**نکته 3-13:** حاصل عبارت انتگرالی رابطه‌ی (3-86) کمیت مهمی را معرفی می‌کند که خواص مغناطیسی مواد به آن وابسته می‌باشد. این کمیت را ضریب تبدیلی انرژی  $J^{\text{ex}}$  معرفی می‌شود که، فقط به توابع موج مجزای فضایی تک الکترونی  $y_a(\mathbf{r})$  و  $y_b(\mathbf{r})$  بستگی پیدا می‌کند نه به تابع موج کل سیستم  $(y_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), y_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2))$  و نه به آرایش اسپینی تک‌گانه و یا سه‌گانه.

از این رو همان‌طور که در بالا اشاره شد، یک سیستم دو فرمیونی به‌ازای هر یک از حالت اسپینی  $s=0,1$  انرژی‌های  $E_S$  و  $E_T$  را به خود می‌گیرند که در ادامه نشان خواهیم داد که این انرژی‌ها را از رابطه‌ی (3-87) استخراج می‌شود.

$$E = \frac{1}{4}(E_S + 3E_T) - \frac{1}{\hbar^2}(E_S - E_T) \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (87-3)$$

$$E = \frac{1}{4}(E_S + 3E_T) - 2 \frac{J}{\hbar^2} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$$

چگونه از رابطه‌ی (3-87) می‌تواند انرژی‌های یک مجموعه‌ی دو فرمیونی را استخراج نماییم؟  
از فیزیک کوانتومی به یاد داریم که اندازه حرکت اسپینی یک الکترون مجزا برابر است با:

$$S_1 = \sqrt{s_1(s_1+1)}\hbar = \sqrt{\frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{\epsilon_0^2} + 1} \frac{\hbar}{\epsilon_0} = \sqrt{\frac{3}{4}} \hbar \quad (88-3)$$

به‌ازای مقادیر اسپینی کل یک سیستم دو فرمیونی  $\mathbf{S}$  (که  $s$  برابر صفر و یک می‌باشد) و مقادیر اسپینی مجزا  $\mathbf{S}_1$  و  $\mathbf{S}_2$ ، عبارت حاصل ضرب اسپینی  $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$  مشخص می‌شود (رابطه‌ی (3-89))

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2} [(S_1 + S_2)^2 - S_1^2 - S_2^2] = \frac{\hbar^2}{2} \left[ s(s+1) - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right] = \frac{\hbar^2}{2} \left[ s(s+1) - \frac{3}{2} \right] \quad (89-3)$$

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \begin{cases} \frac{1}{4} \hbar^2 & \text{if } s=1 \\ -\frac{3}{4} \hbar^2 & \text{if } s=0 \end{cases}$$

با قرار داد مقادیر  $\hat{S}_1 \times \hat{S}_2$  (به ازای حالت تک گانه  $s=0$  و حالت سه گانه  $s=1$ ) در رابطه‌ی (89-3) مقادیر انرژی تک گانه  $E_S$  و انرژی سه گانه  $E_T$  از آن نتیجه می شود. با توجه به رابطه‌ی (87-3)، عبارت اول  $(\frac{1}{4}(E_S + 3E_T))$  مقدار ثابتی است (که با انتخاب مناسب سطح انرژی صفر می توان آن را نادیده گرفت). ضریب جمله دوم در عبارت دوم، به شدت برهم کنشی الکتریکی این دو فرمیون که توسط ضریب تبادل  $J^{ex}$  (ویا انتگرال تبادل<sup>۱</sup>) که به صورت رابطه‌ی (87-3) داده می شود، بستگی دارد و با توجه به علامت این ضریب تبدلی سمتگیری اسپینی الکترون‌ها با  $S_1 \times S_2$  مشخص می گردد.

همان طور که می دانیم، در دمای صفر (حالت پایه سیستم) کمینه انرژی هر مجموعه‌ای حالت سیستم را مشخص می کند. از این رو به ازای  $J^{ex} > 0$  مجموعه حالت سه گانه  $E_S > E_T$  (حالت مغناطیسی - -) و به ازای  $J^{ex} < 0$  مجموعه حالات تک گانه  $E_S < E_T$  (حالت غیر مغناطیسی -) رو به خود می گیرد. بنابراین علامت کمیت ضریب تبدلی  $J^{ex}$  مشخص کننده‌ی نوع رفتار اسپینی مجموعه می باشد و این کمیت فقط به برهم کنش الکترواستاتیک دو فرمیون بستگی دارد پس می توان گفت رفتار مغناطیسی مجموعه فرمیونی بستگی به برهم کنش الکترواستاتیک دارد نه برهم کنش اسپینی!

بنابراین با توجه به رابطه‌ی (87-3) و با انتخاب سطح پتانسیل مناسب حذف جمله ثابت (جمله اول (87-3))، هامیلتونی یک سیستم دو فرمیونی را می توان به شکل یک هامیلتونی مؤثر با برهم کنش تبدلی اسپینی به صورت زیر نوشت (رابطه‌ی (90-3)).

$$H^{ex} = -2J\hat{S}_1 \times \hat{S}_2 \quad (90-3)$$

رابطه‌ی (90-3) با توجه ساده سازی های زیر از عبارت (87-3) به دست آمده است: الف) حذف جمله اول (عبارت ثابت) ب) ساده سازی عبارت  $\mathbf{h}^2$  در مخرج جمله دوم آن با عبارت  $\mathbf{h}^2$  که در صورت کسر  $\hat{S}_1 \times \hat{S}_2$  پدید می آید (رابطه‌ی (89-3)). از این رو از این به بعد عبارت  $\hat{S}_1 \times \hat{S}_2$  فقط مقادیر  $\frac{1}{4}$  برای  $s=1$  و  $\frac{3}{4}$  برای  $s=0$  بدون  $\mathbf{h}^2$  در نظر گرفته می شود.

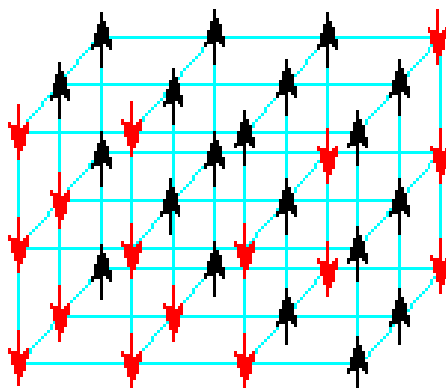
<sup>۱</sup>. Exchange integral

حال مجموعه‌ای با یک آرایش منظم اتمی با اتم‌های مغناطیسی در مکان‌های از شبکه، را در نظر بگیرید. انرژی تبادلی یک چنین مجموعه‌ای را می‌توان با استفاده از رابطه‌ی (3-90) به صورت رابطه‌ی (3-91) برای یک شبکه منظم مغناطیسی تعمیم داد (شکل (3-22)) که به مدل یا نظریه هایزنبرگ معروف است:

$$H^{ex} = -2 \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij}^{ex} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (91-3)$$

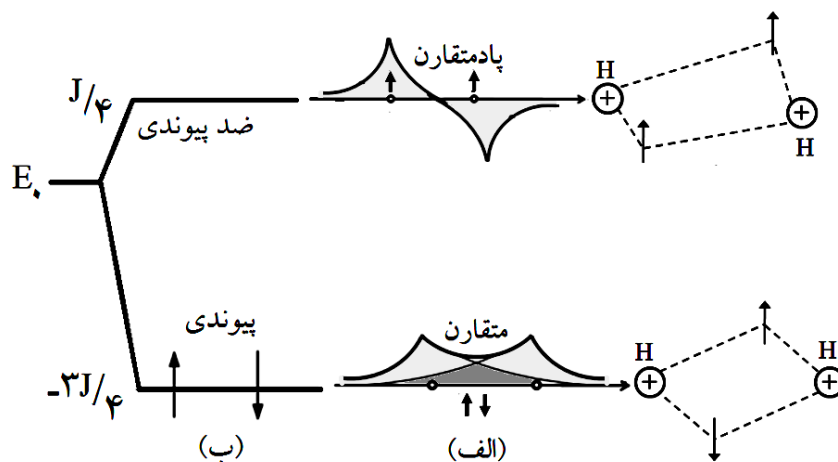
عبارت  $\langle i, j \rangle$  در جمع به معنی جمع روی هر دو مکان اتمی بدون تکرار می‌باشد. بدون در نظر گرفتن روش محاسبه ضریب تبادلی  $J_{ij}^{ex}$  ما بین اتم  $i$ ام و اتم  $j$ ام (که به نحوه‌ی توزیع فضایی تک الکترونی سیستم بستگی دارد)، در اینجا قصد داریم فقط به طور کیفی به دو سناریو بپردازیم:

1) اگر دو الکترون مربوط به یک اتم مجزا باشند با توجه به یکی بودن مراکز توابع موج‌شان، برای به حداقل رساندن مقدار دافعه کولنی، اسپین‌های همسویی (حالت اسپینی سه‌گانه  $S=1$ ) را به خود می‌گیرند که تابع موج فضایی چنین مجموعه‌ای را پادمتقارن کنند. با این تابع موج فضایی پادمتقارن، علامت انرژی تبادلی، مثبت می‌گردد  $J_{ij} > 0$ . از این رو با توجه به رابطه‌ی (3-86)،  $E_T < E_S$  را سبب شده که همان مفهوم قاعده اول هوند می‌باشد.



شکل 3-22. نمایش یک شبکه اسپینی.

(2) اگر این دو الکترون را به دو اتم همسایه نسبت دهیم، مسئله کمی متفاوت می‌شود. به الکترون اجازه داده می‌شود حضور فضایی خود را افزایش دهد که همراه با کاهش



شکل 3-23. الف) تابع موج فضایی متقارن و پادمقارن مولکول هیدروژن (یک سیستم دو فرمیونی) ب) انرژی پیوندی و ضدپیوندی یک سیستم دو فرمیونی. در شکل،  $J$  عبارت مشترک انتگرالی بین انرژی پیوندی  $-3J/4$  و ضدپیوندی با انرژی  $J/4$  و  $E_0$  انرژی حالت مجزا شده‌ی دو اتم است.

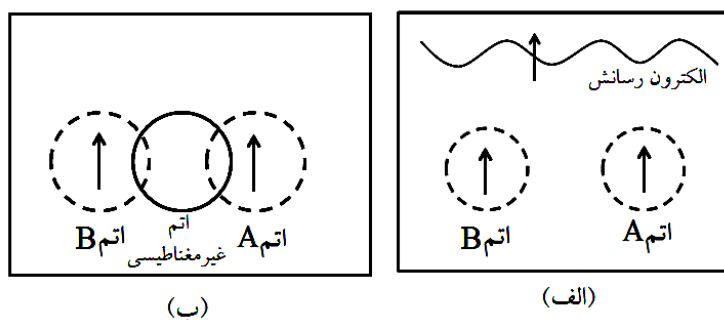
انرژی جنبشی الکترون خواهد بود<sup>1</sup>. حضور الکترون‌ها در بین اتم‌های مجاور باعث ایجاد حالت‌های پیوندی (انرژی کمتر) و دور از اتم‌های مجاور حالت ضدپیوندی (انرژی بیشتر) می‌شوند. برای مثال مولکول هیدروژن  $H_2$  که با محاسبه انرژی مجموعه می‌توان به راحتی نشان داد که حالت فضایی متقارن دارای انرژی پایین‌تر از انرژی حالت فضایی پادمقارن می‌باشد (شکل 3-23). در حالت متقارن، حضور الکترون‌ها در بین یون‌ها افزایش می‌یابد در این حالت پتانسیل برهم‌کنشی الکترون‌ها  $V_{ee}$  به واسطه نزدیکی الکترون‌ها افزایش یافته (جمله مثبت هامیلتونی) ولی در مقابل پتانسیل برهم‌کنشی الکترون با یون‌های مثبت اتم هیدروژن منفی‌تر می‌شود (به واسطه نزدیکی

1. دلیل این امر را می‌توان به سادگی توسط الکترون در جعبه توصیف نمود. از مسئله الکترون در جعبه‌ای به ابعاد  $L$  می‌دانیم که الکترون دارای انرژی جنبشی متناسب با  $L^{-2}$  است. از این رو با افزایش  $L$  انرژی جنبشی کاهش می‌یابد.

الکترون‌ها به یون‌ها و افزایش جاذبه پتانسیل برهم‌کنشی). بنابراین انرژی حالت متقارن (با اسپین تک‌گانه  $S=0$ ) در مقایسه با حالت پادمقارن (سه‌گانه) کمتر بوده که نشان دهنده پایداری این حالت نسبت به حالت پادمقارن است. از این رو حالت پایه چنین سیستمی (مولکول هیدروژن  $H_2$ ) همان حالت اسپینی تک‌گانه (یا تابع موج الکترونی متقارن) با ضریب انرژی تبدلی منفی  $J_{ij} < 0$  می‌باشد (شکل (3-23)).

**نکته 3-14:** ضریب انرژی تبدلی  $J_{ij}$  مثبت باعث هم‌سو شدن اسپینی و فرومغناطیسی شدن سیستم و ضریب انرژی تبدلی منفی باعث عدم هم‌سو شدن اسپینی و پادفرومغناطیسی شدن سیستم می‌گردد. بنابراین این‌که حالت پایه سیستم چه رفتاری را به خود می‌گیرد، بستگی به علامت ضریب انرژی تبدلی دارد.

**نکته 3-15:** در رساناهای مغناطیسی، اتم‌های مغناطیسی‌شان می‌توانند از طریق الکترون‌های رسانش برهم‌کنش تبدلی غیر مستقیمی انجام دهند. بدین صورت که ابتدا الکترون رسانش با برهم‌کنش تبدلی با گشتاور مغناطیسی اتم A، تغییر گشتاور مغناطیسی داده و سپس برهم‌کنش دوباره آن با گشتاور مغناطیسی اتم B آن را متأثر می‌سازد (شکل (3-24) الف). همچنین این تبادل غیرمستقیم می‌تواند به واسطه‌ی یک اتم غیر مغناطیسی صورت پذیرد (شکل (3-24) ب). این اثر تبدلی غیرمستقیم گاهی وقت‌ها به مراتب قوی‌تر از حالت برهم‌کنش تبدلی مستقیم می‌شود.



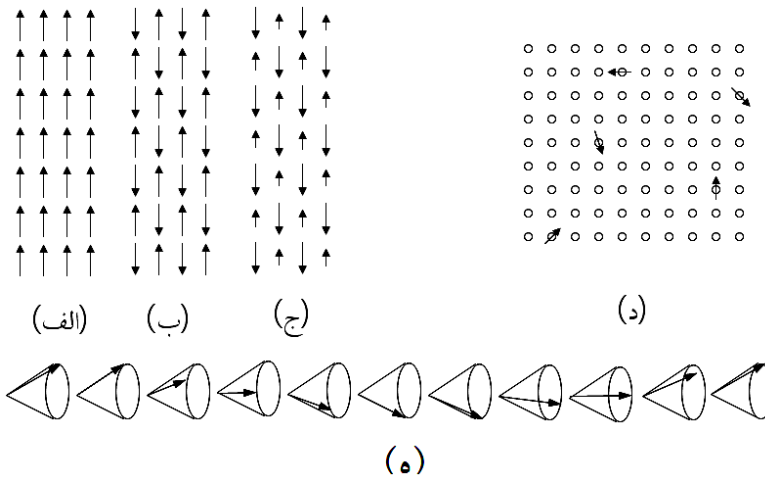
شکل 3-24. الف) انرژی تبدلی غیرمستقیم بین اتم‌های مغناطیسی توسط الکترون‌های رسانش ب) انرژی تبدلی غیرمستقیم اتم‌های مغناطیسی توسط اتم‌های غیرمغناطیسی.

همان طور که اشاره شد برهم کنش تبادلی سیستم باعث می شود که مجموعه یا مغناطیسی (فرومغناطیس-فری مغناطیس) و یا غیرمغناطیسی (پادفرومغناطیس) باشند. با قرار دادن یک فرومغناطیس در یک میدان مغناطیسی  $B$ ، هامیلتونی پارامغناطیسی سیستم به صورت زیر نوشته می شود:

$$H = -2 \sum_{\langle i^1 j \rangle} J_{ij} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j + g \mu_B \sum_i \hat{S}_i \cdot \hat{B}_{ext} \quad (92-3)$$

جمله اول همان انرژی تبادلی به ازای همسایگان اول است<sup>1</sup> که در این جا ضریب انرژی تبادلی مثبت در نظر گرفته شده است. عبارت  $\langle i^1 j \rangle$  در جمع به معنی جمع روی هر دو مکان اتمی بدون تکرار می باشد. جمله دوم انرژی زمین<sup>2</sup> که ناشی از اثرات میدان های خارجی بر مجموعه می باشد.

برای حل معادله (92-3) از مدل میدان متوسط و ایس استفاده می کنیم. در این مدل اثرات میدان اسپینی در هر مکان اتمی  $i$  به صورت یک میدان متوسط اسپینی ناشی



شکل 3-25. شمای کلی از انواع مختلف حالت اسپینی که می تواند در حالت پایه به خود بگیرد. الف) کلیه اسپین هم سو شده است (فرومغناطیس). ب) هر اسپین توسط همسایگان با اسپین مخالف ولی برابر در بر گرفته شده است (پادفرومغناطیس). ج)

۱. اثرات همسایگان اول نسبت به بقیه همسایگان بسیار بیشتر می باشد، از این رو در این جا فقط همسایگان اول در نظر گرفته شده است.

۲. Zeeman effect

هر اسپین توسط همسایگان با اسپین مخالف ولی با مقادیر نابرابر در اندازه در برگرفته شده است (فری مغناطیس).<sup>۱</sup> (د) در برخی مکان‌ها، اتم‌های مغناطیسی با اسپینی که در جهت تصادفی یخ زده باشد (شیشه اسپینی) (د) اسپین‌های هر مکان در فضای مخروطی شکلی (پیچشی<sup>۱</sup>) حرکت می‌کنند و یک موج اسپینی را پدید می‌آورند.

از اسپین همسایگان تصور می‌شود. برهم‌کنش شبکه اسپینی با اسپین اتم  $\mathbf{I}_m$ ، انرژی به مجموعه تحمیل می‌کند که باعث هم‌سوایی آن با میدان متوسط شبکه اسپینی خواهد شد که خود منجر به مغناطیسی شدن سیستم می‌شود. از این رو می‌توان یک میدان مؤثر مولکولی  $\mathbf{B}_{mf}$  برای مکان اتمی  $\mathbf{I}_m$  به صورت زیر نوشت:

$$\mathbf{B}_{mf} = - \frac{2}{g m_B} \mathbf{a}_{\langle i' j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_j \quad (93-3)$$

که جمع روی کلیه اتم‌های پیرامون اتم  $\mathbf{I}_m$  می‌باشد. حال می‌توان اثر زمین را توسط مجموع میدان مؤثر مولکولی  $\mathbf{B}_{mf}$  و میدان خارجی  $\mathbf{B}$  بر روی هر اتم  $\mathbf{I}_m$  به دست آورد و سپس با جمع این اثر بر روی کلیه اتم‌ها، هامیلتونی سیستم را به صورت زیر نتیجه گرفت:

$$H = g m_B \mathbf{a} \sum_i \mathbf{S}_i \times (\mathbf{B}_{ext} + \mathbf{B}_{mf}) \quad (94-3)$$

با حضور میدان مغناطیسی نه تنها هم‌سوایی اسپینی الکترون‌ها با میدان  $\mathbf{B}$  را حادث می‌شود بلکه باعث مثبت‌تر شدن ضریب تبدلی نیز می‌شود که به پارامغناطیسی شدن بیشتر مجموعه کمک می‌کند.

همان‌طور که قبلاً اشاره شد میدان مؤثر مولکولی  $\mathbf{B}_{mf}$  را می‌توان با مغناطش مجموعه (نظم مغناطیسی مجموعه) به صورت زیر نسبت داد.

$$\mathbf{B}_{mf} = I \mathbf{M} \quad (95-3)$$

**نکته 3-15:** حالت فرومغناطیس  $I > 0$ ، به دلیل بالا بودن انرژی پتانسیل کولنی در برهم‌کنش تبدلی، میدان مؤثر مولکولی در یک چنین سیستمی فوق‌العاده بالا خواهد بود (حتی بسیار بالاتر از میدان‌های خارجی).

<sup>۱</sup>. Spiral

با اضافه کردن میدان مؤثر مغناطیسی  $\mathbf{B}_{mf} = \mathbf{l} M$  به میدان خارجی در رابطه‌ی (75-3)، رابطه‌ی (96-3) را خواهیم داشت:

$$M = M_s B_J(y) \quad , \quad M_s = n g_J m_B J \quad \text{(I)} \quad (96-3)$$

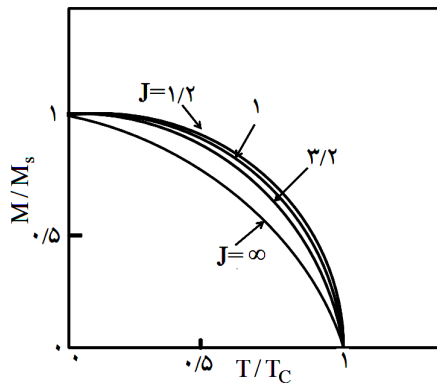
$$y = g_J m_B J (B_{ext} + \mathbf{l} M) / k_B T \quad \text{(II)}$$

به‌ازای عدم حضور میدان خارجی  $B_{ext} = 0$  به مانند قبل (شکل (14-3)) با روش ترسیم به‌ازای دماهای بسیار بالا عبارت بریلوئن  $M = M_s B_J(y)$  خطی می‌گردد که با برابری شیب آن با شیب معادله‌ی خطی که از رابطه‌ی (II) (96-3) نتیجه می‌گردد  $M = \frac{k_B T}{g_J m_B J} y$  دمای کوری به‌دست می‌آید (رابطه‌ی (97-3)).

$$T_C = \frac{g_J m_B (J+1) M_s}{3k_B} = \frac{n g_J^2 m_B^2 J (J+1) \mathbf{l}}{3k_B} = \frac{n \mathbf{l} m_{eff}^2}{3k_B} \quad (97-3)$$

$$m_{eff} = g_J m_B \sqrt{J(J+1)}$$

با در نظر گرفتن دمای کوری و حل ترسیمی آن به‌ازای  $T > T_C$  فقط یک پاسخ خواهیم داشت که برابر است با  $M = 0$ ، که نمایش غیرمغناطیسی مجموعه می‌باشد. به‌ازای  $T < T_C$  دو نمودار در سه نقطه قطع خواهد نمود که مغناطیسی مجموعه را نمایش می‌دهد (شکل‌های (26-3)).



شکل 3-26. میدان متوسط مغناطش مجموعه برحسب دما به‌ازای مقادیر مختلف اندازه حرکت زاویه‌ای کل سیستم  $J$ .



گذار حالت مغناطیسی به حالت غیرمغناطیسی در دمای  $T_C$  یک گذار فاز از نوع مرتبه دوم است<sup>1</sup> که پیوستگی مغناطیسی و ناپیوستگی مشتق مغناطیسی سیستم را در دمای  $T_C$  نتیجه می‌دهد.

حاصل حضور یک میدان خارجی کوچک  $B_{ext} \rightarrow 0$  طبق روش ترسیم (شکل 3-3-27) گذار فازی دیده نمی‌شود و مجموعه به ازای در هر دمایی دارای یک مغناطش کوچک  $M$  خواهد بود. با استفاده رابطه (3-96) و بسط تابع بریلوئن  $B_J(y)$  به ازای  $y \ll 1$  ( $T \gg T_C$ ) روابط زیر را خواهیم داشت:

$$\frac{M}{M_s} \approx \frac{g_J m_B (J+1)}{3k_B} \frac{\mu_B B}{T} + \frac{M}{T} \quad (98-3)$$

$$\frac{M}{M_s} \approx \frac{T_C}{T} \frac{\mu_B B}{T} + \frac{M}{T} \quad (99-3)$$

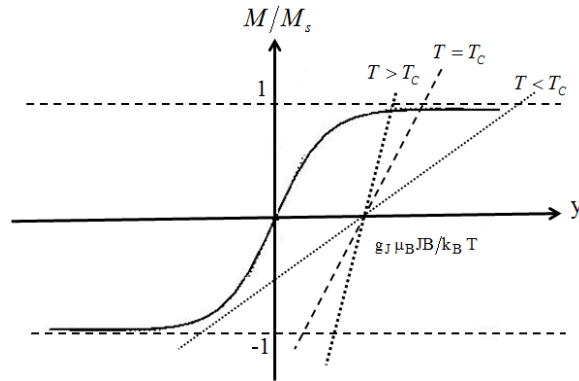
رابطه (98-3) را به صورت رابطه (3-100) بازنویسی می‌کنیم:

$$\frac{M}{M_s} \frac{\mu_B B}{T} - \frac{T_C}{T} \frac{\mu_B B}{T} \approx \frac{T_C B}{T} \quad (100-3)$$

با استفاده از تعریف پذیرفتاری مغناطیسی سیستم  $C$ ، به رابطه‌ی کوری-وایس خواهیم رسید.

$$C = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{m_B M}{B} = \mu_B \frac{1}{T - T_C} \quad (101-3)$$

1. مرتبه گذار فاز یک سیستم، ناپیوستگی در کمترین مرتبه مشتق انرژی آزاد است. گذار فاز مرتبه اول، یک ناپیوستگی در مشتق اول انرژی آزاد و گذار فاز مرتبه دوم یک ناپیوستگی در مشتق دوم انرژی آزاد و کمیت‌هایی شبیه تراکم‌پذیری یا ظرفیت گرمایی تعریف می‌شوند.



شکل 3-27. حل ترسیمی عبارت (3-106).

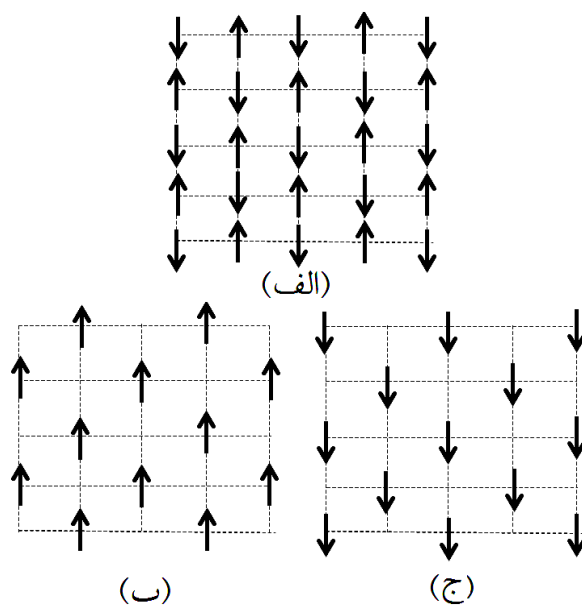
نکته 3-16: با استفاده از رابطه‌ی (3-97)، حداکثر میدان مغناطیسی مولکولی مؤثر  $\dot{B}_{mf} = I \dot{M}_s$  به‌ازای دمای کوری  $T_C = 10^3 \text{ K}$  و  $J = \frac{1}{2}$  برابر با  $I \dot{M}_s = \frac{T_C 3k_B}{g_J m_B (J+1)} \gg 1500 \text{ T}$  است. این میدان مغناطیسی مولکولی مؤثر بسیار زیاد ناشی از برهم‌کنش تبدالی بسیار بالای سیستم در دما  $T_C$  است.

### 3-3-4 پادفرومغناطیس

در سال 1936، نل<sup>1</sup> نشان داد، کمترین انرژی یک سیستم با ضریب تبدالی منفی  $J < 0$  در دمای پایین توسط یک پارامتر نظم مشخص می‌شود. شبکه بلوری چنین مجموعه‌ای (در دمای صفر) را می‌توان به دو زیر شبکه یکسان (از هر نظر ولی با جهت اسپینی مخالف) که در هم نفوذ یافته‌اند معادل دانست (شکل (3-28)). اختلاف مغناطش هر دو زیر شبکه  $(\dot{DM} = \dot{M}_+ - \dot{M}_-)$  به عنوان پارامتر نظم مجموعه شناخته می‌شود. مجموع مغناطش هر دو زیر شبکه فرومغناطیس با مغناطش‌های مخالف  $(\dot{M} = \dot{M}_+ + \dot{M}_-)$  در دمای بسیار پایین به سمت صفر میل می‌کند که چنین مجموعه‌ای را پادفرومغناطیس گویند ولی در مقابل اختلاف آن‌ها  $\dot{DM}$  به حداکثر مقدار خود خواهد رسید. این رفتار را در موادی مانند  $\text{MnO}$ ،  $\text{MnS}$ ،  $\text{CoO}$ ،  $\text{MnO}$ ،  $\text{MnTe}$ ،  $\text{Cr}$  و  $\text{Mn}$  می‌توان دید.

۱. Néel

2. جهت قطبش مغناطیسی بر روی هر مکان اتم با قطبش مغناطیسی اولین همسایگانش مخالف است.



شکل 3-28. الف) یک شبکه پادفرومغناطیسی از دو زیر شبکه فرومغناطیس یکسان ولی با مغناطش غیر هم سو (ب) و (ج) تشکیل شده است.

3-3-5 محاسبه مدل میدان متوسط وایس برای یک پادفرومغناطیس میدان‌های مولکولی این دو زیر شبکه (شکل (3-27)) که با - (شبکه با جهت بالا) یا  $^-$  (شبکه با جهت پایین) به صورت زیر نشان داده می‌شود.

$$\vec{B}_- = -|\vec{M}_-| \quad (102-3)$$

$$\vec{B}_+ = -|\vec{M}_+| \quad (103-3)$$

ا به عنوان یک میدان مولکولی ثابت با مقادیری ثابت و منفی است. با توجه به شکل (3-28) ج همسایگان هر مکان توسط اسپین‌های مخالف احاطه شده است از این رو با استفاده از رابطه‌ی (3-75)، میدان مولکولی در هر مکان توسط رابطه‌ی زیر داده می‌شود.

$$M_- = M_s B_J \left( - \frac{g_J m_B J |M_-|}{k_B T} \right) \quad (104-3)$$

$$M_+ = M_s B_J \left( - \frac{g_J m_B J |M_+|}{k_B T} \right)$$

مقدار مغناطش در هر زیر شبکه با یکدیگر برابر است.

$$|\dot{M}_+| = |\dot{M}_-| = M \quad (105-3)$$

ازین رو با قرار دادن عبارت  $M$  در رابطه‌ی (104-3) نتیجه می‌شود:

$$M = M_s B_J \left( \frac{g_J m_B J |M|}{k_B T} \right) = M_s B_J(y) \quad (106-3)$$

$$y = \frac{g_J m_B J |M|}{k_B T}$$

با استفاده از بسط تابع بریلوئن  $B_J(y)$  (عبارت (74-3)) به ازای  $y$  های کوچک (دماهای بالا) و رابطه‌ی (106-3)، عبارت دمای گذار برای سیستم پادفرومغناطیس  $T_N$  به دست می‌آید (رابطه‌ی (108-3)).

$$B_J(y) \underset{y \ll 1}{\approx} \frac{(J+1)y}{3J} + O(y^3) \quad (107-3)$$

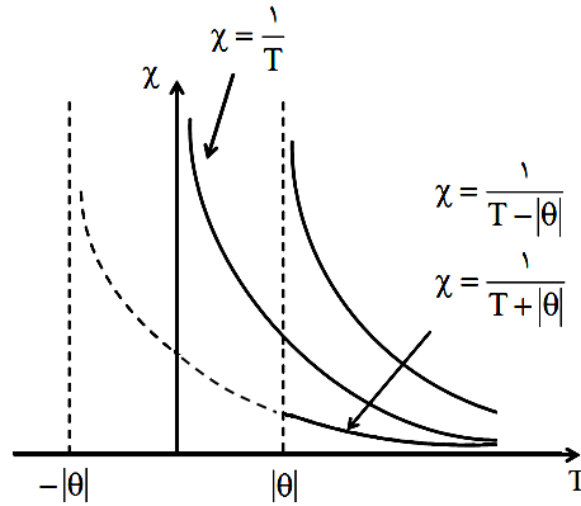
$$T_N = \frac{g_J m_B (J+1) |M_s|}{3k_B} = \frac{n |m_{\text{eff}}^2|}{3k_B} \quad (108-3)$$

که در رابطه‌ی (108-3)  $m_{\text{eff}}^2 = g_J m_B (J+1) M_s$  می‌باشد. این معادله تقریباً با معادله بر گرفته از یک فرومغناطیس معادل می‌باشد با این تفاوت در دمای کمتر از دمای  $T_N$  (که به دمای نل معرف است) مغناطش کل مجموعه  $(\dot{M}_+ + \dot{M}_-)$  صفر می‌باشد. بنابراین در دمای پایین تر از دمای نل، پارامتر نظم  $(DM = \dot{M}_+ - \dot{M}_-)$  غیر صفر خواهد بود و مجموعه رفتاری پادفرومغناطیسی دارد. به این پارامتر نظم  $DM$ ، مغناطش استگرد<sup>1</sup> نامیده می‌شود.

با استفاده از رابطه‌ی (106-3) پذیرفتاری مغناطیسی مجموعه‌های پادفرومغناطیس  $C_{\text{AFM}}$  به ازای دماهای بالا به صورت زیر به دست می‌آید.

<sup>1</sup> Staggered Magnetization

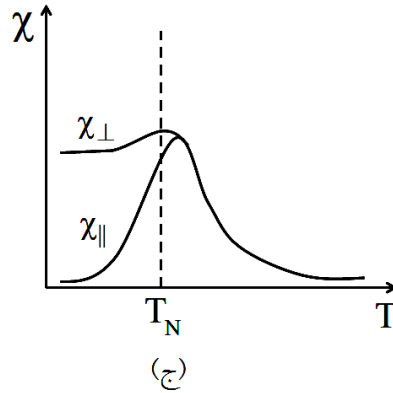
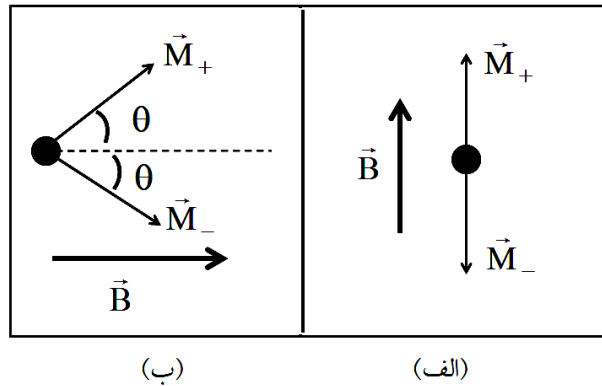
$$C_{AFM} = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{M}{H} \gg \frac{1}{T + T_N} \quad (109-3)$$



شکل 3-29. پذیرفتار مغناطیسی سه سیستم با سه شکل مختلف: بدون در نظر گرفتن میدان متوسط  $C \gg 1/T$  (مدل کوری - فرومغناطیس) و با در نظر گرفتن میدان متوسط (مدل وایس-کوری) حالت فرومغناطیس  $C \gg 1/(T - |q|)$  که در آن  $|q| = T_C$  و حالت پادفرومغناطیس  $C \gg 1/(T + |q|)$  که در آن  $|q| = T_N$ .

**نکته 3-17:** پذیرفتارهای مغناطیسی برای مواد فرومغناطیس  $C_{FM}$  با دمای بحرانی کوری  $T_C$  و برای مواد پادفرومغناطیس  $C_{AFM}$  با دمای بحرانی نل  $T_N$  معرفی می‌گردد.

**نکته 3-18:** با تعیین پذیرفتاری مغناطیسی تجربی و مقایسه آن با رابطه‌ی  $C \gg 1/(T \pm |q|)$  و مشخص نمودن علامت در مخرج کسر می‌توان به پادفرومغناطیس بودن (علامت +) و یا فرومغناطیس بودن (علامت -) مجموعه پی‌برد.



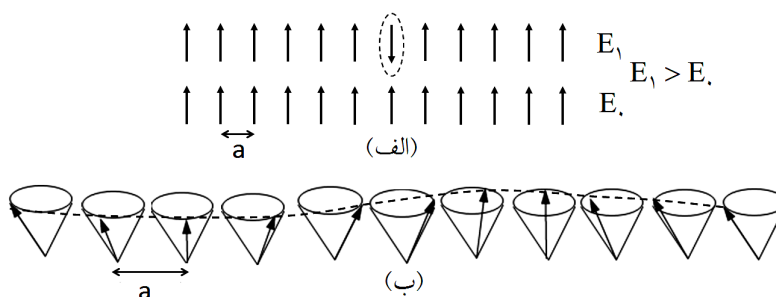
شکل 3-30. نمایش وابستگی دمایی پذیرفتار مغناطیسی یک سیستم پادفرومغناطیس در حضور میدان موازی  $C_{\parallel}$  و میدان عمود  $C_{\perp}$  بر مغناطش هر دو زیر شبکه .

وابستگی دمایی در مشخصه پذیرفتاری یک پادفرومغناطیسی در حوالی دمای بحرانی، در دمای پایین تر از  $T_N$  پذیرفتاری به مقدار زیادی به این وابستگی دارد که میدان مغناطیسی، موازی یا عمود بر محور اسپین های سیستم، اعمال شده باشد. توجه کنید که اگر پادفرومغناطیس سیستم به طور همسانگرد می بود، این وابستگی وجود نمی داشت. یعنی جهت میدان اعمال شده هر چه که باشد مغناطش زیر شبکه به بهترین سمتگیری از نظر انرژی نسبت به میدان می چرخید و فقط یک پذیرفتاری وجود خواهد داشت. وابستگی به سمتگیری در زیر دمای بحرانی ناشی از ناهمسانگردی مغناطیسی سیستم می باشد و باعث می شود که مطابق شکل (3-30) ج پذیرفتاری مغناطیسی سیستم

در دو جهت میدان مغناطیسی اعمال شده (عمود بر محور اسپین‌ها و موازی بر محور اسپین‌ها) متفاوت باشد. در دمای بالای دمای نل، به دلیل غیرهمسانگر شدن فضای اسپینی، پذیرفتاری تقریباً مستقل از جهت میدان نسبت به محور اسپین‌ها است. در ادامه به مطالعه پذیرفتاری مغناطیسی یک مجموعه‌ی پادفرومغناطیس در دمای صفر و دمای بالاتر از دمای مطلق (ولی کمتر از دمای بحرانی  $T_N$ ) در حضور دو میدان مغناطیسی موازی یا عمود بر محور اسپین‌ها در هر دو زیرشبکه می‌پردازیم.

- **در دمای صفر:** با اعمال میدان مغناطیسی موازی با مغناطش دو زیرشبکه، مقدار انرژی مساوی ولی با علامت مخالف به سیستم تحمیل می‌شود و با وجود برابری اندازه مغناطش هر دو زیرشبکه  $|M_{\pm}| = M_s$  هنوز مغناطش مجموعه برابر صفر است  $\dot{M}_+ + \dot{M}_- = 0$  که پذیرفتار مغناطیس صفر را نتیجه می‌دهد  $c_{||} = 0$  (شکل (30-3) الف). با اعمال یک میدان مغناطیسی عمودی ضعیف بر مغناطش  $M_{\pm}$  هر دو زیرشبکه (مطابق با شکل (30-3) ب)، مغناطش هر زیرشبکه در راستای میدان مؤلفه‌ای پیدا خواهد نمود که باعث غیر صفر شدن مغناطش سیستم و پذیرفتاری مغناطیسی آن می‌شود  $c_{\perp} \neq 0$ .

- **در دمای غیر صفر:** با افزایش دما (ولی کمتر از دمای بحرانی  $T_N$ ) در حضور میدان  $B$  موازی با مغناطش هر دو زیرشبکه، مغناطش هر دو زیرشبکه  $M_{\pm}$  از حالت اشباع  $M_s$  خود خارج شده و مقدار مغناطش یک زیر شبکه نسبت به زیرشبکه دیگر کاهش می‌یابد (در این جا با توجه به هم جهت بودن میدان  $B$  با مغناطش  $\dot{M}_+$ ، مجموعه مغناطشی در راستای میدان  $B$  را به خود می‌گیرد  $\dot{M}_+ > \dot{M}_-$ ) و در نتیجه مغناطش کل سیستم افزایش می‌یابد  $\dot{M}_+ + \dot{M}_- \neq 0$  که سبب افزایش پذیرفتاری سیستم  $c_{||}$  می‌شود (شکل (30-3) ج). در حالتی که میدان  $B$  عمود بر مغناطش هر دو زیرشبکه باشد، با توجه به تقارن مغناطش هر دو زیرشبکه‌ها حول میدان مغناطیس، افزایش دما در حضور یک میدان مغناطیسی عمودی ضعیف، تغییرات مغناطش کل سیستم را ثابت خواهد ماند که منجر به ثابت ماندن پذیرفتار مغناطیسی سیستم  $c_{\perp}$  می‌شود (شکل (30-3) ج).



شکل 3-31. الف) اولین حالت برانگیختگی اسپینی یک زنجیره اتمی با فاصله بین اتمی  $a$  (ب) انتشار موج اسپینی با انرژی کم می باشد که به صورت یک حرکت تقدیمی نشان داده شده است که اسپین اتم های متوالی نسبت به هم دارای یک تقدم فاز، هستند.

### 3-3-6 فری مغناطیس

ساختار مواد فری مغناطیس مانند پادفرومغناطیس است (شکل 3-25 ج) ولی با اندازه قطبش های مغناطیسی نابرابر برای هر دو زیرشبکه  $(M_A \neq M_B)$ . برای توصیف چنین موادی می توان از یک ماده مغناطیسی مرکبی کمک گرفت که دارای چند نوع اتم مغناطیسی با قطبش های متفاوت و یا یک نوع اتم با قطبش های متفاوت<sup>1</sup> در بلور باشند. این ساختار مغناطیسی در دمای صفر مطلق دارای مغناطش خود به خودی است. برای مثال اتم آهن در ساختار مگنتیت  $Fe_3O_4$  (یا  $FeO \cdot Fe_2O_3$ ) می پردازیم که از دو نوع یون مغناطیسی تشکیل یافته اند  $(Fe^{+3}, Fe^{+2})$ . با استفاده از جدول (3-2) یون های فریت  $Fe^{+3}$  دارای اسپین  $S=5/2$  و گشتاور مداری صفر  $L=0$  می باشند و یون های فرو  $Fe^{+2}$  دارای اسپین  $S=2$  با گشتاور مداری  $L=2$  هستند. با صرف نظر کردن از سهم گشتاور مداری آنها، قطبش مغناطیسی هر یون به واسطه اسپین شان طبق رابطه  $\vec{\mu} = -g_L m_B \vec{S}$  برای فریت  $Fe^{+3}$  برابر است با  $5m_B$  و برای یون فرو  $Fe^{+2}$  برابر  $4m_B$  است. ساختار مگنتیت<sup>2</sup> دارای سه زیرشبکه است که دو تای آنها متعلق به فریت ها  $Fe^{+3}$  می باشد ولی با قطبش های مغناطیسی مخالف که جمع قطبش آنها صفر می شود

1. به دلیل آرایش متفاوت اتم های همسایه بر روی هر یک از دو نوع یون مغناطیسی یکسان، می تواند باعث قطبش های متفاوتی بر روی دو یون مغناطیسی یکسان شود.

<sup>2</sup> Magnetite



و زیر شبکه دیگر برای فرو  $Fe^{+2}$  است که مسؤل قطبش مغناطیسی این ماده مرکب در دمای صفر مطلق می باشد.

نکته 3-19: علی رغم رسانا بودن فرومغناطیس ها، فری مغناطیس ها غالباً نیم رسانا و عایق می باشند.

### 3-3-7 امواج اسپینی فرومغناطیسی

اثرات برهم کنش متقابل اسپینی روی الکترون های یک بلور فرومغناطیس، اولین بار توسط بلوخ در سال 1932 مورد بررسی قرار گرفت. یک زنجیره اتمی با برهم کنش اسپینی هر اتم با اتم های همسایه در حالت فرومغناطیس را در نظر بگیرید. در دمای صفر مطلق همگی اسپین های در یک راستا و دارای حداقل انرژی برهم کنشی می باشند  $E_0 = -2JNS^2$ . با افزایش دما جهت اسپین اتم ها شروع به تغییر می کند و حالت های برانگیخته انرژی را حادث می شوند. اولین حالت برانگیخته حالتی است که فقط یکی از اسپین اتم های زنجیره تغییر کند (شکل (3-31) الف). در انرژی های کوچک به واسطه وجود برهم کنش تبادلی اسپینی ما بین اتم های همسایه، یک موج اسپینی را در سیستم به وجود می آورد. در ادامه به معرفی کوانتای انرژی موج اسپینی که مگنون<sup>1</sup> نامیده می شود، می پردازیم.

برای محاسبه حالت های برانگیخته از مدل برهم کنشی هایزنبرگ کمک می گیریم.

$$E_{ex} = -2\mathbf{a} \sum_{i>j} J_{ij}^{ex} \mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j = -\mathbf{a} \sum_i \mathbf{a} \sum_{i'j} J_{ij}^{ex} \mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j \quad (110-3)$$

حذف عدد 2 در عبارت دوم از رابطه ی (110-3) به دلیل دو بار محاسبه برهم کنش متقابل اسپینی است. طبق تعریف قطبش مغناطیسی هر اتم به صورت  $\mathbf{m}_i = g\mathbf{h}\mathbf{S}_i$  که در آن  $g$  ضریب ژیرومغناطیس برابر با  $g = g\mathbf{m}_B/\mathbf{h}$  است و با استفاده از نظریه ی میدان های متوسط اثرات اسپینی روی هر اتم را می توان معادل میدان مغناطیسی اسپینی شبکه ی روی هر اتم به صورت رابطه ی (111-3) نوشت.

$$\mathbf{B}_i = \frac{1}{g\mathbf{h}} \mathbf{a} \sum_{j \neq i} J_{ij}^{ex} \mathbf{S}_j \quad (111-3)$$

<sup>1</sup>. Magnon

از این رو می توان انرژی برهم کنشی اسپینی بر روی تمامی اتم های شبکه را به صورت عبارت (111-3) بازنویسی نمود.

$$E_{ex} = - \sum_i \dot{\mathbf{a}} \cdot \mathbf{m}_i \times \mathbf{B}_i \quad (112-3)$$

با توجه به اهمیت سهم برهم کنشی همسایگان اول مکان  $n$  که عبارت هستند از مکان های  $n-1$  و  $n+1$ ، میدان متوسط روی مکان  $n$  برابر است با:

$$\mathbf{B}_n = \frac{J^{ex}}{gh} (\mathbf{S}_{n-1} + \mathbf{S}_{n+1}) \quad (113-3)$$

در عبارت (113-3) ضرایب تبدلی همسایگان اول مکان  $n$  را برابر در نظر گرفته شده است  $J_{n,n-1}^{ex} = J_{n,n+1}^{ex} = J^{ex}$ .

از مکانیک کلاسیک می دانیم که آهنگ گشتاور تغییرات اسپینی برابر است با:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{S}_n}{dt} &= \dot{\mathbf{m}}_n \cdot \mathbf{B}_n = gh \mathbf{S}_n \cdot \frac{\dot{\mathbf{e}}^{J^{ex}}}{\mathbf{e} \cdot gh} (\mathbf{S}_{n-1} + \mathbf{S}_{n+1}) \quad (114-3) \\ \frac{d\mathbf{S}_n}{dt} &= J^{ex} \mathbf{S}_n \cdot (\mathbf{S}_{n-1} + \mathbf{S}_{n+1}) \end{aligned}$$

با تفکیک مؤلفه های اسپینی بر حسب مختصات کارتزین رابطه های زیر را خواهیم داشت.

$$\frac{dS_n^x}{dt} = J^{ex} \left( S_n^y (S_{n-1}^z + S_{n+1}^z) - S_n^z (S_{n-1}^y + S_{n+1}^y) \right) \quad (115-3)$$

$$\frac{dS_n^y}{dt} = J^{ex} \left( S_n^z (S_{n-1}^x + S_{n+1}^x) - S_n^x (S_{n-1}^z + S_{n+1}^z) \right) \quad (116-3)$$

$$\frac{dS_n^z}{dt} = J^{ex} \left( S_n^x (S_{n-1}^y + S_{n+1}^y) - S_n^y (S_{n-1}^x + S_{n+1}^x) \right) \quad (117-3)$$

معادلات بالا غیر خطی هستند. برای حل آن ها فرض می شود انحراف اسپینی از محور  $Z$  (به دلیل اثر حرارتی کوچک) بسیار ناچیز باشد. از این رو مؤلفه های اسپینی در راستای  $x$  و  $y$  بسیار کوچک تر از مؤلفه  $z$  آن می باشد  $(S_n^x, S_n^y) \ll S_n^z = S$ .

برای یک زنجیر اتمی (شکل (31-3))، معادلات (115-3)، (116-3) و (117-3) با فرض انحراف اسپینی کوچک به صورت زیر نوشته می شوند.

$$\frac{dS_n^x}{dt} = J^{\text{ex}} S \left( 2 S_n^y - (S_{n-1}^y + S_{n+1}^y) \right) \quad (118-3)$$

$$\frac{dS_n^y}{dt} = J^{\text{ex}} S \left( (S_{n-1}^x + S_{n+1}^x) - 2S_n^x \right) \quad (119-3)$$

$$\frac{dS_n^z}{dt} = 0 \quad (120-3)$$

در عبارت های بالا از جملات کوچک (از مرتبه دوم به بالا) صرف نظر شده است  $(S^x)^2 \gg 0, (S^y)^2 \gg 0, S^x S^y \gg 0$ . عبارت (120-3) نشان دهنده ثابت ماندن مؤلفه ی z اسپینی  $S^z$  است. با ضرب عبارت (119-3) در عدد موهومی i و جمع آن با عبارت (118-3) و به کار بردن عبارت مختلط  $S_n^* = S_n^x + i S_n^y$  در عبارت جمع، معادله ی (121-3) را نتیجه می دهد.

$$\frac{dS_n^*}{dt} = i S J^{\text{ex}} \left( 2 S_n^* - S_{n-1}^* - S_{n+1}^* \right) \quad (121-3)$$

از آنجا که به دنبال پاسخی موج گونه (موج اسپینی) برای معادله ی (121-3) هستیم، پاسخ مسئله را به شکل زیر در نظر می گیریم.

$$S_n^* = A e^{i(kna - \omega t)} \quad (122-3)$$

در اینجا مطابق شکل (31-3)، a فاصله بین دو اتم متوالی است. با قرار دادن پاسخ موج گونه (122-3) در معادله (121-3)، رابطه ی (123-3) را نتیجه می دهد (شکل (32-3) الف).

$$\begin{aligned} \hbar \omega &= \hbar S J^{\text{ex}} \left( 2 - e^{ika} - e^{-ika} \right) \\ \hbar \omega &= 2 \hbar S J^{\text{ex}} (1 - \cos ka) \end{aligned} \quad (123-3)$$

طرفین رابطه ی (123-3) در  $\hbar$  ضرب شده است. عبارت (123-3) رابطه ی پاشندگی امواج اسپینی در یک زنجیره ی مغناطیسی است که از نقطه نظر کوانتومی به

این دسته شبه ذرات مگنون گفته می شود. رابطه ی پاشندگی این شبه ذرات در حد بردارهای موج کوچک  $k \ll 0$  سهمی گون می باشد (رابطه ی (3-125)).

$$\hbar\omega = 2S J^{\text{ex}} \frac{\hbar^2 a^2}{2} k^2 \quad (124-3)$$

$$\hbar\omega = (S \hbar J^{\text{ex}}) (ka)^2 \quad (125-3)$$

$$\hbar\omega = a (ka)^2 \quad \text{و} \quad a = S \hbar J^{\text{ex}}$$

مقادیر به دست آمده از آزمایش پراکندگی نوترون برای ضریب توان دوم معادله پاشندگی مغناطیسی  $a$  (رابطه ی (3-125))، در دمای  $295 \text{ K}$  به ترتیب  $281$ ،  $500$  و  $364$  بر حسب  $\text{meV}^2$  برای  $\text{Fe}$ ،  $\text{Co}$  و  $\text{Ni}$  می باشند.

**نکته 3-20:** در بخش فونون<sup>1</sup> (کوانتای ارتعاش شبکه ای یا برانگیختگی شبکه ای) رابطه ی پاشندگی فونون با بردار موج  $k$  برای یک موج آکوستیکی به ازای  $k$  های بسیار کوچک، یک رابطه ی خطی است  $w \gg k$ ، در صورتی که رابطه ی پاشندگی مگنون (برانگیختگی اسپینی) طبق رابطه ی (3-125) یک رابطه ی سهمی گونه  $w \ll k^2$  می باشد

**نکته 3-21:** نوترون یک ذره مغناطیسی بدون بار الکتریکی است. از این رو می تواند پراکندگی هایی در بلور داشته باشد که عبارت هستند از: (1) پراکندگی کشسان که مشخص کننده ساختار بلوری همراه با ساختار منظم اتم های مغناطیسی در مواد (صفحات مغناطیسی) و از پراکندگی ناکشسان آن دو رابطه ی پاشندگی به دست می آید: (1) رابطه ی پاشندگی فونون (برانگیختگی ارتعاشات شبکه ای) (2) رابطه ی پاشندگی مگنون (به دلیل برانگیختگی مغناطیسی شبکه ای).

این شبه ذرات اسپینی به مانند کوانتش دیگر ذرات کوانتومی (فوتون و فونون،...) به صورت رابطه ی (3-126) داده می شود.

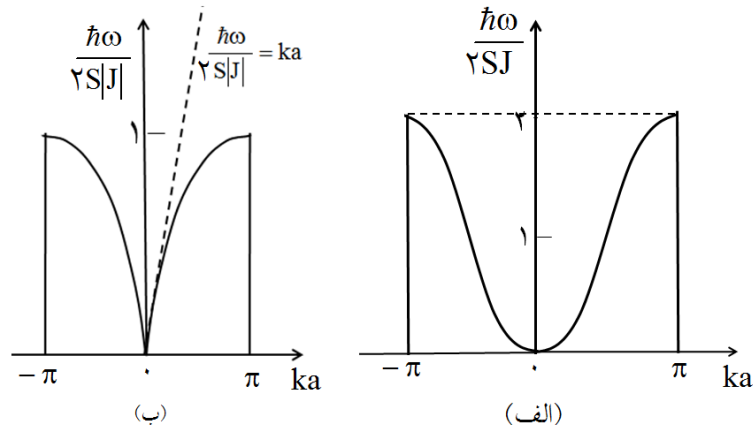
$$E_k = \hbar \omega_k + \frac{1}{2} \hbar \omega_k \quad (126-3)$$

که در رابطه ی (3-126)  $\omega_k$  و  $\hbar \omega_k$  به ترتیب ضریب اشغال (تعداد کوانتای هرانرژی)، بسامد و انرژی مگنون نامیده می شود. از آنجاکه مگنون ها به مانند فونون ها شبه ذرات بوزنی با پتانسیل شیمیایی صفر هستند از آمار بوز-انیشتمین تبعیت می کنند.

1. بخش ارتعاشات شبکه از کتاب فیزیک حالت جامد 1.

از این رو ضریب اشغال  $n_k$  به صورت رابطه‌ی (3-127) تابع دمایی دارد که با افزایش دما تعداد کوانتاهای هر انرژی افزایش می‌یابد.

$$n_k = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \quad (3-127)$$



شکل 3-32. (الف) رابطه‌ی پاشندگی یک زنجیره‌ی اسپینی با فاصله بین اتمی  $a$  یک ماده فرومغناطیس. (ب) رابطه‌ی پاشندگی یک زنجیره‌ی اسپینی با فاصله بین اتمی  $a$  با اسپین‌های مخالف یک ماده پادفرومغناطیس.

### 3-3-8 امواج اسپینی پادفرومغناطیسی

برای محاسبه مگنون‌های یک زنجیره از اتم‌های مغناطیسی با سلول واحد دو اتمی با اسپین‌های غیر هم‌جهت به مانند بخش (3-3-7) عمل می‌کنیم. در این محاسبه فقط برهم‌کنش نزدیک‌ترین همسایه‌ها با ضریب تبدیلی منفی  $J < 0$  را در نظر می‌گیریم. مکان‌های زوج مربوط به اتم‌ها با اسپین‌های بالا و مکان‌های فرد برای اتم‌ها با اسپین پایین شماره‌گذاری می‌کنیم. از این رو دو دسته معادله خواهیم داشت: یک دسته معادلات مربوط به اتم‌ها با اسپین بالا و دیگری مربوط به اتم‌ها با اسپین پایین می‌باشد. با فرض انحراف اسپینی کوچک از محور  $z$  (اثرات حرارتی بسیار کوچک است)، مؤلفه  $z$  اسپینی اتم‌های زوج  $S_z = S$  و اتم‌های فرد  $S_z = -S$  و مؤلفه‌های  $x$  و  $y$  آن‌ها بسیار کوچکتر از مقدار  $S$  می‌باشد  $S_x, S_y \ll S$ ، به معادلات زیر می‌رسیم.

$$\frac{dS_{2p}^x}{dt} = J^{\text{ex}} S (2S_{2p}^y - S_{2p-1}^y - S_{2p+1}^y) \quad (128-3)$$

$$\frac{dS_{2p}^y}{dt} = J^{\text{ex}} S (-2S_{2p}^x + S_{2p-1}^x + S_{2p+1}^x) \quad (129-3)$$

$$\frac{dS_{2p+1}^x}{dt} = J^{\text{ex}} (-S) (2S_{2p+1}^y - S_{2p}^y - S_{2p+2}^y) \quad (130-3)$$

$$\frac{dS_{2p+1}^y}{dt} = J^{\text{ex}} (-S) (-2S_{2p+1}^x + S_{2p}^x + S_{2p+2}^x) \quad (131-3)$$

در این جا موقعیت های زوج را  $S_{2p}^Z = S$  و موقعیت های فرد  $S_{2p+1}^Z = (-S)$  در نظر گرفته شده است. با ترکیب عبارات های (128-3) و (129-3) به صورت  $S_{2p}^* = S_{2p}^x + iS_{2p}^y$  و ترکیب عبارات های (130-3) و (131-3) به صورت  $S_{2p+1}^* = S_{2p+1}^x + iS_{2p+1}^y$  می رسیم.

$$\frac{dS_{2p}^*}{dt} = iS J^{\text{ex}} (2S_{2p}^* - S_{2p-1}^* - S_{2p+1}^*) \quad (132-3)$$

$$\frac{dS_{2p+1}^*}{dt} = -iS J^{\text{ex}} (2S_{2p+1}^* - S_{2p}^* - S_{2p+2}^*) \quad (133-3)$$

در پی یافتن پاسخ هایی موج گونه برای مکان های زوج به صورت  $S_{2p}^* = A e^{i(k2pa - wt)}$  و برای مکان های فرد به صورت  $S_{2p+1}^* = B e^{i(k(2p+1)a - wt)}$  در معادلات (132-3) و (133-3) هستیم. با توجه به پادفرومغناطیس بودن شبکه  $|J^{\text{ex}}| = -|J|$ ؛ ثابت  $w_0$  به صورت  $w_0 = -2J^{\text{ex}}S = 2|J|S$  در نظر گرفته و عبارات های (132-3) و (133-3) به صورت ماتریس ضرایب زیر نتیجه گرفته می شود.

$$\begin{pmatrix} w - w_0 & w_0 \cos ka \\ w_0 \cos ka & w + w_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0 \quad (134-3)$$

شرط پاسخ های غیر صفر برای ضرایب معادله (134-3)، صفر شدن دترمینان ضرایب است.

$$\begin{vmatrix} w - w_0 & w_0 \cos ka \\ w_0 \cos ka & w + w_0 \end{vmatrix} = 0 \quad (135-3)$$

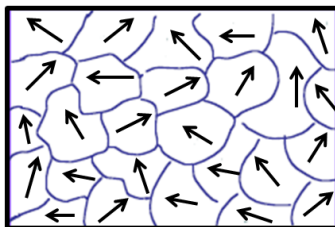
حاصل دترمینان (135-3)، عبارت  $w^2 = w_0^2(1 - \cos^2 ka)$  خواهد بود که با جذر آن به رابطه‌ی پاشندگی یک سیستم پادفرومغناطیس خواهیم رسید.

$$w = w_0 |\sin ka| \quad (136-3)$$

در حد  $ka \ll 1$  رابطه پاشندگی (136-3)، و ضرب طرفین به  $h$  به یک رابطه‌ی خطی به صورت  $hw = hw_0 |ka|$  خواهیم رسید که متفاوت با رابطه‌ی پاشندگی به دست آمده در مجموعه‌ی فرومغناطیسی که سهمی‌گون است، می‌باشد (شکل 3-3-32).

### 9-3-3 جامدهای پارامغناطیسی

در بالا سهم الکترون‌های رسانش و الکترون‌های مغزی به تنهایی در یک جامد مغناطیسی مورد بررسی قرار داده شد. ولی در واقع در یک جامد مغناطیسی به علت برهم‌کنش‌های موضعی اتم‌ها با یکدیگر حوضه‌های مغناطیسی<sup>1</sup> را به وجود می‌آورند که هر حوضه از اتم‌های بسیار زیادی تشکیل شده است که حاصل برآیند همه دوقطبی‌های هر اتم، مغناطش دائمی برای هر حوضه است. با اعمال میدان مغناطیسی  $B$  به چنین جامدی باعث هم‌سو شدن مغناطش دائمی هر حوضه با جهت میدان می‌شود. به چنین جامداتی، جامد پارامغناطیسی گفته می‌شود.



شکل 3-3-33. حوضه‌های مغناطیسی تشکیل شده در یک جامد مغناطیسی.

<sup>1</sup> Magnetic domains

**نکته 3-22:** در یک جامد مغناطیسی ایده‌آل، این حوضه‌ها دیده نمی‌شود. فقط در صورت وجود اتم‌های ناخالصی و یا نقص‌های شبکه‌ای در یک بلور است که باعث به هم خوردگی نظم مغناطیسی و تشکیل حوضه‌های مغناطیسی می‌شوند. این حوضه‌ها می‌توانند مغناطش‌هایی در جهت‌های مختلف داشته باشند که مانند قبل، با نگرش کلاسیکی می‌توان با حضور میدان  $B$  آن‌ها را بررسی نماییم. از طرفی برای گشتاورهای مغناطیسی اتم‌های داخل هر حوضه بایستی نگرش کوانتومی داشت.

### پیوست 3-1 محاسبه سهم حرکتی کمیت پذیرفتار مغناطیسی $c$ یک گاز الکترونی

برای محاسبه کمیت پذیرفتار مغناطیسی  $c$  چنین سیستمی دو راه پیشنهاد می‌شود: (1) با مشتقگیری مرتبه دوم از اختلاف انرژی سیستم  $DU^1$  نسبت به میدان مغناطیسی  $B$ ، کمیت پذیرفتاری را می‌توان نتیجه گرفت. (2) با مشتقگیری از مرتبه اول پتانسیل شیمیایی ترمودینامیکی  $W^2$  (که از مکانیک آماری به یاد داریم) نسبت به شدت میدان مغناطیسی  $H$  در واحد حجم، کمیت پذیرفتاری را به دست آورد. در ادامه سعی می‌شود که از راه حل اول به دلیل سادگی آن و بدون درگیری با مسایل آماری استفاده شود و راه حل دوم را به عنوان تمرین به عهده خواننده واگذار می‌کنیم.

#### • محاسبه سهم حرکتی پذیرفتاری مغناطیسی الکترون‌های سرگردان

در غیاب میدان  $B$ ، الکترون‌ها به ازای یک  $k_z$  ثابت، حالت‌های کوانتیزه در صفحه  $k_y$  و  $k_x$  تا یک انرژی ماکزیمم  $E_\lambda$  اشغال می‌شود (شکل (3-10)).

$$E_\lambda = E_F - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \quad (3-137)$$

همان‌طور که در بالا به آن اشاره شد در اثر میدان مغناطیسی، پیوستاری از انرژی به یک سری تراز انرژی با فاصله  $\hbar\omega_L$  با تبهگنی  $p$  تبدیل می‌گردد (شکل (3-10)). نکته مهمی که بایستی به آن اشاره نمود، طیف پیوستار در شکل (3-10) الف یک طیف گاز الکترونی در جعبه با ابعاد متناهی است که یک طیف گسسته می‌باشد، ولی در

1. سیستم در حضور و بدون حضور میدان مغناطیسی.

2.  $W = -k_B T \sum_i \ln \left( 1 + \exp\left(\frac{m - \epsilon_i}{k_B T}\right) \right)$  پتانسیل شیمیایی ترمودینامیکی یک گاز الکترونی می‌باشد.



مقایسه با گسستگی تراز لاندائو با مقدار  $hw_L$  مطابق شکل (3-10) الف این طیف پیوست دیده می‌شود.

از این رو در شکل (3-10) الف، طیف انرژی تقریباً پیوسته<sup>1</sup> (ناحیه‌ی هاشور خورده) با توزیع انرژی یکسان در مقایسه با ترازهای انرژی گسسته با گسستگی  $hw_L$  در حضور میدان  $B$ ، را نشان می‌دهد. برای محاسبه اختلاف انرژی یک سیستم گاز الکترونی (بدون برهم‌کنش) در حضور میدان  $B$  و بدون حضور میدان  $B$  بهتر است سهم انرژی بدون تغییر از محاسبات (مربوط به ترازهای پایین‌تر) که در هر دو حالت ( $B=0$  و  $B^1 0$ ) را در نظر بگیریم، از این رو سهم هاشور خورده انرژی (ناشی از عدم حضور میدان  $B$  در شکل (3-10) الف)) را با بسته‌هایی از انرژی با پهنای انرژی<sup>2</sup>  $hw_L$  جدا می‌نماییم. از طرف دیگر جمع انرژی هر بسته معادل با یک تراز لاندائو  $E_1$  با تبهگنی  $p$  می‌باشد. با مقایسه این بسته‌ها با ترازهای لاندائو و حذف سهم بدون تغییر از این بسته‌ها (بسته‌های زیرین آخرین بسته نیمه‌پر) در هنگام حضور میدان  $B$  و یا عدم آن، می‌توان انرژی‌های دو وضعیت را برای حالت بدون حضور میدان (فقط آخرین بسته نیمه‌پر) و برای حضور میدان (آخرین تراز اشغال شده لاندائو) را به ازای هر مقداری از  $k_z$  به دست آورد. با فرض این که آخرین تراز اشغال شده در صفحه  $k_x$  و  $k_y$ ، به ازای یک  $k_z$  ثابت، در حضور میدان  $B$ ،  $E_1$  باشد، ترازهای لاندائو پایین‌تر از  $E_1$  کاملاً پر هستند (که معادل آن‌ها بسته انرژی مقابل ترازها در طیف پیوسته می‌باشند) و قابل صرف نظر کردن می‌باشند. بالاترین انرژی اشغال شده در بسته‌های قسمتی پر (به ازای  $k_z$  ثابت) که مقابل تراز  $E_1$  واقع است، توسط انرژی  $E_n$  (مربوط به بالاترین سهم انرژی اشغال شده در صفحه عمود بر میدان  $B$  در فضای  $k$ ) مشخص می‌شود (شکل (3-10)). انرژی این حالت‌ها پر شده از یک حداکثری با انرژی  $E_n$  کمتر می‌باشند.<sup>3</sup>

1. به این دلیل این که الکترون آزاد در جعبه‌ای با ابعاد متناهی می‌باشد.

2. پهنای این بسته‌های انرژی وابسته به میدان مغناطیسی می‌باشد ( $hw_L = \hbar eB/m_e$ ).

3. مکان هندسی از فضای  $k$  که نسبت به محور  $z$  به یک فاصله باشد (سطح جانبی استوانه) که حداکثر سهم انرژی مربوط به این مکان هندسی متعلق به مؤلفه‌های  $k_x$  و  $k_y$  به ازای یک  $k_z$  ثابت را با  $E_n$  نمایش می‌دهیم.

مطابق شکل (3-10) الف، کمیت  $x$  به صورت  $x = E_{\lambda} - E_1$  تعریف می‌شود. متوسط انرژی آخرین بسته مقابل تراز  $E_1$  به صورت ساده از رابطه‌ی (3-138) به دست می‌آید.

$$\frac{1}{2} \frac{\hbar}{\epsilon} E_{\lambda} + \frac{\hbar}{\epsilon} E_1 - \frac{\hbar \omega_L}{2} \frac{\partial \langle x \rangle}{\partial t} = E_{\lambda} - \frac{x}{2} - \frac{\hbar \omega_L}{4} \quad (138-3)$$

برای محاسبه انرژی بالاترین بسته نیمه‌پر (به ازای یک  $k_z$  ثابت)، ابتداء بایستی سهم پرشدگی ترازهای بسته انرژی را محاسبه نمود که معادل است با حاصل ضرب نسبت پهنای اشغال شده (رابطه‌ی (3-138)) به پهنای هر بسته  $\hbar \omega_L$  در تعداد کل ترازهای انرژی هر بسته  $p$  (رابطه‌ی (3-139)).

$$p \times \frac{\hbar E_{\lambda} - (E_1 - \hbar \omega_L / 2) \langle x \rangle}{\hbar \omega_L} = \frac{p}{2} \frac{\hbar}{\epsilon} \langle x \rangle + \frac{2x}{\hbar \omega_L} \frac{\partial \langle x \rangle}{\partial t} \quad (139-3)$$

با حاصل ضرب این کسر پرشدگی در متوسط انرژی بسته نیمه‌پر و جمع روی کلیه حالت‌های  $k_z$  که معادل جمع روی کلیه مقادیر  $x$  ( $-\hbar \omega_L / 2 \leq x \leq \hbar \omega_L / 2$ ) می‌باشد، انرژی کل بسته نیمه پر را نتیجه می‌دهد که با تقسیم آن به پهنای بسته انرژی  $\hbar \omega_L$  انرژی متوسط بسته نیمه‌پر به دست می‌آید.

$$\frac{1}{\hbar \omega_L} \int_{-\hbar \omega_L / 2}^{+\hbar \omega_L / 2} \left[ \frac{\hbar E_{\lambda} - (E_1 - \hbar \omega_L / 2) \langle x \rangle}{\hbar \omega_L} \right] \frac{\hbar}{\epsilon} \langle x \rangle + \frac{2x}{\hbar \omega_L} \frac{\partial \langle x \rangle}{\partial t} dx = \frac{p}{2} \frac{\hbar}{\epsilon} E_{\lambda} - \frac{\hbar \omega_L}{3} \frac{\partial \langle x \rangle}{\partial t} \quad (139-3)$$

در محاسبات بالا به انتگرال‌هایی خواهیم رسید که حاصل آن‌ها برابر است با:

$$\int_{-\hbar \omega_L / 2}^{+\hbar \omega_L / 2} x^2 dx = \frac{(\hbar \omega_L)^3}{12} \quad \text{و} \quad \int_{-\hbar \omega_L / 2}^{+\hbar \omega_L / 2} x dx = 0$$

با جمع روی کلیه حالات انرژی  $k_z$  و با توجه به رابطه (3-32) متوسط انرژی کل سیستم برابر خواهد شد با:

$$\frac{p}{2} \frac{\hbar}{\epsilon} E_F - \frac{\hbar \omega_L}{3} \frac{\partial \langle x \rangle}{\partial t} \quad (140-3)$$

با اعمال میدان  $B$ ، این حالت‌ها تقریباً به یک سری تراز لاندائو با تبهگنی  $p$  تبدیل می‌شوند. بالاترین تراز در صورتی که با توجه به شکل (3-10) الف  $0 < x < \hbar\omega_L/2$  کاملاً پر است و در صورتی که  $0 < x < \hbar\omega_L/2$  کاملاً خالی است (باید توجه نمود که این حالت به‌ازای یک مقدار ثابت از  $k_z$ ها می‌باشد و با  $k_z$ های مختلف سهم پرشدگی متفاوت خواهد شد). انرژی متوسط آخرین تراز با در نظر گرفتن پرشدگی هر تراز لاندائو  $E_l$  با تبهگنی  $p$  و با توجه به این که  $E_\infty$  می‌تواند بالای تراز  $E_1$  یا پایین‌تر از آن باشد، خواهیم داشت:

$$E = \begin{cases} p E_1 = p(E_\infty - x) & \text{if } x > 0 \\ 0 & \text{if } x < 0 \end{cases} \quad (141-3)$$

با انتگرال‌گیری عبارت (3-141) در محدوده  $0 \leq x \leq \frac{\hbar\omega_L}{2}$  و تقسیم عبارت حاصل از انتگرال بر پهنای بسته انرژی  $\hbar\omega_L$ ، برابر است با:

$$\frac{p}{2} \frac{E_\infty}{\hbar} - \frac{\hbar\omega_L}{4} \frac{\dot{\omega}}{\omega} \quad (142-3)$$

با جمع روی کلیه حالات انرژی  $k_z$  و با توجه به رابطه‌ی (3-141) متوسط انرژی کل سیستم در حضور میدان برابر خواهد شد با:

$$\frac{p}{2} \frac{E_F}{\hbar} - \frac{\hbar\omega_L}{4} \frac{\dot{\omega}}{\omega} \quad (143-3)$$

با در نظر گرفتن ضریب  $k_F L_z / p$  به عنوان تعداد حالات در جهت  $k_z$ ، اختلاف انرژی کل سیستم در حضور میدان و بدون حضور میدان  $B$  برابر است با:

$$\begin{aligned} DU &= U(B \neq 0) - U(B = 0) \\ DU &= p \frac{k_F L_z}{2p} \frac{E_F}{\hbar} - \frac{\hbar\omega_L}{4} \frac{\dot{\omega}}{\omega} - p \frac{k_F L_z}{2p} \frac{E_F}{\hbar} - \frac{\hbar\omega_L}{3} \frac{\dot{\omega}}{\omega} \\ DU &= p \frac{k_F L_z \hbar\omega_L}{24p} \end{aligned} \quad (144-3)$$

با استفاده از روابط  $w_L = eB/m$  و  $p = m w_L L_x L_y / \phi h$  در عبارت (3-144)، اختلاف انرژی به صورت زیر بازنویسی می‌شود.

$$DU = \frac{V k_F e^2 B^2}{24 p^2 m} \quad (145-3)$$

اختلاف چگالی انرژی (اختلاف انرژی بر واحد حجم) برابر است:

$$Du = \frac{DU}{V} = \frac{k_F e^2 B^2}{24 p^2 m}$$

با دو بار مشتق گرفتن از اختلاف چگالی انرژی  $Du$  نسبت به شدت میدان مغناطیسی  $H$ ، پذیرفتاری مغناطیسی سیستم برابر خواهد شد:

$$\begin{aligned} c_L &= - \frac{m_b}{V} \frac{\partial^2 DU}{\partial B^2} = - \frac{m_b}{V} \frac{\partial^2}{\partial B^2} \frac{e^2 V k_F e^2 B^2}{24 p^2 m} \\ &= - \frac{m_b k_F e^2}{12 p^2 m} = - \frac{1}{3} m_b \frac{\hbar^2}{2m} \frac{e^2}{\hbar^2} \frac{e^2 m k_F}{e p^2 \hbar^2} \\ c_L &= - \frac{1}{3} m_b m_B^2 D(E_F) \end{aligned} \quad (146-3)$$

### پیوست 3-2 قانون سوم هوند

همان‌طور که از درس فیزیک کوانتمی II به یاد داریم، تصحیحات انجام شده در هامیلتونی نسبیتی یک سیستم تک اتمی، جملاتی به هامیلتونی کلاسیکی  $H_0$  اضافه می‌گردد که عبارت هستند از: سهم انرژی جنبشی  $-\frac{p^4}{8m_e^3 c^2}$ ، جفت‌شدگی اسپین -

مدار  $\frac{\hbar^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \nabla \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{L}$  و پتانسیل  $\frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \tilde{N}^2 V$  می‌توان هامیلتونی حاصل را

به صورت زیر نوشت.

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) - \frac{p^4}{8m_e^3 c^2} + \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \nabla \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{L} + \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \tilde{N}^2 V \quad (147-3)$$

با در نظر گرفتن پتانسیل کولنی اتمی  $V(r) = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$  عبارت جفت‌شدگی اسپین-مدار به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$H_{So} = \frac{\hbar^2}{2m_e^2 c^2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{S} \times \mathbf{L}}{\hbar^2 r^3} \quad (148-3)$$

$$H_{So} = \frac{2}{4\pi} \frac{\hbar^2 e^2}{4m_e^2} \frac{Z}{\epsilon_0 c^2} \frac{\mathbf{S} \times \mathbf{L}}{\hbar^2 r^3}$$

$$H_{So} = \frac{m_b}{4\pi} g m_B^2 Z \frac{\mathbf{S} \times \mathbf{L}}{\hbar^2 r^3} \quad (149-3)$$

در رابطه‌های بالا صورت و مخرج را در  $\hbar^2$  ضرب شده است تا بتوان برحسب عبارت مگنتون بوهر  $m_B = \frac{\hbar e}{2m_e}$  و ضریب نفوذپذیری مغناطیسی در خلاء که به صورت  $m_b = \frac{1}{c^2 \epsilon_0}$  تعریف می‌شود، باز نویسی نمود. عدد 2 در صورت کسر برابر با ضریب لاندر  $g=2$  در نظر گرفته شده است. از این رو جفت‌شدگی اسپین-مدار برای کل الکترون‌های اتمی برابر خواهد شد با:

$$H_{So} = \frac{m_b}{4\pi} \frac{g m_B^2 Z_{eff}}{\hbar^2} \mathbf{a}_i \frac{\mathbf{S}_i \times \mathbf{L}_i}{r_i^3} \quad (150-3)$$

در رابطه‌ی (150-3) با توجه به سهم اثرات استتار الکترون‌ها، به جای  $Z$  از  $Z_{eff}$  استفاده شده است که مقدارش از  $Z$  کوچک‌تر می‌باشد. متوسط این سهم از انرژی به‌ازای هر اربیتال اتمی به صورت زیر خواهیم داشت.

$$E_{SO} = \langle H_{SO} \rangle = \frac{m_b}{4\pi} \frac{g m_B^2 Z_{eff}}{\hbar^2} \mathbf{a}_i \left\langle \frac{\mathbf{S}_i \times \mathbf{L}_i}{r_i^3} \right\rangle \quad (151-3)$$

با یکسان در نظر گرفتن مقدار چشمداشتی عکس توان سوم فاصله  $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_n$  برای هر یک از اربیتال‌های اتمی می‌توان عبارت (151-3) به صورت عبارت (152-3) بازنویسی کرد.

$$E_{SO} = \langle H_{SO} \rangle = \frac{m_b g m_B^2 Z_{eff}}{4p \hbar^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_n \mathbf{a}_i \cdot \langle \mathbf{S}_i \times \mathbf{L}_i \rangle \quad (152-3)$$

در رابطه‌های بالا جمع روی کل الکترون‌های هر اتم صورت پذیرفته است. از آنجا که اسپین هر الکترون در هر جهت دارای دو ویژه حالت با ویژه مقادیر اسپینی بالا و پایین  $-\frac{1}{2}$  می‌باشد از این رو عبارت جمع در رابطه‌ی (3-152) را می‌توان به دو عبارت با اسپین بالا و پایین جدا نمود. برای این کار با در نظر گرفتن یک جهت اسپینی مشخص  $\mathbf{S}$ ،  $\mathbf{S}_i$  برای الکترون‌هایی با اسپین بالا به صورت  $\mathbf{S}_i = +\mathbf{S}$  و برای الکترون‌هایی با اسپین پایین  $\mathbf{S}_i = -\mathbf{S}$  می‌باشد.

$$E_{SO} = \frac{m_b g m_B^2 Z_{eff}}{4p \hbar^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_n \sum_{\substack{\uparrow \\ \downarrow \\ \text{(spin-up)}}} \mathbf{a}_i \cdot \langle \mathbf{S} \times \mathbf{L}_i \rangle + \sum_{\substack{\uparrow \\ \downarrow \\ \text{(spin-down)}}} \mathbf{a}_i \cdot \langle \mathbf{S} \times \mathbf{L}_i \rangle \quad (153-3)$$

به ازای هر پوسته اربیتالی با عدد کوانتومی  $l$ ، تعداد  $2l+1$  حالت کوانتومی با تبهگنی دوگانه اسپینی خواهیم داشت. برای مثال به ازای  $l=1$  (اربتال  $p$ ) تعداد 3 حالت کوانتومی با اسپین بالا و 3 حالت با اسپین پایین خواهیم داشت. حال اگر تعداد الکترون‌های آخرین پوسته اربیتالی نیمه پر و برابر با  $n$  باشد سه حالت اتفاق خواهند افتاد.

$$\dot{U} < 2l+1$$

در این شرایط آخرین پوسته اربیتالی کمتر از نیمه پر می‌باشد، بنابراین با توجه به قانون اول هوند تمامی الکترون‌های این پوسته بایستی دارای اسپین بالا باشند. از این رو عبارت جمع دوم در رابطه‌ی (3-153) برابر صفر خواهد شد (رابطه‌ی (3-154)).

$$E_{SO} = \frac{m_b g m_B^2 Z_{eff}}{4p \hbar^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_n \mathbf{a}_i \cdot \langle \mathbf{S} \times \mathbf{L}_i \rangle_{\text{(spin-up)}} \quad (154-3)$$

$$E_{SO} = l \left\langle \mathbf{S} \times \mathbf{a}_j \cdot \mathbf{L}_i \right\rangle$$

$$E_{SO} = l \left\langle \mathbf{S} \times \mathbf{L} \right\rangle \quad (155-3)$$

$$l = \frac{m_b g m_B^2 Z_{\text{eff}}}{4p \hbar^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_n \quad (156-3)$$

که در این جا  $l > 0$  می باشد. از این رو کمترین انرژی زمانی اتفاق می افتد که جمله  $\langle \mathbf{S} \times \mathbf{L} \rangle$  در رابطه ی (3-155) کمینه باشد. با در نظر گرفتن اندازه حرکت مداری کل  $\mathbf{L} = \sum_j \mathbf{L}_j$ ، انرژی جفت شدگی برابر است با:

$$E_{SO} = l \langle \mathbf{S} \times \mathbf{L} \rangle = \frac{l}{2} \left( \langle (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 \rangle - \langle \mathbf{L}^2 \rangle - \langle \mathbf{S}^2 \rangle \right) \quad (157-3)$$

با توجه به رابطه ی  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ ، عبارت (3-157) به صورت زیر بازنویسی می شود.

$$E_{SO} = l \langle \mathbf{S} \times \mathbf{L} \rangle = \frac{l}{2} \left( \langle j(j+1)\hbar^2 \rangle - \langle l(l+1)\hbar^2 \rangle - \langle s(s+1)\hbar^2 \rangle \right) \quad (158-3)$$

با مثبت بودن  $l$ ، کمینه عبارت (3-158) زمانی برقرار می شود که  $J$  کمینه باشد. مقادیر قابل حصول برای  $J$  برابر با  $l+s, l+s-1, \dots, |l-s|$  است و کمینه  $J$  برابر با  $|l-s|$  خواهد شد.

$$n > 2l+1 \quad \dot{\mathbf{u}}$$

در این شرایط آخرین پوسته اربیتال بیشتر از نیمه پر می باشد. با توجه به قانون اول هوند،  $2l+1$  حالت از الکترون هایی با اسپین بالا پر هستند و مولفه ی  $Z$  عبارت جمع برای این دسته الکترون ها با اسپین بالا برابر صفر می شود. مابقی الکترون ها با اسپین پایین طبق قانون دوم هوند بایستی بالاترین مؤلفه اندازه حرکت مداری در راستای  $Z$  را اشغال کنند. از این رو جمله جمع اول در عبارت (3-153) صفر و جمله جمع دوم غیر صفر می باشند (عبارت (3-159)).

$$E_{SO} = \frac{m_b g m_B^2 Z_{\text{eff}}}{4p \hbar^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_n \sum_i \mathbf{a}_i (-) \langle \mathbf{S} \times \mathbf{L}_i \rangle \quad (159-3)$$

(spin-down)

$$E_{SO} = l \sum_i \mathbf{a}_i \langle \mathbf{S} \times \mathbf{L}_i \rangle = l \mathbf{S} \times \sum_i \mathbf{a}_i \mathbf{L}_i$$

(spin-down) (spin-down)

$$E_{SO} = l \mathbf{S} \times \mathbf{L} \quad (160-3)$$

$$l = (-) \frac{m_b g m_B^2 Z_{\text{eff}}}{4p \hbar^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_n \quad (161-3)$$

در رابطه‌ی (160-3)  $l < 0$  می‌باشد. از این رو حداقل انرژی زمانی اتفاق می‌افتد که عبارت  $\dot{S} \times \dot{L}$  در رابطه‌ی (160-3) مثبت و بیشترین مقدار ممکن را دارا باشد. از این رو با در نظر گرفتن عبارت (158-3) مقادیر  $J$  قابل حصول عبارتند از:  $j = |l - s|, |l - s| + 1, l + s$  که با توجه به این که به دنبال کمینه انرژی هستیم و از طرفی  $l < 0$  می‌باشد، مقدار  $J$  بایستی بیشترین مقدار را دارا باشد که برابر با  $J = l + s$  است.

$$n = 2l + 1 \quad \dot{n}$$

اگر آخرین پوسته درست تا نیمه‌پر باشد. هر دو عبارت جمع برابر صفر خواهد شد. از این رو مقدار جفت‌شدگی برابر صفر می‌شود.

### پوست 3-3 محاسبه ضریب لانده $g$

مقدار  $g$  به طور دقیق‌تر از طریق QED<sup>1</sup> قابل محاسبه می‌باشد. که در این جا به روش نیمه کلاسیکی تری آن را محاسبه خواهیم نمود. با توجه به رابطه‌ی مغناطش با اندازه حرکت زاویه‌ای کل روابط زیر را می‌توان نتیجه گرفت شکل (34-3).  
و از طرفی خواهیم داشت:

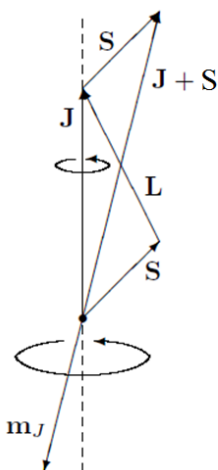
$$m_J = m_S + m_L = -2m_B \dot{S} - m_B \dot{L} \quad (162-3)$$

$$m_J = -m_B (2\dot{S} + \dot{L}) = -m_B (\dot{J} + \dot{S}) \quad (163-3)$$

به راحتی می‌توان نشان داد که عبارت مغناطش  $m_J$  با هامیلتونی جابه‌جا نمی‌شود. از این رو مغناطش  $m_J$  با زمان تحول می‌یابد (شکل (34-3)). با توجه به شکل (34-3) مشاهده می‌شود مغناطش حول محور  $\dot{J}$  دوران می‌کند. با متوسط‌گیری زمانی از مغناطش می‌توان مغناطش مشاهده شده را محاسبه نمود. مقدار مغناطش مشاهده شده  $m_{\text{obs}}$  برابر با تصویر مغناطش حول محور  $\dot{J}$  می‌باشد. در این جا  $\dot{J}$  اندازه حرکت زاویه‌ای کل می‌باشد که یک ثابت حرکت است (یعنی عملگر آن با هامیلتونی جابه‌جا می‌شود).

<sup>1</sup>. Quantum Electrodynamics





شکل 3-34. نمایش برداری اندازه حرکت زاویه ای کل  $\dot{J}$  و اندازه حرکت مداری  $\dot{L}$  و نمایش برداری اسپین  $\dot{S}$ .

$$m_{\text{obs}} = \frac{(m_J \times \dot{J}) \cdot \dot{J}}{J \times J} = -m_B \frac{[(\dot{J} + \dot{S}) \times \dot{J}] \cdot \dot{J}}{J \times J} \quad (164-3)$$

$$m_{\text{obs}} = -m_B \dot{J} - m_B \frac{[\dot{S} \times \dot{J}] \cdot \dot{J}}{J \times J} \quad (165-3)$$

$$m_{\text{obs}} = -m_B \dot{J} - \frac{m_B}{2} \frac{(\dot{J} - \dot{S})^2 - \dot{J} \times \dot{J} - \dot{S} \times \dot{S}}{J \times J} \quad (166-3)$$

از طرفی داریم  $\dot{J} - \dot{S} = \dot{L}$

$$m_{\text{obs}} = -m_B \dot{J} - \frac{m_B}{2} \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{j(j+1)} \dot{J} = -g m_B \dot{J} \quad (167-3)$$

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \quad (168-3)$$

که مقدار  $g$  بین محدوده صفر و دو قرار می گیرد  $0 \leq g \leq 2$ . مقدار  $g$  برای اسپین الکترون به روش QED برابر خواهد بود با:

$$g = 2 + \frac{a}{p} + O(a)^2 \quad (168-3)$$

که در اینجا  $a$  همان ساختار ریز می‌باشد که مقدار آن برابر است با:  $a \approx \frac{1}{137}$

**مسائل:**

3-1. با توجه به تصحیح‌های ترمودینامیکی کوانتومی می‌توان نشان داد در دماهای پایین‌تر از دمای فرمی  $T \ll T_F$  پذیرفتاری مغناطیسی به صورت زیر می‌باشد.

$$c = m_B^2 D(e_F) \frac{e}{\hbar} - \frac{p^2}{12} \frac{\pi^2}{\epsilon T_F} \frac{\hbar^2}{m} \quad (169-3)$$

راهنمایی: برای به‌دست آوردن رابطه‌ی (3-169) می‌توان از عبارت انتگرال زمر فیلد رابطه‌ی (3-170) استفاده نمود.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G(e) f(e) de = \int_{-\infty}^m G(e) de + \frac{p^2}{6} (k_B T)^2 \frac{\pi^2}{\epsilon} \frac{dG(e)}{de} \Big|_{e=m} + O(T^4) \quad (170-3)$$

که در آن  $m$  پتانسیل شیمیایی است و  $f(e)$  تابع فرمی دیراک و  $G(e)$  می‌تواند هر کمیت فیزیکی باشد که در این‌جا تابع چگالی حالت در نظر گرفته شده است.

3-2. پذیرفتاری دیامغناطیسی مداری یک گاز هیدروژنی با چگالی  $10^{20} m^{-3}$  در حالت پایه را با پذیرفتاری پارامغناطیس اسپینی در دمای 100 کلوین مقایسه کنید.

3-3. پارامغناطیس دستگامی با  $S=1$  را در نظر بگیرید. الف) گشتاور  $m$  و تراکم  $n$  را به صورت تابعی از میدان مغناطیسی و دما به‌دست آورید. ب) نشان دهید که در حد  $k_B T \ll mB$ ، این نتیجه به صورت  $2M \approx (2nm^2/3k_B T)B$  است.

3-4. یک ماده مغناطیسی با اسپین  $\frac{1}{2}$  در نظر بگیرید که مغناطش خودبه‌خودی آن را به صورت  $M = Nm_B \tanh(x)$  می‌توان نوشت که  $x = m_B |M| / k_B T$  (در رابطه‌ی (3-59) به جای  $B$  میدان متوسطه  $|M|$  قرار داده‌ایم)؛ ابتدا نشان دهید دمای کوری آن که به صورت  $T_C = Nm_B^2 / m_H$  می‌باشد و تعیین کنید در چه کسری از دمای کوری مغناطش به 80 درصد و 50 درصد مقدارش در دمای  $T=0$  کاهش پیدا می‌کند.

3-5. یک اکسید مغناطیسی دارای دمای گذار 150K است. اگر حامل‌های مغناطیس دارای گشتاور مغناطیسی  $m_B$  و اسپین  $S=1/2$  باشد، نسبت مغناطش در دمای 300K به مقدار آن در دمای صفر کلوین را معین کنید. می‌توانید فرض کنید که مدل میدان متوسط در این مورد مناسب است.

3-6. یک ماده مغناطیسی را در نظر بگیرید که دارای  $N$  یون مغناطیسی بر واحد حجم است که هر یک گشتاور مغناطیسی  $m_B$  و اسپین  $S=1/2$  دارد و  $g=2$  می‌باشد. با استفاده از نظریه میدان متوسط تابع بریلوئن  $B_{1/2}(x)$  را در  $x$  های بزرگ برآورد کنید تا نشان دهید که مغناطش  $M$  بر حسب دماهای پایین به صورت زیر تغییر می‌کند.

$$M(T) = M_s(1 - e^{-a/T})$$

که مقدار  $a$  توسط گشتاور مغناطیسی و دمای کوری مشخص می‌شود. هم‌چنین با بسط  $B_{1/2}(x)$  برای  $x$  های کوچک نشان دهید که در نظریه میدان متوسط مغناطش در نزدیکی دمای کوری به صورت  $(T_C - T)^{1/2}$  تغییر می‌کند.

3-7. نشان دهید که اگر از نظریه کلاسیکی (لانژون) برای پارامغناطیس استفاده کنیم، مغناطش  $M(T)$  در نزدیکی  $T=0$  به صورت  $M(T) = M_s - g\Gamma$  تغییر خواهد کرد. توضیح دهید چرا نتیجه‌ی میدان متوسط کلاسیک به رفتار مشاهده شده در تجربه نزدیک‌تر است تا نتیجه میدان متوسط کوانتومی مساله (3-6)؟

3-8. سلول واحد  $NiFe_2O_4$  دارای هشت یون  $Ni^{2+}$  در مکان‌های  $B$  و شانزده یون  $Ni^{3+}$  است که به طور مساوی بین مکان‌های  $A$  و  $B$  توزیع شده‌اند. برهم‌کنش تبدلی غالب، برهم‌کنش منفی (پاد فرومغناطیسی)  $AB$  می‌باشد. تکانه زاویه‌ای را فرونشاندن روی یون‌های  $Ni^{2+}$  فرض کنید ( $L=0$ ). نشان دهید در حالتی که نظم کامل در دماهای پایین برقرار باشد، گشتاور به‌ازای هر سلول واحد در  $Zn_{0.25}Ni_{0.75}Fe_2O_4$  چه می‌تواند باشد؟ آرایش الکترونی لایه بیرونی  $Zn^{2+}$  به صورت  $3d^{10}$  می‌باشد و به‌طور تجربی معلوم شده است که یون  $Zn^{2+}$  به مکان‌های  $A$  می‌رود و یون‌های  $Fe^{3+}$  را به مکان‌های  $B$  جابه‌جا می‌شود.

- 9-3. یون‌های مغناطیسی با  $S = 5/2$  و  $L = 0$  به اندازه‌ی  $0.5 \text{ nm}$  از هم فاصله دارند. انرژی مغناطیسی یک یون را که از میدان همسایه‌اش ناشی می‌شود محاسبه کنید. تقریباً در چه دمایی گشتاورها در اثر این نوع برهم‌کنش هم‌راستا می‌شوند.
- 10-3. با کاربرد قواعد هوند، حالت پایه‌ی الف)  $\text{Eu}^{2+}$ ، با پیکربندی  $4f^7 5s^2 5p^6$  (ب)  $\text{Yb}^{3+}$  (ج)  $\text{Tb}^{3+}$  را با استفاده از جدول (3-7) را به دست آورید.
- 11-3. پذیرفتاری مغناطیسی نمکی را که دارای یک گرم مول یون  $\text{Cr}^{2+}$  است در دمای 300 کلوین محاسبه کنید. یون  $\text{Cr}^{2+}$  در پوسته‌ی  $3d$ ، چهار الکترون دارد.
- 12-3. میدان مغناطیسی به نمکی که حاوی یون  $\text{Cu}^{2+}$  است اعمال می‌شود. یون  $\text{Cu}^{2+}$  در پوسته  $3d$  خود 9 الکترون دارد، چه میدان مغناطیسی باید به نمکی که حاوی  $\text{Cu}^{2+}$  است اعمال شود تا دمای  $99/1$  کلوین درصد یون‌های در پایین‌ترین حالت انرژی باشد.
- 13-3. پذیرفتاری دیامغناطیسی هیدروژن اتمی که برابر با  $2/36 \cdot 10^6 \text{ cm}^3 / \text{mole}$  می‌باشد را به دست آورید. در این محاسبه تابع موج اتم هیدروژن را به صورت  $y = (\rho a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a_0}$  در نظر بگیرید. که در آن  $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$  شعاع بور می‌باشد. چگالی بار الکترونی برابر با  $r = -e|y|^2$  است.
- 14-3. الف) ابتدا با استفاده از روابط (3-84) و (3-85)، رابطه (3-86) را نتیجه بگیرید.
- 15-3. با توجه به رابطه‌ی بین میدان متوسط داخلی فرومغناطیس و دمای کوری، این میدان را برای آهن که دارای دمای کوری  $1043 \text{ K}$  و گشتاور مغناطیسی  $2/2$  مگنتون بور می‌باشد، محاسبه کنید.
- 16-3. دمای کوری برای اکسید اورپیم که فرومغناطیس است  $70 \text{ K}$  می‌باشد. یون اورپیم دارای  $J = 7/2$  و  $g = 2$  است. با فرض مدل میدان متوسط داخلی، نسبت مغناطیدگی در میدان  $10^2 \text{ T}$  را در  $300 \text{ K}$  به  $0 \text{ K}$  را حساب کنید.
- 17-3. اندازه یک میدان مولکولی  $B_m$  در آهن را برحسب واحد تسلا تخمین بزنید. میدان  $B$  ناشی از مغناطش سیستم را با عبارت  $m_B M$  مقایسه کنید. از این رو توضیح دهید چگونه می‌توان خواص فرومغناطیسی آهن را توسط مفهوم تبادلی توضیح داد. چگالی آهن برابر است با  $7873$  کیلوگرم بر متر مکعب، جرم اتمی

آهن 55/847، دمای کوری برابر است با  $T_C = 1043\text{K}$  و هر اتم یک گشتاور مغناطیسی به طور تقریبی  $2/2 m_B$  را حمل می‌کند. 18-3. با توجه به شکل (3-23) نشان دهید برای مولکول هیدروژن  $H_2$  انرژی پیوندی به اندازه  $D_- = -\frac{3}{4}J$  و انرژی ضدپیوندی به اندازه  $D_+ = +\frac{1}{4}J$  از انرژی تک اتم هیدروژن اختلاف دارند.

19-3. مدل وایس را برای یک سیستم با  $S > \frac{1}{2}$  تعمیم دهید. نشان دهید مغناطش  $M$  درست زیر دمای  $T_C$  برابر است با.

$$\frac{M}{M_s} = \frac{30(S+1)^2(T_C - T)^{1/2}}{3((S+1)^2 + S^2)T_C}$$

نشان دهید در دمای  $T_C$  یک ناپوستگی در ظرفیت گرمایی دیده می‌شود که برابر است با:

$$DC = \frac{5}{2}nk_B \frac{(2S+1)^2 - 1}{(2S+1)^2 + 1}$$

در محاسبه بالا بسط بریلوئن زیر مورد نیاز است.

$$B_J(y) = \frac{1}{2} \frac{y}{(2S)^2} - \frac{1}{24} \frac{y^3}{(2S)^4} + O(y^5) \quad y \ll 1$$

20-3. میدان مولکولی در هر زیر شبکه از یک سیستم پادمغناطش به صورت زیر داده می‌شود:

$$B_+ = -GM_+ - |M_-|$$

$$B_- = -GM_- - |M_+|$$

در این جا  $G$  یک ثابت است که بیان کننده سهم میدان مولکولی از همان زیر شبکه است. طبق بخش (3-8) نشان دهید روی هر زیرمجموعه مغناطیسی برابر خواهد بود با

$$M_{\pm} = M_s B_J \left( \frac{g_r m_B J (GM_{\pm} + |M_m|)}{k_B T} \right)$$

از این رو نشان دهید دمای نل (دمایی که در آن دما مغناطش هر یک از زیر شبکه‌ها ناگهان ناپدید می‌شود)، برابر است با:

$$T_N = \frac{n(|\mu| - G)m_{\text{eff}}^2}{3k_B}$$

همچنین نشان دهید که پذیرفتاری آن متناسب  $(T - q)^{-1}$  است که در آن  $q$  توسط رابطه زیر داده می‌شود.

$$q = - \frac{n(|\mu| + G)m_{\text{eff}}^2}{3k_B}$$

$T_N$  اگر  $|q|$  و تنها اگر  $G=0$  باشد.

3-21. الف) حداقل انرژی برای یک زنجیره اسپینی فرومغناطیس  $N$  اتمی در دمای صفر مطلق برابر است با  $E_0 = -2NJ^{\text{ex}}S^2$ . ب) اولین انرژی حالت برانگیخته چنین سیستمی را به دست آورید.

### سؤالات تستی:

3-1. کدام عبارت نادرست می‌باشد.

الف)  $\vec{m}_L = g\vec{L}$

ب) گشتاور مغناطیسی ناشی از حرکت مداری الکترون در جهت اندازه حرکت مداری می‌باشد.

ج) گشتاور مغناطیس بور برابر با  $m_B = eh/2m$  است.

د) فرکانس لامور برابر با  $\omega_L = eB/m_e$  است.

3-2. پذیرفتاری مغناطیسی پارامغناطیس پائولی برابر است با:

ب)  $c = \frac{mm_B^2 m_H}{p^2 h^3} \sqrt{2me_F}$

الف)  $c = \frac{mm_B^2 m_H T}{p^2 h^3}$

د)  $c = \frac{mm_B^2 m_H}{p^2 h^3} \frac{1}{T}$

ج)  $c = \frac{mm_B^2 m_H e_F}{p^2 h^3}$

3-3. کدام گزینه صحیح نمی‌باشد.

الف) مساحت مابین دو تراز متوالی لاندائو برابر با  $\frac{2mpw_L}{h}$  است که  $w_L$  فرکانس لامور می باشد.

ب) تعداد تبهگنی ترازهای لاندائو برابر با  $2 \frac{mw_L L_x L_y}{2ph}$  است

ج) با افزایش میدان مغناطیسی تبهگنی تراز کاهش می یابد.

د) هر سه صحیح می باشند.

4-3. کدام گزینه صحیح می باشد

الف) پذیرفتاری مغناطیسی لاندائو با جذر انرژی فرمی متناسب می باشد.

ب) پذیرفتاری مغناطیسی لاندائو برابر  $c_L = -\frac{1}{3}c_p$  است.

ج) با در نظر گرفتن ساختار نواری پذیرفتاری مغناطیسی کل برابر

$$c = c_p \frac{e}{\hbar} - \frac{1}{3} \frac{m m_B \sqrt{2m}}{e m} \frac{\dot{u}}{\dot{u}}$$

د) هر سه صحیح می باشد.

5-3. کدام یک از عبارت های زیر پذیرفتاری مغناطیسی پائولی است.

$$c = \frac{m m_B^2 m_H \sqrt{2m}}{p^2 \hbar^3} e_F^{2/3} \quad \text{ب)} \quad c = \frac{m m_B^2 m_H \sqrt{2m}}{p^2 \hbar^3} e_F^{1/2} \quad \text{الف)}$$

$$c = \frac{m m_B^2 m_H \sqrt{2m}}{p^2 \hbar^3} e_F \quad \text{د)} \quad c = \frac{m m_B^2 m_H \sqrt{2m}}{p^2 \hbar^3} e_F^{1/3} \quad \text{ج)}$$

6-3. با نگاه نیمه کلاسیکی به یک مجموعه مغناطیسی با قطبش  $\dot{m}$  به ازای هر اتم،

مغناطش یک مجموعه برابر است.

$$\langle M \rangle = \frac{e \hbar}{2m} \frac{N}{V} \coth\left(\frac{m_B}{k_B T}\right) - \frac{k_B T}{m_B} \frac{\dot{u}}{\dot{u}} \quad \text{الف)}$$

$$\langle M \rangle = \frac{e \hbar}{2m} \frac{N}{V} \coth\left(\frac{k_B T}{m_B}\right) - \frac{m_B}{k_B T} \frac{\dot{u}}{\dot{u}} \quad \text{ب)}$$

$$\langle M \rangle = \frac{e \hbar}{2m} \frac{N}{V} \coth\left(\frac{k_B T}{m_B}\right) \frac{\dot{u}}{\dot{u}} \quad \text{ج)}$$

$$\langle M \rangle = \frac{\hbar N \mu_B}{2V} \coth\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right) \quad (\text{ب})$$

7-3. کدام یک از عبارتهای زیر نشان دهنده قانون کوری است.

$$c_m = \frac{C}{T - T_C} \quad (\text{ب}) \qquad c_m = \frac{C}{T} \quad (\text{الف})$$

$$c_m^{-1} = \frac{C}{T - T_C} \quad (\text{د}) \qquad c_m^{-1} = \frac{C}{T} \quad (\text{ج})$$

8-3. کدام یک از عبارتهای زیر نشان دهنده قانون کوری-وایس است.

$$c_m = \frac{C}{T - T_C} \quad (\text{ب}) \qquad c_m = \frac{C}{T} \quad (\text{الف})$$

$$c_m^{-1} = \frac{C}{T - T_C} \quad (\text{د}) \qquad c_m^{-1} = \frac{C}{T} \quad (\text{ج})$$

9-3. کدام یک از عبارتهای زیر دمای کوری یک ماده فرومغناطیس است. در این جا  $\mu$  یک کمیت ثابت که بیانگر قدرت میدان مؤثر مولکولی مجموعه می باشد.

$$T_c = \frac{\hbar N \mu^2}{2V 3k_B} \quad (\text{ب}) \qquad T_c = \frac{\hbar N \mu}{2V 3k_B m} \quad (\text{الف})$$

$$T_c = \frac{\hbar N \mu}{2V 3k_B m} \quad (\text{د}) \qquad T_c = \frac{\hbar N \mu^2}{2V 3k_B} \quad (\text{ج})$$

10-3. اتم  $\text{Pr}^{3+}$  با ساختار اتمی  $4f^2 5s^2 p^6$  حالت پایه (تراز اصلی) آن برابر است با:

$${}^4I_{9/2} \quad (\text{ب}) \qquad {}^2F_{5/2} \quad (\text{الف})$$

$$\text{هیچ کدام} \quad (\text{د}) \qquad {}^3H_4 \quad (\text{ج})$$

11-3. کدام عبارت زیر در خصوص برهم کنش مستقیم دو قطبی-دو قطبی است:

$$E = \frac{m_H}{4\pi r^3} \frac{e^2}{\hbar} \mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2 - \frac{3}{r^3} (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2) \cdot (\mathbf{r}_2 \times \mathbf{r}_1) \quad (\text{الف})$$



$$E = \frac{m_H}{4\pi r^3} [\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2] \quad (\text{ب})$$

$$E = \frac{3m_H}{4\pi r^3} [(\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2)(\mathbf{r}_2 \times \mathbf{r}_1)] \quad (\text{ج})$$

$$E = \frac{m_H}{4\pi r^3} \frac{e\mathbf{r}}{g} \times \mathbf{r}_2 - \frac{3}{r^2} (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2)(\mathbf{r}_2 \times \mathbf{r}_1) \quad (\text{د})$$

12-3. کدام یک از عبارتهای زیر در خصوص هامیلتونی مدل هایزنبرگ در خواص

مغناطیسی مواد درست می باشد.

(الف) منشاء آن فقط برهم کنش الکترواستاتیکی است.

(ب) منشاء آن فقط برهم کنش اسپینی است.

(ج) منشاء آن هر دو برهم کنش الکترواستاتیکی و اسپینی است.

(د) منشاء آن اصل طرد پائولی نمی باشد.

13-3. کدام یک از عبارتهای زیر در خصوص ضریب تبادلی مولکول هیدروژن

صحیح می باشد.

(الف) این ضریب فقط به تابع موج تک اتمی اتم هیدروژن بستگی دارد.

(ب) این ضریب به تابع موج الکترونی کل سیستم دو الکترونی مولکول هیدروژن بستگی دارد.

(ج) این ضریب به اختلاف انرژی حالت تک گانه و سه گانه بستگی دارد.

(د) در اتم هیدروژن حالت ضریب تبادلی منفی است.

14-3. کدام یک از عبارتهای زیر عبارت دمای نل برای یک مجموعه ی

یادفرومغناطیس است.

$$T_N = \frac{n| |}{3k_B m_{\text{eff}}} \quad (\text{ب})$$

$$T_N = \frac{n| | m_{\text{eff}}}{3k_B} \quad (\text{الف})$$

$$T_N = \frac{n| |}{3k_B m_{\text{eff}}^2} \quad (\text{د})$$

$$T_N = \frac{n| | m_{\text{eff}}^2}{3k_B} \quad (\text{ج})$$

15-3. کدام یک از عبارتهای زیر نشان دهنده پذیرفتار مغناطیسی یک مجموعه ی

یادفرومغناطیس می باشد.

$$c \gg \frac{1}{T + T_N} \quad (\text{ب})$$

$$c \gg \frac{1}{\sqrt{T - T_N}} \quad (\text{د})$$

$$c = \frac{1}{T - T_N} \quad (\text{الف})$$

$$c = \frac{1}{\sqrt{T + T_N}} \quad (\text{ج})$$

# فصل چهارم

## خواص ابررسانایی

### هدف کلی

این فصل به معرفی خواص ابررسانایی در حد آشنایی می‌پردازد. هم‌چنین سعی می‌شود به تفاوت‌های موجود بین یک ابررسانا و یک فلز ایده‌آل با رسانش بی‌نهایت پرداخته شود.

### هدف‌های یادگیری

دانشجو پس از مطالعه این فصل باید،

1. با تاریخچه کشف ابررسانا آشنا شود.
2. با تفاوت‌های بین فلزات بهنجار، فلزات ایده‌آل و ابررساناها آشنا شود.
3. با اثر مایسنر، دمای گذار و میدان‌های مغناطیسی بحرانی در ابررساناها آشنا شود.
4. با ابررساناهای نوع اول و دوم و تفاوت‌های مابین چگالی الکترونی در ابررسانا با چگالی الکترونی در فلزات معمولی آشنا شود.
5. با کمیت‌های مانند عمق نفوذ میدان مغناطیسی در ابررسانا و طول هم‌دوسی آشنا شود.
6. با کوانتیزه شدن میدان مغناطیسی در حلقه ابررسانا و دلیل به تله افتادن میدان در حلقه، آشنا شود.
7. با زوج کوپر و گاف انرژی ابررساناها ناشی از تشکیل زوج کوپر آشنا شود.
8. با ناپیوستگی ظرفیت گرمایی ویژه فلزات در دمای بحرانی آشنا شود.

## مقدمه

اهمیت ذخیره‌سازی انرژی، تولید انرژی‌های تجدیدپذیر، کم کردن آلودگی‌های محیط‌زیستی، کم کردن اتلاف انرژی، کوچک سازی قطعات الکترونیکی، افزایش سرعت انتقال اطلاعات، ذخیره‌سازی اطلاعات و غیره از دغدغه‌های مهم دانشمندان امروزی هستند. با کشف ابررسانا بیش از یک قرن و آشنایی با خواص آن، دانشمندان و مهندسين را واداشت که از آن برای حل برخی از دغدغه‌های امروزه به‌کار برند. اهمیت کاربردهای متنوع ابررسانا در صنایع مختلف، به دلیل مشکلاتی است که می‌توان به مواردی چند از آن‌ها را اشاره نمود. سهم عظیمی از انرژی که توسط نیروگاه‌ها ایجاد می‌شود، در هنگام انتقال به شهرها و توزیع آن‌ها، اتلاف می‌شود. نوسانات شدت مصرف برق در ساعات شبانه‌روز و اهمیت ذخیره‌سازی انرژی نیروگاه‌ها (به صورت انرژی مغناطیسی) در ساعات کم مصرف و استفاده از آن در ساعت پر مصرف، می‌توان مصرف انرژی را مدیریت نمود. از طرفی معضل حجم بالا و سنگینی موتورهای پر قدرت در صنایع کشتی‌سازی و زیردریایی‌ها، توجهی بسیاری از مهندسين و طراحان را بر آن داشت تا تلاش نمایند با استفاده از ابررسانا، موتورهای با همان مشخصات (یا بیشتر) ولی با ابعاد و وزن بسیار کمتر، طراحی نمایند. در علوم پزشکی، تصویربرداری تشدید مغناطیسی NMR نیز یکی از کاربردهای مهم ابررسانا در صنایع مهندسی پزشکی می‌باشد.

موارد مذکور، جزء کوچکی از علل مصارف ابررسانا در صنعت و پزشکی می‌باشند. هر چند تا کنون قادر به ساخت ابررساناهایی که بتواند در دمای اتاق مورد استفاده قرار بگیرد، نشده‌ایم ولی یقیناً با دسترسی به چنین ابررساناهایی، انقلاب بزرگی در صنعت، پدیدار می‌گردد. در این فصل با توجه به ظرفیت کتاب، سعی شده است که به معرفی پدیده‌ی ابررسانایی در حد آشنایی بپردازد.

## 4-1 فلزات بهنجار و ابررساناها

هدایت الکتریکی در برخی مواد از کمیت‌های بسیار مهمی است که از ابتدا قابل توجه دانشمندان بوده است. همان‌طور که در نظریه‌ی نواری نشان داده شد، الکترون‌های یک شبکه منظم یونی در دمای صفر مطلق هیچ‌گونه پراکندگی توسط

شبکه، احساس نمی‌کنند و مقاومتی صفر و یا رسانندگی بی‌نهایت برای این شبکه می‌توان متصور بود. با افزایش دما (ایجاد ارتعاشات شبکه‌ای) مقاومت الکتریکی غیر صفری را در فلزات پدید می‌آورد. به این دسته از فلزات، فلزات ایده‌آل نامیده می‌شوند.

با توجه به این که ما نمی‌توانیم شبکه‌ای بدون نقص و ناخالصی داشته باشیم بنابراین این فلزات مقاومت ذاتی در مقابل جریان الکتریکی حتی در دمای صفر مطلق خواهند داشت که به آن‌ها فلزات بهنجار (معمولی) گفته می‌شود.

تجربه آزمایشگاهی نشان می‌دهد مقاومت ویژه فلزات بهنجار ۲ در اثر کاهش دما، کاهش می‌یابند. همان‌طور که در بالا اشاره شد عوامل ایجاد مقاومت الکتریکی در فلزات ناشی از پراکندگی الکترون‌ها با: فونون‌ها (ارتعاشات شبکه‌ای)<sup>۱</sup>، ناخالصی‌ها، ناکاملی‌ها، درفتگی‌های شبکه‌ای و ... می‌باشند. لازم به ذکر است در دماهای بالا سهم پراکندگی الکترون‌ها ناشی از فونون‌ها از دیگر پراکندگی‌ها، قابل ملاحظه‌تر می‌باشد و در مقابل در دماهای بسیار پایین سهم دیگر عوامل در پراکندگی الکترون‌ها از پراکندگی فونون‌ها از اهمیت بالایی برخوردار می‌شود.

در مشاهدات تجربی، سه نوع رفتار در تغییرات مقاومت الکتریکی به‌ازای تغییرات دمایی دیده می‌شود. در هر سه نوع تغییرات در دمای بالا یکسان می‌باشند<sup>۲</sup> و عمده‌ی تغییرات در دمای پایین است که توسط روند تغییرات آن می‌توان فلزات را دسته‌بندی نمود:

1) مقاومت ویژه تا نزدیکی‌های دمای صفر کلونین بطور پیوسته متناسب با  $T^5$  کاهش می‌یابد (رابطه (4-1)). این کاهش ناشی از پراکندگی الکترون‌ها با فونون‌ها می‌باشد. مقاومت ویژه حداقلی مشاهده شده در نزدیکی‌های دمای صفر مطلق  $T_0$

۱. از نقطه نظر کلاسیکی، با افزایش دما به دلیل افزایش نوسانات یون‌های شبکه، پیرامون نقطه تعادلی‌شان، سطح مقطع پراکندگی الکترون‌ها با یون‌ها افزایش می‌یابد. از نگاه کوانتومی با افزایش دما تعداد شبه ذرات کوانتومی فونونی افزایش می‌یابد که با افزایش جمعیت این شبه ذرات، افزایش احتمال پراکندگی‌شان با الکترون‌ها را سبب می‌شود. از این‌رو با کاهش دما سهم این پراکندگی کاهش می‌یابد.

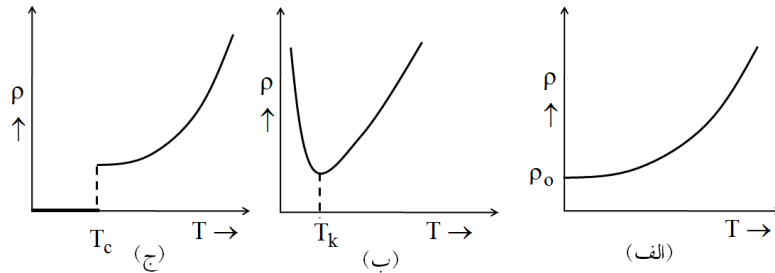
۲. که همان ناشی از پراکندگی فونونی است که غالب بر هر نوع پراکندگی می‌باشد

به سبب دیگر عوامل پراکندگی ذکر شده در بالا (ناخالصی‌ها، ناکاملی‌ها و درفتگی‌های شبکه‌ای) می‌باشد. نتایج آزمایشگاهی در دماهای پایین نشان‌دهنده عدم وابستگی دمایی این نوع پراکندگی‌ها است<sup>۱</sup>. به این دسته فلزات، فلزات بهنجار (معمولی) گفته می‌شود (شکل (1-4) الف).

$$r = r_0 + BT^5 \quad (1-4)$$

به فلزاتی که  $r_0$  آن‌ها برابر صفر شوند<sup>۲</sup>، آن‌ها را فلزات ایده‌آل (یا کامل) می‌نامند.

2) مقاومت ویژه برخی از فلزات در اثر کاهش دما ابتدا کاهش می‌یابد ولی در یک دمای خاص به نام دمای کاندو  $T_k$  مقاومت ویژه شروع به افزایش لگاریتمی می‌نماید (شکل (1-4) ب)). این رفتار را در فلزاتی دیده می‌شود که دارای ناخالصی مغناطیسی (عناصر واسطه با اربیتال قسمتی پر  $d$  و  $f$ ) هستند. در دماهای بسیار پایین سهم پراکندگی اسپینی الکترون‌های رسانش با دو قطبی مغناطیسی ناخالصی‌ها  $\vec{m}$  قابل ملاحظه خواهد بود که باعث افزایش مقاومت الکتریکی به ازای  $T < T_k$  می‌باشد.



شکل 1-4. مقاومت ویژه برای الف) فلزات معمولی ب) فلزاتی که ناخالصی مغناطیسی دارند ج) اَبَررسانا

3) فلزاتی که در اثر کاهش دما مقاومت ویژه‌شان مانند رابطه‌ی (1-4) کاهش می‌یابند ولی به یک‌باره در یک دمای بحرانی  $T_c$  (دمای گذار) صفر می‌شود، این

۱. به جز ناخالصی‌های مغناطیسی که به اثر کاندو معروف می‌باشد.  
 ۲. به معنی نبود وجود هیچ‌گونه عوامل پراکندگی فیزیکی مانند ناخالصی، ناکاملی، درفتگی شبکه‌ای است.

دسته از فلزات بهنچار به ازای  $T < T_C$  به اَبَرسانا تبدیل می‌شوند (شکل (4-1) ج). که در ادامه به این دسته مواد خواهیم پرداخت.

یکی از بزرگترین کشفیات علم فیزیک در اوایل قرن بیستم، کشف پدیده‌ی اَبَرسانایی در دمای پایین بود. توصیف این پدیده کاملاً کوانتومی است که در مقیاس ماکروسکوپی قابل مشاهده می‌باشد. با توجه به این که پدیده‌ی اَبَرسانایی در دماهای پایین قابل رویت می‌باشد، بنابراین در اوایل قرن بیستم برای کشف روش‌های تجربی جهت کاهش دما تا نزدیکی‌های دمای مطلق تلاش‌های بسیاری شده بود. در نهایت در سال 1908 میلادی، روش مایع کردن هلیوم توسط کمرلینگ اونز<sup>۱</sup> ابداء گردید. همچنین او همکارانش در سال 1911 میلادی، مشاهده نمودند که مقاومت الکتریکی جیوه به یکباره در دمای  $4/2$  کلوین صفر می‌شود<sup>۲</sup>.

آزمایش‌های بعدی اونس در سال 1913 میلادی، معرفی یک چگالی جریان بحرانی  $J_C$  که محوشدگی اَبَرسانایی را سبب می‌شود، می‌باشد. با افزایش چگالی جریان بیش از یک حد بحرانی  $J > J_C$ ، ولتاژی در نمونه ایجاد می‌شود که آن به معنی پدیدار شدن مقاومت در مجموعه است. همچنین تجربه نشان می‌دهد که مقدار جریان بحرانی  $J_C$  با کاهش دما افزایش پیدا می‌کند.

در بخش (4-2) به آزمایش مایسنر و اسنفلد<sup>۳</sup> پرداخته می‌شود که نشان می‌دهد در دمای پایین‌تر از دمای بحرانی  $T < T_C$  کلیه میدان مغناطیسی از اَبَرسانا دفع می‌گردد و به یک دیامغناطیس کامل تبدیل می‌شود (شکل (4-3)). با افزایش میدان تا یک میدان بحرانی  $B_C$ ، اَبَرسانایی از بین می‌رود و آن به یک فلز بهنجار تبدیل می‌گردد و این میدان بحرانی تابعی از دما  $B_C(T)$  می‌باشد.

در طی همین سال‌ها در سال 1916 میلادی، سیلزی<sup>۴</sup> نشان داد که مقادیر بحرانی جریان  $J_C$  و میدان مغناطیسی بحرانی  $B_C$  بایستی به یکدیگر مربوط باشند. میدان مغناطیسی ایجاد شده در سطح اَبَرسانا توسط جریان سطحی

۱. Kamerlingh Onnes

۲. این آزمایش زمانی قابل اجرا شد که اونز چند سال قبل توانسته بود روش تبدیل گاز هلیوم به مایع را به دست آورد. از این رو او با در دست داشتن هلیوم مایع توانست دمای نمونه را تا دمای جوش هلیوم کاهش دهد.

۳. Meissner and Ochsenfeld

۴. Silsbee effect

بحرانی  $J_C$ ، معادل با میدان بحرانی  $B_C$  است. اندازه‌ی جریان بحرانی به طبیعت و هندسه‌ی نمونه نیز بستگی دارد.

مقاومت صفر و دیامغناطیسی کامل ابررساناها از ویژه‌گیهای مهمی است که آن‌ها را از فلزات کامل (بدون هیچ گونه ناخالصی) تفکیک می‌سازد. پدیده‌ی ابررسانایی را می‌توان در طیف وسیعی از مواد مانند قلع و آلومینیوم جستجو نمود. همچنین برخی از آلیاژها، سرامیک اکسیدهای فلزی و نیمه‌رساناها نیز پدیده ابررسانایی دیده می‌شود. ولی جای تعجب است که برخی فلزاتی که دارای رسانندگی بالایی هستند مانند طلا و نقره قادر به ابررسانا شدن نیستند؛ همچنین پدیده‌ی ابررسانایی در فلزات فرومغناطیس هم روی نمی‌دهد. تا پیش از سال 1986 بیشترین دمای گذار به دست آمده  $23/2$  کلوین بود که مربوط به ماده مرکب  $Nb_3Ge$  است. مدلی که برای پاسخ‌گویی این رفتار ارایه شد مدل  $BCS^1$  می‌باشد که این مدل میکروسکوپیکی نشان دهنده رفتار ابررسانایی از این مرتبه‌ی دمای است که به ابررساناهای متعارف معرف می‌باشد. در سال 1986 بندنورز<sup>2</sup> و مولر<sup>3</sup> توانستند با استفاده از ترکیبات سرامیکی پیچیده مانند  $La_{1/85}Sr_{0/15}Cu_4$  دمای بحرانی را به 40 درجه کلوین برسانند. این نوع ترکیبات سرامیکی<sup>4</sup> باعث می‌شود تا دمای گذار را تا مرتبه 140 کلوین رسانده شود ولی تاکنون مدلی که به درستی بتواند به مانند مدل  $BCS$  این دسته ابررساناهای دمای بالا را توصیف نماید ارائه نشده است. این دسته ابررساناها را، ابررساناهای نامتعارف نامند.

#### 4-2 شدت میدان مغناطیسی بحرانی - اثر مایسنر

مایسنر و استفلد<sup>5</sup> در سال 1933 نشان داد که با حضور میدان مغناطیسی خواص ابررسانایی از بین می‌رود. میدان لازم برای از بین بردن ابررسانایی را شدت میدان بحرانی  $B_C$  نامیده می‌شود. این میدان دارای وابستگی دمایی است که به صورت رابطه (4-2) داده می‌شود.

1. Bardeen, Cooper, Shrieffer

۲. Bendnorz

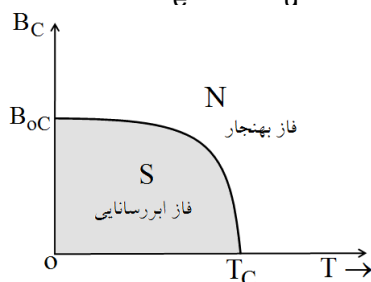
۳. Müller

4. جامدی با ترکیبات غیرآلی و غیرفلزی.

۵. Meissner and Ochsenfeld



$$B_C(T) = B_{oC} \left[ 1 - \frac{\beta T}{T_c} \right]^2 \quad (2-4)$$



شکل 2-4. نمودار فازی دو حالت آبرسانایی S و بهنجار N برحسب میدان بحرانی و دما.

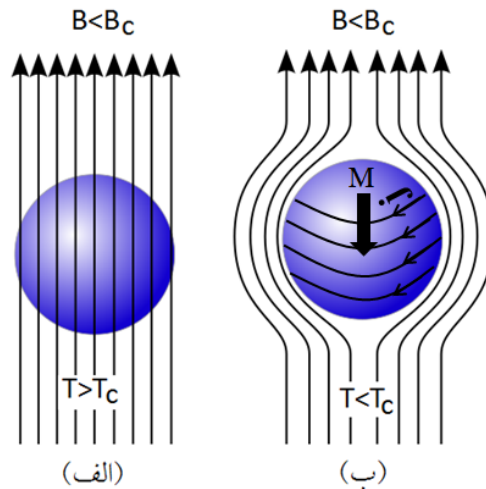
در رابطه بالا  $B_{oC}$  شدت میدان مغناطیسی بحرانی در دمای صفر مطلق که از مرتبه 0/038 تسلا می باشد. رابطه (2-4) را به قانون توئن<sup>1</sup> شناخته می شود. با توجه به نمودار فازی می توان دو فاز آبرسانایی S و فلزات بهنجار N را در شکل (2-4) مشاهده و تفکیک نمود.

با حضور میدان مغناطیسی  $\vec{B}$  یک جریان سطحی  $\vec{j}$  روی سطح خارجی فلزات القاء می شود. این جریان سطحی مطابق شکل (3-4) یک قطبش مغناطیسی  $\vec{M}$  طوری در جهت عکس میدان اعمالی  $\vec{B}$  ایجاد می نماید که در خصوص یک نمونه آبرسانا دقیقاً برابر شدت میدان مغناطیسی  $\vec{H}$  است که باعث می شود تا میدان مغناطیسی  $\vec{B}$  در داخل نمونه صفر شود. به این معنی که آبرسانا در حضور میدان مغناطیسی به یک دیامغناطیس کامل تبدیل می شود که از نفوذ میدان مغناطیسی به داخل آبرسانا جلوگیری می نماید (شکل (3-4)).

**نکته 4-1:** اثر مایسنر گاهی با نوعی از خاصیت دیامغناطیس که در رساناهای کامل نیز وجود دارد اشتباه گرفته می شود. طبق قانون القای الکترومغناطیسی فارادی، اگر یک میدان مغناطیسی متغیر به یک رسانا اعمال شود، جریانی در رسانا به وجود می آید که میدان حاصل از آن با تغییر میدان خارجی مخالفت می کند. در یک رسانای کامل، این جریان می تواند بسیار بزرگ باشد و در نتیجه میدان مغناطیسی

<sup>1</sup> Tuyn's law

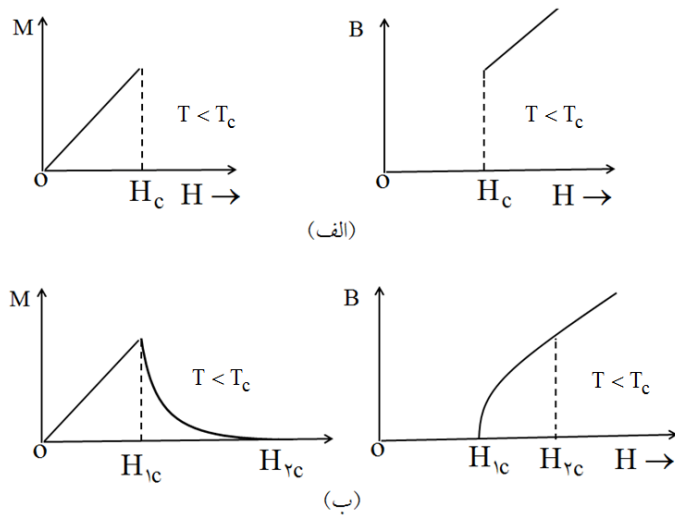
را کاملاً خنثی کند. اثر مایسنر با این پدیده متفاوت است؛ ابررسانا هرگونه میدان مغناطیسی، چه ثابت و چه متغیر (با هر اندازه از میدان  $B < B_c$ ) را طرد می‌کند. فرض کنید ماده‌ای در حضور میدان مغناطیسی در اختیار داشته باشیم که درونش مقداری میدان مغناطیسی نفوذ کرده باشد. اگر ماده را تا زیر دمای بحرانی اش سرد کنیم، خواهیم دید که میدان مغناطیسی درونی ناگهان از بین می‌رود. این پدیده با قانون القا فاراده، قابل پیش‌بینی نیست.



شکل 3-4. اثر مایسنر را بر روی یک ابررسانای حجمی به‌ازای  $B < B_c$  نشان داده شده است. الف) دما بالاتر از دمای بحرانی  $T > T_c$  (فلز بهنجار) ب) دما پایین‌تر دمای گذار  $T < T_c$  (ابررسانا).

مطابق شکل (3-4) یک نمونه توده‌ای را در داخل یک میدان ایستا و یکنواخت ولی با شرط  $B < B_c$  در نظر بگیرید. با کاهش دما  $T < T_c$ ، همانطور که در بالا به آن اشاره شد، نمونه ابررسانا شده و به یک دیامغناطیس کامل که باعث حذف میدان مغناطیسی در داخل نمونه می‌شود، تبدیل می‌گردد (رابطه‌ی (3-4)).

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}) = 0 \\ \mathbf{M} &= -\mathbf{H} \end{aligned} \quad (3-4)$$



شکل 4-4. نمونه اَبَرسانا در حضور میدان B به ازای  $T < T_c$  (الف) اَبَرسانای نوع 1 (اَبَرسانا نرم) (ب) اَبَرسانای نوع 2 (اَبَرسانای سخت).

### 3-4 اَبَرسانای نوع اول و دوم

یک اَبَرسانا را در دمای پایین‌تر از دمای بحرانی  $T_c$  در نظر بگیرید. به محض این‌که یک میدان مغناطیسی B برقرار می‌شود، قسمتی از انرژی میدان صرف تولید جریان‌های استتار سطحی می‌شود. این جریان سطحی باعث می‌شود تا میدان به داخلی اَبَرسانا نفوذ نکند. با افزایش میدان B به طوری که از یک مقدار بحرانی  $B_c$  عبور کند، نشان داده می‌شود که کمترین انرژی آزاد گیبس مجموعه مربوط به حالت فلز بهنجار (معمولی) است نه حالت اَبَرسانا که در این حالت میدان کاملاً به داخل رسانا عبور کرده و اثر مایسنر از بین می‌رود. همین پدیده، حذف اثر مایسنر، اَبَرساناها را به دو نوع تقسیم می‌کند. اَبَرسانای نوع اول (یا اَبَرسانای نرم)، به‌ازای شدت میدان‌های بزرگ مغناطیسی  $H > H_c$  به یک‌باره مغناطش M خود را از دست می‌دهد و میدان B در داخل اَبَرسانا نفوذ می‌کند (شکل (4-4) الف). در دیگر اَبَرساناها مطابق شکل (4-4) ب، مغناطش مجموعه M به یک‌باره صفر نمی‌گردد و از میدان  $H_{rc}$  شروع به کاهش می‌کند و

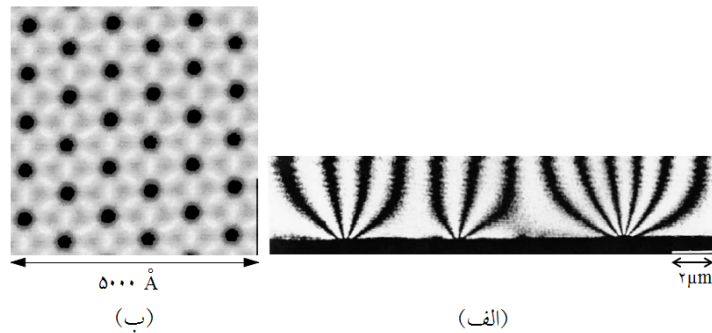
۱. با محاسبه انرژی آزاد گیبس مجموعه به‌ازای هر دو وضعیت (فلز معمولی و ابرسانایی)، سیستم کمینه انرژی را به خود می‌گیرد.

با افزایش شدت میدان، میدان تا  $H_{2c}$  فرآیند کاهش مغناطش  $M$  ادامه پیدا می‌کند تا به صفر میل نماید. به این نوع ابررسانا، ابررسانای نوع دوم (یا ابررسانای سخت) گفته می‌شود. به‌ازای شدت میدان‌های مغناطیسی  $H < H_{1c}$ ، مجموعه حالت ابرسانایی را دارا است و اندازه مغناطش سیستم برابر است با شدت میدان مغناطیسی  $|\mathbf{M}| = |\mathbf{H}|$  و میدان مغناطیسی  $B$  در داخل ابررسانا صفر می‌شود که با افزایش شدت میدان مغناطیسی  $H_{1c} < H < H_{2c}$  مغناطش ابررسانا به آهستگی کاهش می‌یابد در این محدوده، میدان مغناطیسی به داخل ابررسانا نفوذ جزئی خواهد داشت  $B \neq 0$  و حالت ترکیبی ناشی از دو فاز (بهنجار و ابررسانا) را تشکیل می‌دهد.

ابریکوسوف<sup>۱</sup> در سال 1957 میلادی پرسشی را برای یک ابررسانای نوع دوم مطرح نمود. در حضور میدان مغناطیسی، القای مغناطیسی در داخل این دسته از ابررساناها صفر نیست، بلکه در حضور یک میدان نسبتاً بالا، گردشارها<sup>۲</sup> (خطوط شار) در داخل ابررسانا وجود دارد. آزمایش نشان می‌دهد که در حالت ترکیبی (حالت‌های ابررسانایی و بهنجار) که در ابررساناهای نوع دوم دیده می‌شوند، میدان به صورت میله‌ای (گردشار) که در شکل (4-5) نشان داده شده است، در مناطق بهنجار (غیر ابررسانا) نفوذ کرده و یک ابر جریان الکترونی را به دور میله‌های مغناطیسی نفوذ یافته، به چرخش وا می‌دارد. از این رو هر گردشار را می‌توان به صورت یک ناحیه‌ی مرکزی از ماده‌ی که در حالت بهنجار (معمولی) می‌باشد در نظر گرفت که با ماده‌ی ابررسانا احاطه شده است. جریان‌های که به دور محور گردشار می‌چرخند میدانی مغناطیسی در امتداد محور ایجاد می‌کنند، به‌طوری که شار کل در امتداد هر میله برابر با کوانتم شار است. این نوع گردشار یک شبکه‌ی منظم را تشکیل می‌دهند که ابریکوسوف با یک اشتباه عددی نتیجه گرفت که شبکه‌ی مربعی پایدارتر است. بعدها نشان داده شد که شبکه‌ی مثلثی پایدارتر می‌باشد. در واقع چنین رفتاری را در یک ابررسانای نوع دوم می‌توان دید.

۱. Abrikosov

۲. Vortex



شکل 4-5. الف) یک نمونه آبرسانا از نوع II یک ورقه سربی متشکل از شار میدان عبوری<sup>۱</sup> لوله‌ای شکل در شرایط  $H_{1c} < H < H_{2c}$  (ب) از منظر بالایی یک شبکه ابریکوسوف متشکل از شار لوله‌ایی از نمونه<sup>۲</sup>  $NdSe_2$ .

مطابق شکل (4-5)ب با افزایش میدان مغناطیسی اگر شدت میدان‌هایی که از شدت میدان مغناطیسی بحرانی دوم  $H_{2c}$  بیشتر باشد  $H > H_{2c}$ ، میدان مغناطیسی به داخل آبرسانا کاملاً نفوذ کرده و نمونه تبدیل به یک فلز بهنجار می‌شود (شکل (4-5)ب).

نکته 4-2: بیشتر آبرساناهایی که از عنصر ساده تشکیل شده‌اند، نوع 1 هستند (به جز نیوبوم، تکنسیوم، وانادیوم و نانولوله‌های کربنی)، و تقریباً همه آبرساناهای ناخالص و ترکیبی، نوع 2 هستند.

#### 4-4 معادلات لندن<sup>۳</sup>

در سال 1935 لندن نشان داد که میدان مغناطیس در آبرسانا کاملاً خارج نمی‌شود و با لایه نازکی در آبرسانا نفوذ می‌کنند. در این عمق نفوذپذیر دو دسته شار الکترونی وجود دارند: الکترون‌های بهنجار و دیگری آبرالکترون‌ها، که به ترتیب با چگالی‌های الکترونی  $n_s$  و  $n_n$  و با سرعت‌های به ترتیب  $v_s$  و  $v_n$  ترکیب این دو شار الکترونی، رسانش نمونه را سبب می‌شود. مجموع چگالی آبرالکترون‌ها و چگالی الکترون‌های بهنجار برابر چگالی کل الکترون مجموعه  $n_o = n_s + n_n$

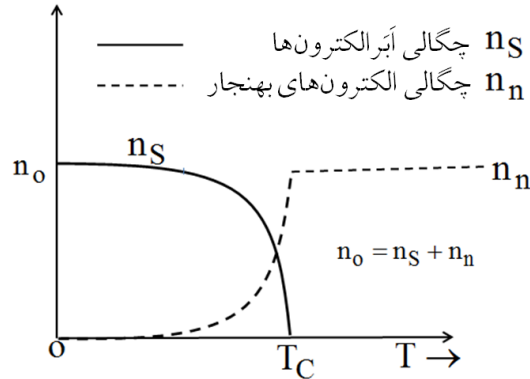
<sup>۱</sup>. Tonomuura *et al* (1986).

<sup>۲</sup>. S.Pan and A. de Lozanne

<sup>۳</sup>. London

می‌باشد. با استفاده از روش‌های پدیده شناختی چگالی ابرالکترون‌ها  $n_s$  با دما دارای رابطه‌ی (4-4) می‌باشد که در شکل (6-4) نمایش داده شده است.

$$n_s = n_0 \left[ 1 - \frac{\exp\left(-\frac{T}{T_c}\right)}{2} \right] \quad (4-4)$$



شکل 6-4. نمودار تغییرات چگالی الکترون‌های ابررسانایی و بهنجار نسبت به دما.

طبق نظریه درود (رابطه (7-1)) رسانش الکتریکی الکترون‌ها در یک فلز بهنجار  $s_n$  متناسب با زمان واهلش که از مرتبه  $t = 1-10$  fs می‌باشد. مقدار این زمان واهلش برای ابرالکترون‌ها نمونه ابررسانا بی‌نهایت می‌باشد. از این رو با حضور میدان الکتریکی، الکترون‌های ابررسانا با چگالی  $n_s$  بدون هیچ‌گونه پراکندگی شتاب می‌گیرند، از طرفی الکترون‌های بهنجار در اثر پراکندگی نقش رسانشی خود را در مقایسه با الکترون‌های ابررسانا از دست می‌دهند. با توجه به نقش رسانشی بالای چگالی الکترونی ابررسانا  $n_s$  در حضور میدان‌های الکترومغناطیسی نسبت به چگالی الکترون‌های بهنجار  $n_n$ ، در ادامه در محاسبات فقط سهم رسانشی الکترون‌های ابررسانا  $n_s$  را در نظر می‌گیریم.

$$m \frac{d\mathbf{v}_s}{dt} = -e\mathbf{E} \quad \mathbf{J}_s = n_s e \mathbf{v}_s \quad \mathbf{E} = \frac{m}{n_s e^2} \frac{d\mathbf{J}_s}{dt}$$

$$\frac{d\mathbf{J}_s}{dt} = \frac{n_s e^2}{m} \mathbf{E} \quad (5-4)$$

رابطه‌ی (5-4) را با استفاده از رابطه‌ی درود (4-1) و حذف سهم پراکندگی به دلیل زمان واهلش بی‌نهایت  $t = \infty$  در آبرساناها به دست آمده است. در این جا  $\dot{\mathbf{J}}_S$  چگالی آبرجریان الکترون‌های آبرسانش می‌باشد.

با کرل گرفتن طرفین رابطه (5-4) و با استفاده از معادله‌ی سوم ماکسول  $\nabla \cdot \mathbf{E} = -\frac{\dot{\mathbf{D}}}{\epsilon_0}$ ، رابطه (6-4) را نتیجه می‌گیریم.

$$\frac{d\dot{\mathbf{N}} \cdot \mathbf{r}}{dt} \dot{\mathbf{J}}_S = \frac{n_s e^2}{m} \nabla \cdot \mathbf{E} = -\frac{n_s e^2}{m} \frac{\dot{\mathbf{D}}}{\epsilon_0} \quad (6-4)$$

با استفاده از رابطه‌ی (6-4) را با در نظر گرفتن رابطه‌های  $m_0 e_0 c^2 = 1$  و  $\dot{\mathbf{B}} = m_0 \dot{\mathbf{H}}$  (برای یک محیط غیر مغناطیسی)، رابطه‌ی (7-4) را می‌توان استخراج نمود.

$$\nabla \cdot \frac{d\dot{\mathbf{N}} \cdot \mathbf{r}}{dt} \dot{\mathbf{J}}_S + \frac{n_s e^2}{m e_0 c^2} \dot{\mathbf{H}} \cdot \dot{\mathbf{H}} = 0 \quad (7-4)$$

صفر بودن داخل کروشه، کلی‌ترین پاسخ رابطه‌ی (7-4) را در اختیار می‌گذارد.

$$\dot{\mathbf{N}} \cdot \mathbf{r} \dot{\mathbf{J}}_S = -\frac{n_s e^2}{m e_0 c^2} \dot{\mathbf{H}} \quad (8-4)$$

با به‌کارگیری معادله چهارم ماکسول  $\nabla \cdot \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\dot{\mathbf{D}}}{\epsilon_0}$  و با فرض میدان‌های ایستا (حذف سهم جریان‌های جابه‌جایی  $\frac{\dot{\mathbf{D}}}{\epsilon_0} = 0$ )، رابطه‌ی (9-4) را نتیجه می‌دهد.

$$\dot{\mathbf{N}} \cdot \dot{\mathbf{H}} = \dot{\mathbf{J}}_S \quad (9-4)$$

با کرل گرفتن از طرفین رابطه‌ی (9-4):

$$\nabla \times \dot{\mathbf{N}} \cdot \dot{\mathbf{H}} = \nabla \times \dot{\mathbf{J}}_S \quad (10-4)$$

و با قرار دادن عبارت (9-4) در معادله (8-4)، به رابطه‌ی (11-4) خواهیم رسید.

$$\vec{N}' \cdot \vec{N}' \cdot \frac{\mathbf{r}}{H} = - \frac{n_s e^2}{m \epsilon_0 c^2} \frac{\mathbf{r}}{H} \quad (11-4)$$

با استفاده از رابطه بک-کب  $(\vec{N} \times \vec{N}) \cdot \vec{H} + \vec{N}(\vec{N} \times \vec{H})$ ، رابطه (11-4) به صورت زیر بازنویسی می‌شود.

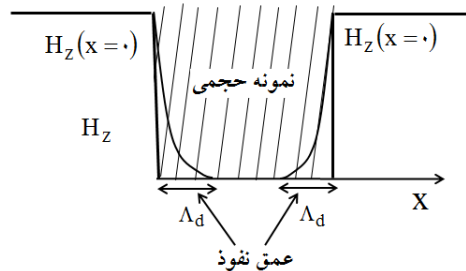
$$- (\vec{N} \times \vec{N}) \cdot \vec{H} + \vec{N}(\vec{N} \times \vec{H}) = - \frac{n_s e^2}{m \epsilon_0 c^2} \frac{\mathbf{r}}{H} \quad (12-4)$$

با به‌کارگیری از معادله‌ی دوم ماکسول  $\vec{N} \times \vec{B} = 0$  و عبارت  $\vec{N} \times \vec{M} = 0$  در داخل آبرسانا، می‌توان رابطه‌ی  $\vec{N} \times \vec{H} = 0$  را نتیجه گرفت که با قرار دادن آن در رابطه (12-4) به رابطه‌ی لندن خواهیم رسید (رابطه‌ی (13-4)).

$$\vec{N}^2 \frac{\mathbf{r}}{H} = \frac{n_s e^2}{m \epsilon_0 c^2} \frac{\mathbf{r}}{H} \quad (13-4)$$

همچنین می‌توان به سادگی مانند روش بالا، شکل دیگری از رابطه‌ی لندن به صورت رابطه‌ی (14-4) را به دست آورد.

$$\vec{N}^2 \mathbf{J}_C = \frac{n_s e^2}{m \epsilon_0 c^2} \mathbf{J}_C \quad (14-4)$$



شکل 7-4. عمق نفوذ  $L_d$  شدت میدان مغناطیسی  $H$  در نمونه حجمی آبرسانا در حضور میدان مغناطیسی در راستای محور  $z$  و نفوذ آن در راستای محور  $x$  نمایش داده شده است.

در ادامه با استفاده از معادله‌ی لندن ضریب نفوذ در داخل یک آبرسانا توده‌ای به دست می‌آوریم. با در نظر گرفتن یک نمونه توده‌ای با شکل هندسی



ساده (مکعبی) و میدان مغناطیسی در راستای محور z و حل معادله (4-13) در دستگاه کارتزین خواهیم داشت.

$$\frac{d^2 H_z(x)}{dx^2} = \frac{1}{L_d^2} H_z(x) \quad (15-4)$$

$$L_d = \frac{1}{\sqrt{\frac{4\pi m_e c^2}{\hbar} \frac{\omega}{n_s e^2}}} \quad (16-4)$$

معادله (4-15)، به طور کلی دارای پاسخی به صورت رابطه‌ی (4-17) می‌باشد.

$$H_z(x) = A e^{-x/L_d} + B e^{x/L_d} \quad (17-4)$$

به دلیل رفتار میرائی در داخل نمونه سهم افزایشی پاسخ (جمله دوم پاسخ رابطه‌ی (4-17)) حذف می‌شود و سهم میرائی آن را در نظر گرفته می‌شود. از این رو در رابطه‌ی (4-17) ضریب B بایستی صفر در نظر گرفته شود. بنابراین معادله‌ی (4-16) دارای پاسخی میراگونه به صورت  $A e^{-x/L_d}$  می‌باشد. در این جا ضریب A با شدت میدان در لحظه‌ی نفوذ به نمونه  $A = H_z(x=0)$  برابر خواهد بود.

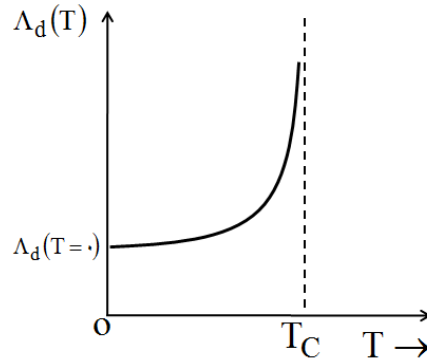
$$H_z(x) = H_z(x=0) e^{-x/L_d} \quad (18-4)$$

رابطه‌ی (4-18) طول عمق نفوذ میدان به داخل آبرسانا را نشان می‌دهد که در این فاصله شدت میدان مغناطیسی به  $1/e$  مقدار اولیه خود می‌رسد<sup>1</sup>. عبارت عمق نفوذ نشان می‌دهد هرچه چگالی الکترون آبرسانا  $n_s$  بیشتر باشد طول نفوذ کاهش می‌یابد که با توجه به بیشترین مقداری که  $n_s$  می‌تواند داشته باشد (که برابر است با کل الکترون‌های نمونه  $n_0$  در دمای صفر مطلق) و با در نظر گرفتن رابطه‌ی چگالی ابرالکترون  $n_s$  نسبت به دما (رابطه (4-4)) و قرار دادن آن در معادله (4-16)، حداقل نفوذ به‌ازای دمای صفر کلوین را می‌توان محاسبه نمود که برابر است:

1. در این جا e عدد نپیرین است.

$$L_d(T=0) = \frac{2\pi m_e c^2}{\hbar n_0 e^2} \quad (19-4)$$

از طرفی با افزایش دما تا دمای بحرانی این میدان H کاملاً در داخل نمونه نفوذ می‌کند به عبارتی بایستی این کمیت بی‌نهایت شود. از این رو می‌توان به طریق پدیده شناختی شکل (8-4) را انتظار داشت.



شکل 8-4. وابستگی دمایی عمق نفوذ  $L_d$  در نمونه حجمی ابررسانا.

شکل (8-4) نشان می‌دهد در دمای دمای بحرانی طول نفوذ بی‌نهایت می‌شود و ابررسانا در این دما به یک رسانای بهنجاز (معمولی) تبدیل می‌گردد.

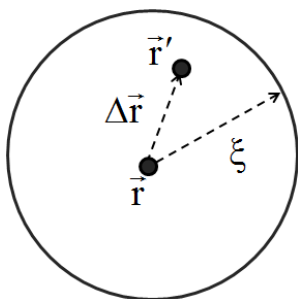
$$\frac{L_d(T)}{L_d(T=0)} = \frac{\hbar}{2m_e c} \frac{\partial \ln \xi}{\partial T} \quad (20-4)$$

با یک نگاه سطحی از عبارت (20-4) می‌توان نکات زیر را نتیجه گرفت:

- 1) عدم تأثیر ناخالصی در عمق نفوذپذیری میدان.
- 2) با به کار بردن عبارت  $\vec{B} = m_0 \vec{H} = \vec{N}' \cdot \vec{A}$  در معادله لندن رابطه‌ی (12-4)، چگالی جریان ابررسانا را با بردار پتانسیل برداری  $\vec{A}$  در مکان  $\vec{r}$  به صورت موضعی وابسته می‌باشد (رابطه‌ی (21-4)).

$$\vec{J}_S(\vec{r}) = - \frac{n_s e^2}{m} \vec{A}(\vec{r}) \quad (21-4)$$

اما پيپارد<sup>1</sup> نشان داد اين نتايج صحيح نمي‌باشد که در ادامه به آن خواهيم پرداخت.



شکل 4-9. نمايش طرحواره از همبستگي هر الکترون با الکترون‌های که در داخل شعاع همبستگي  $x$  واقعند.

در معادلات لندن، چگالي جريان اَبَرسانش  $J_C$  در فاصله‌ی  $L_d$  تغيير مي‌کند<sup>2</sup>، در حالي که در به‌دست آوردن معادله‌ی (4-14) تغييرات بسيار کُند براي جريان در نظر گرفته شده بود. از طرفي در حالت اَبَرسانايي الکترون‌های اَبَرسانش با يکديگر همبسته هستند به شرطي که فاصله هر دو الکترون از يک مقدار خاص، طول همدوستي  $x$ ، کمتر باشد. از اين رو تا زماني که تغييرات اَبَرجريان (ناشي از اَبَرالکترون‌ها) در اين فاصله همدوسي  $x$  قابل اغماض باشد، معادلات لندن معتبر مي‌باشد (در حد  $x \ll L_d$ ).

در فلزات ساده مانند آلومينيوم مقدار طول همدوسي از عمق نفوذ بزرگتر است، بنا بر اين براي اين فلزات معادله لندن کاربردي ندارد ( $x \gg L_d$ ), در حالي که فلزات واسطه و ترکيبات بين فلزي از نوع  $Nb_3Sn$  و  $V_3Ga$  طول همدوسي از عمق نفوذ کوچکتر است و معادلات لندن در ميدان‌های ضعيف به‌خوبي قابل استفاده است.

بر اساس نظريه‌ی لندن،  $L_0$  طول نفوذ ميدان در اَبَرسانا در دمای صفر مطلق به ناخالصي حساس نمي‌باشد!، پيپارد در سال 1953 آزمايشي‌هایی بر روی Sn که با مقادير کم In آلاييده شده بود انجام داد و مشاهده کرد وقتي طول پويش

<sup>1</sup>. Pippard

<sup>2</sup>. عمق نفوذ نشان دهنده حداکثر بُعد تغييرات جريان مي‌باشد که مي‌توان مقياس تغييرات جريان باشد.

آزاد میانگین  $\lambda$  ناشی از پراکندگی الکترون‌ها با ناخالصی در حالت بهنجار به اندازه عمق نفوذ در دمای صفر کاهش یابد، مقدار  $L_0$  افزایش قابل ملاحظه‌ای را پیدا خواهد نمود. از این رو اثرات ناخالصی باعث می‌شود جریان آبرسانش و پتانسیل برداری یک رابطه غیرموضعی را به خود می‌گیرند. همچنین او نشان داد که عمق نفوذ پذیری با یک ضریب 2 در دمای پایین تغییر می‌کند. بنابراین این غیرموضعیّت جریان باعث معرفی طول هم‌دوسی  $x$  و اهمیت آن در فضا می‌شود. به این معنی که، با توجه به رابطه‌ی (20-4)، چگالی جریان یک عبارت انتگرالی نسبت به پتانسیل برداری  $\dot{A}(\mathbf{r}, t)$  با کرنل  $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$  می‌باشد (رابطه‌ی (22-4)). این انتگرال حول نقطه‌ی  $\mathbf{r}'$  در داخل کره‌ای به شعاع  $x$  گرفته می‌شود (شکل (9-4)).

$$\mathbf{J}_s(\mathbf{r}) = \int_{D \subset x} K(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \dot{A}(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \quad (22-4)$$

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \exp\left\{ \frac{e}{\hbar} (\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \mathbf{p} \right\} \quad (23-4)$$

تأثر ناخالصی به صورت وابستگی طول هم‌دوسی  $x$  با طول پویس آزاد میانگین  $\lambda$  الکترون‌ها به صورت رابطه‌ی (24-4) می‌باشد.

$$\frac{1}{x} = \frac{1}{z_0} + \frac{1}{a\lambda} \quad (24-4)$$

که در رابطه‌ی (24-4)  $x_0$  سهم طول همبستگی بدون ناخالصی می‌باشد. برای برآورد عددی عبارت (24-4)، برای یک نمونه خالص، فقط به الکترون‌های اطراف سطح فرمی با پهنای  $DE = k_B T_c$  توجه می‌کنیم. با توجه به رابطه‌ی اصل عدم قطعیت  $\frac{h}{Dp}$  و عدم قطعیت اندازه  $Dp$  حرکت در اطراف سطح فرمی  $Dp = \frac{m_e DE}{\hbar} \approx \frac{k_B T_c}{v_F}$  می‌توان طول هم‌دوسی  $x$  «  $z_0$  به صورت رابطه‌ی (25-4) نوشت.

$$z_0 = a \frac{\hbar v_F}{k_B T_c} \quad (25-4)$$

که در اینجا  $a$  یک ضریب ثابت کوچکتر از واحد می باشد که به عنوان مثال با استفاده از نتایج تجربی در خصوص موادی مانند آلومنیوم و قلع مقدار این ضریب  $0/15$  به دست می آید. مقدار عددی این ضریب توسط محاسبات BCS مقداری برابر با  $0/18$  برآورد می شود.

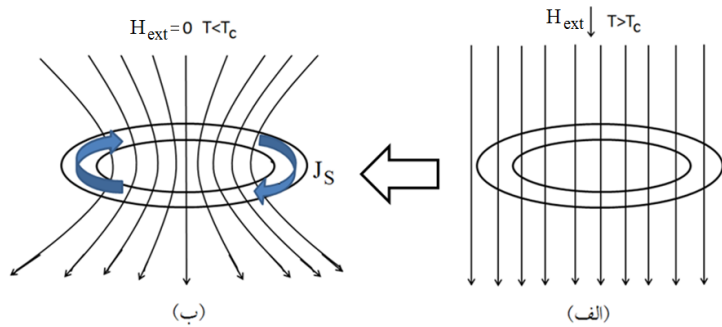
جمله دوم رابطه  $(4-24)$  وابستگی طول همبستگی  $z$  با ناخالصی سیستم توسط طول پویش آزاد میانگین  $l$  را نشان می دهد.  $a$  در رابطه  $(4-24)$  یک ثابت تجربی از مرتبه واحد می باشد. همچنین رابطه  $(4-24)$  نشان می دهد با حضور ناخالصی جمله دوم حائز اهمیت می شود. از طرفی طول پویش آزاد میانگین با ضریب نفوذ رابطه تنگاتنگی می تواند داشته باشند.

همچنین برادران لندن مفهوم عمیقتری از پدیده آبرسانایی را مطرح کردند. آن ها نشان دادند، آبرسانایی یک حالت ماکروسکوپی با مفاهیم میکروسکوپیکی است. به عبارت دیگر، آن ها برای اولین بار پدیده آبرسانایی را یک پدیده کوانتومی ماکروسکوپی مطرح کردند. گینزبورگ و لاندائو برای اولین بار در 1950 میلادی این پنداشت را در داخل نظریه پدیده شناختی خود مطرح نمود. این نظریه بر خلاف نظریه لندن که یک نظریه کاملاً کلاسیکی است، به کمک مکانیک کوانتومی و تعریف پارامتر نظم، فاز آبرسانا را از فاز بهنجار (فاز معمولی) متمایز نمودند. در معادلات گینزبورگ-لاندائو قویاً به دو طول مشخصه، وابسته می باشد که عبارت هستند از: طول عمق نفوذ  $L$  و طول همدوستی  $x$  (که مقیاس طولی است برای تغییرات فضایی تابع موج آبرکترون ها در میدان مغناطیسی صفر است). نشان داده می شود که به ازای  $x \ll L$  آبرسانایی از نوع اول و به ازای  $x \gg L$  آبرسانایی از نوع دوم خواهیم داشت.

#### 4-5 تله افتادن شار مغناطیسی در داخل یک آبرسانا حفره دار

حال اگر به جای یک جسم آبرسانای توده ای شکل توپیر مانند کره (شکل  $(4-3)$ )، آبرسانای توده ای حفره داری را مطابق شکل  $(4-10)$  در معرض میدان مغناطیسی خارجی را در نظر بگیرید؛ به ازای شدت میدان مغناطیسی کوچک تر از شدت میدان بحرانی  $H < H_c$  در شرایط دمایی  $T > T_c$  مانند یک فلز بهنجار رفتار می کند و میدان مغناطیسی در داخل تمامی نواحی فلز نفوذ

می‌کند. با کاهش دما تا زیر دمای بحرانی ابررسانایی  $T < T_c$  جریان ابررسانایی  $J_S$  در داخل ابررسانا طوری برقرار می‌شود که میدان مغناطیسی را از خود دفع می‌سازد که به معنی دیامغناطیده شدن کامل ابررسانا در جهت محور چنبره می‌باشد. مقداری از این میدان در حفره داخلی چنبره به تله می‌افتد. با قطع شدت میدان مغناطیسی خارجی، جریان ابررسانایی حلقوی بدون اتلاف در چنبره ابررسانا باقی می‌ماند و میدان مغناطیسی به تله افتاده شده در حفره و جریان ابررسانایی در داخل چنبره ابررسانا بدون هیچ کاهش تا ابد (بستگی به حوصله آزمایشگر دارد) در داخل حلقه باقی می‌ماند. در صورت کاهش جریان در چنبره به هر دلیلی میدان مغناطیسی به تله افتاده شده در حفره نیز کاهش می‌یابد.



شکل 4-10. الف) حلقه‌ای رسانایی در معرض میدان مغناطیسی کمتر از شدت میدان بحرانی و دمایی بالاتر از دمای بحرانی که به مانند یک فلز بهنجار رفتار می‌کند ب) ابتدا حلقه رسانا را سرد کرده تا به دمای پایین‌تر از دمای بحرانی برسد. در این دما رسانا به ابررسانا تبدیل می‌شود که باعث دفع میدان مغناطیس می‌شود. با قطع میدان مغناطیسی کوانتای شار مغناطیسی در آن به تله می‌افتد.

#### 4-4-1 شماره کوانتیزه در داخل یک حلقه ابررسانا

بر اساس تفسیر کوانتومی، شار به تله افتاده در حلقه ابررسانا کوانتیزه خواهد بود که مقدارش مضربی صحیحی از  $h/e^*$  ( $h$  ثابت پلانک) می‌باشد که در ادامه به آن خواهیم پرداخت. در این جا  $e^*$  ذره‌ی باردار است که جریان ابررسانایی را پدید می‌آورد که با استفاده از نتایج تجربی به دست آمده، مقدار آن را دو برابر مقدار بار تک الکترون می‌باشد  $e^* = 2e$ . این نتیجه، اساس مفهوم ابررسانایی در

دمای پایین می‌باشد. بدین معنی که الکترون در حالت آبرسانایی جفت می‌شوند. این جفت‌شدگی شبه ذراتی را که به زوج‌های کوپر معرف هستند پدید می‌آورند. از فصل یک با رابطه‌ی بور-زومرفلد آشنا شدیم. انتگرال بردار اندازه حرکت هر ذره با دار بر روی هر مدار بسته‌ای در رابطه‌ی زیر صدق می‌کند (رابطه‌ی 1-114).

$$\oint \mathbf{r} \times d\mathbf{l} = 2\pi \mathbf{h}(n + g) \quad (26-4)$$

در رابطه‌ی (26-4)،  $n$  متعلق به اعداد طبیعی و  $g$  عبارت تصحیح می‌باشد که در ادامه  $g$  را صفر در نظر می‌گیریم.

از طرفی عبارت اندازه حرکت خطی هر ذره بار دار در حضور میدان مغناطیسی به صورت رابطه‌ی (27-4) نوشته می‌شود.

$$\mathbf{p} = m^* \mathbf{v}_s + e^* \mathbf{A} \quad (27-4)$$

عبارت زومرفلد در حضور میدان مغناطیسی:

$$\oint (m^* \mathbf{v}_s + e^* \mathbf{A}) \times d\mathbf{l} = 2\pi \mathbf{h} n \quad (28-4)$$

$$\oint m^* \mathbf{v}_s \times d\mathbf{l} + e^* \oint \mathbf{A} \times d\mathbf{l} = 2\pi \mathbf{h} n \quad (29-4)$$

با استفاده از جریان آبرسانانش  $\mathbf{J}_s = (-e^*) n_s \mathbf{v}_s$  و به کار بردن آن در رابطه‌ی (29-4)

$$\frac{m^*}{e^* n_s} \oint \mathbf{J}_s \times d\mathbf{l} + e^* \oint \mathbf{A} \times d\mathbf{l} = 2\pi \mathbf{h} n \quad (30-4)$$

$d\mathbf{l}$  مسیر انتگرال را طوری انتخاب می‌کنیم که درست در مرز ناحیه داخلی حلقه باشد جایی که جریان در این ناحیه برابر صفر خواهد بود و با این انتخاب انتگرال اول از رابطه‌ی (30-4) برابر صفر می‌گردد. انتگرال دوم طبق قضیه استوکس به انتگرال سطحی می‌توان تبدیل نمود که خواهیم داشت:

$$e^* \oint \mathbf{N} \cdot \mathbf{A} \times d\mathbf{s} = e^* \oint \mathbf{B} \times d\mathbf{s} = 2\pi \mathbf{h} n \quad (31-4)$$

در رابطه‌ی (31-4) از رابطه‌ی  $\mathbf{N} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{B}$  استفاده شده است. طبق تعریف شار مغناطیسی  $\mathbf{f} = \oint \mathbf{B} \times d\mathbf{s}$  خواهیم داشت:

$$f = n \frac{2ph}{e^*} \quad (30-4)$$

$$f = nf_o \quad f_o = 2ph/e^*$$

در این جا  $h = \frac{h}{2p}$  می باشد. رابطه ی (30-4) نشان می دهد که شار به تله افتاده کوانتزه می باشد. همچنین با مقایسه با نتایج به دست آمده از تجربه، مقدار بار  $e^*$  برابر با  $2e$  را نتیجه می دهد که جریان اَبَرسانش ناشی از جفت شدگی الکترون ها می باشد که اساس مبانی مدل BCS می باشد.

#### 5-4 مدل BCS

پدیده ی اَبَرسانایی شاید اولین مسئله از نوع بس ذره ای بود که در آن زمان فیزیکدانان با آن روبرو بودند. برای توجیه میکروسکوپی این پدیده لازم بود تا حالت پایه ی میلیاردها الکترون تعیین شود. مشکل اساسی در این بود هنوز نظریه الکترونی فلزات در آن زمان تا سال 1933 میلادی در چارچوب نظریه کوانتومی به خوبی فرمول بندی نشده بود. مدل های مختلفی جهت توصیف پدیده ی اَبَرسانایی مانند نسخه اولیه نظریه ی موجی چگالی بار<sup>1</sup> و جریان های خودبه خودی ارایه گردید ولی هیچ یک قادر به توصیف درست از این پدیده نبود. نظریه دو شاره ای گورتز و کازیمیر با دو چگالی ابرالکترونی  $n_s$  و معمولی (بهنجار)  $n_N$  که سازگاری تقریبی خوبی با نتایج آزمایش های خواص گرمایی اَبَرساناها داشت، فرض شده بود که همه آنتروپی الکترون ها ناشی از برانگیختگی های تک ذرات از حالت پایه است.

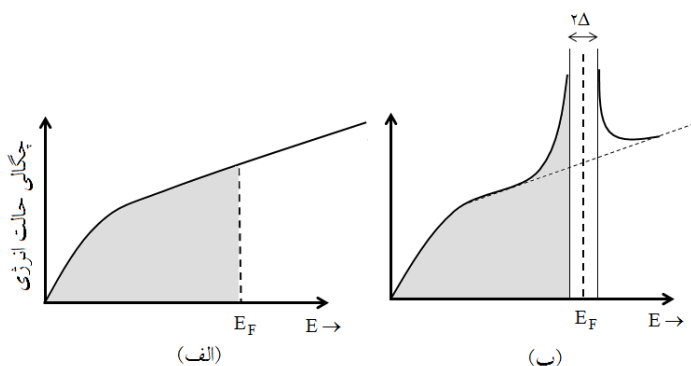
**نکته 3-4:** همانطور از ترمودینامیک به یاد داریم رسانش گرمایی متناسب است با مقدار گرمایی  $dQ$  که انتقال می یابد و از طرفی بین گرما و آنتروپی رابطه ی  $dQ = Tds$  برقرار است. از این رو می توان این نتیجه را گرفت انتقال گرما به معنی انتقال آنتروپی در مجموعه می باشد. از طرفی الکترون های اَبَرسانش در اَبَرساناها قادر به حمل آنتروپی نمی باشند هرچند که رسانش الکتریکی بسیار بالای دارند

<sup>1</sup> Charge Density Wave Theory



ولی رسانش گرمایی بسیار ضعیف از خود نشان می دهند. از این رو سهم انتقال حرارت به عهده‌ی الکترون‌های بهنجار<sup>۱</sup> در اَبَرساناها است.

همچنین لندن پیشنهاد نمود که در حالت اَبَرسانایی حول و حوش انرژی فرمی  $E_F$  یک گاف انرژی در طیف برانگیختگی‌های الکترونی اَبَرسانا به وجود می آید. از این رو یک اَبَرسانا معمولاً به گونه‌ای رفتار می کند که گویی یک گاف انرژی با پهنای  $2D$  که مرکز آن روی انرژی فرمی است که در نوار تک الکترونی ایجاد می گردد<sup>۲</sup>. بنابراین مطابق شکل (4-11) الکترون‌های در یک اَبَرسانا می توانند انرژی‌های به خود بگیرد که در نامساوی  $|E - E_F| > D$  برقرار باشد.



شکل 4-11. الف) چگالی حالت انرژی گاز الکترونی بدون برهم کنش (یک فلز بهنجار) ب) چگالی حالت الکترونی یک گاز الکترونی اَبَرسانا شده با گاف انرژی (یک فلز اَبَرسانا).

ولکر در سال 1938 میلادی با فرض وجود یک گاف انرژی  $D$  از مرتبه  $k_B T$  در طیف برانگیختگی الکترونی یک اَبَرسانا توانست رفتاری‌هایی مانند دیامغناطیس کامل، ظرفیت گرمایی در دمای بحرانی، وابستگی میدان بحرانی به دما  $H_c(T)$  و همچنین تا اندازه‌ای رسانندگی بی نهایت را به دست آورد. اولین نشانه‌های آزمایشگاهی از حضور گاف انرژی در طیف برانگیختگی الکترونی، اندازه‌گیری اثر تامسون در سال 1946 میلادی به دست آمد و به دنبال این آزمایش،

1. که دارای حداقل جمعیت هستند.

2. واژه "گاف" انرژی در زمینه‌ی ابرسانایی همواره اشاره بر کمیت  $D$  دارد نه  $2D$ .

حضور گاف انرژی با آزمایش‌های متفاوتی از جمله رسانندگی گرمایی، ظرفیت گرمایی و تراکسیل فروسرخ اثبات شد.

**نکته 4-4:** وجود گاف انرژی شرط لازم برای اَبَررسانایی نیست. برخی از اَبَررساناها با حضور ناخالصی مغناطیسی می‌توانند گاف انرژی نداشته باشند ولی اَبَررسانا باشند البته در شرایط معمولی تمام اَبَررساناهای فلزی و همچنین بیشتر آلیاژهای اَبَررسانا، دارای یک گاف انرژی با مقدار مشخصی است.

#### 4-5-1 اثرات جرم ایزوتوپی در اَبَررساناها

از کشفیات مهم دیگری که دانشمندان را در ارایه مبانی نظریه مناسبی، یاری کرد کشف رفتار ایزوتوپی در اَبَررساناها در سال 1950 میلادی بود. این کشف نشان می‌داد که برهم‌کنش شبکه-الکترون در سازوکار اَبَررسانایی دخالت دارد و عامل جفت‌شدگی الکترون‌ها می‌باشد. آزمایش نشان می‌دهد دمای گذار با عکس جرم ایزوتوپی  $M$  به صورت رابطه‌ی (4-31) مواد افزایش می‌یابد.

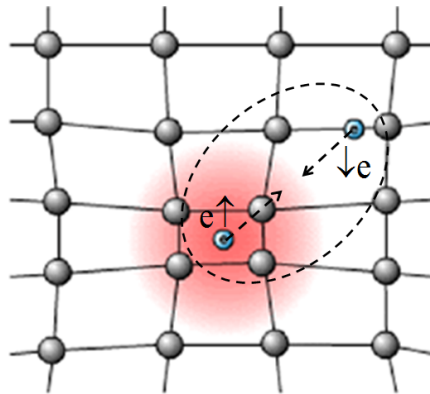
$$T_C \propto M^{-a} \quad (4-31)$$

در رابطه‌ی (4-31)،  $a$  برای اکثر مواد اَبَررسانایی مقداری از مرتبه  $0/45$  تا  $0/50$  را داراست. البته موارد استثنایی نیز وجود دارند که مقدارش بسیار کوچک می‌باشد مانند  $Nb_3Sn$  و  $Mo$  و غیره .

ایده مدل BCS این توانمندی را در اختیار فیزیکدانان قرار داد تا به توصیف خواص اَبَررسانایی دمای پایین بپردازند. این اثر نشان داد که نوسانات شبکه‌ی یونی (یا فونون‌ها) نقش مهمی را در اَبَررسانایی بازی می‌کنند و در تغییر رفتار الکترون‌های رسانش دخالت دارند. از این رو می‌بایست این نوع برهم‌کنش در ساختار الکترونی الکترون‌های رسانش دیده شود. وقتی یک الکترون در داخل بلور حرکت می‌کند شبکه را به طور دینامیکی قطبیده می‌کند (اعوجاج شبکه‌ای) و یک پتانسیل منفی (ربایشی) برای الکترون دوم باقی می‌گذارد. به این معنی دو الکترون توسط ارتعاشات شبکه با هم جفت می‌شوند. این جفت‌های الکترونی با اسپین مخالف می‌باشند که به جفت‌شدگی کوپر معروف می‌باشد (شکل (4-12)).

**نکته 4-4:** این پدیده جفت‌شدگی کوپر فقط در دمای پایین قابل رویت می‌باشد. ارتعاشات شبکه‌ای پدید آمده (فونون‌ها) ناشی از حرکت الکترون‌ها در بلور و

قطبیدگی آن کاملاً جهت‌مند بوده در صورتی‌که در دماهای بالا به علت وجود ارتعاشات شبکه‌ای ناشی از گرما کاملاً همگن بوده و جهت‌مند نمی‌باشند و هیچ نیروی جاذبی بین الکترون‌ها ایجاد نمی‌کنند از این رو باعث تولید زوج نمی‌گردند و از طرفی در دمای بالا آمار و شدت این دسته فونون‌ها بسیار زیاد بوده که سهم فونون‌های ناشی از حرکت الکترون‌ها در مقابل آن‌ها قابل صرف‌نظر کردن می‌باشند.



شکل 4-12. طرحواره‌ای از تولید زوج کوپر به واسطه‌ی قطبیدگی شبکه‌ای ناشی از حرکت الکترون در بلور در دمای پایین.

در فیزیک حالت جامد I بخش ارتعاشات شبکه‌ای نشان داده می‌شود که دمای دبای  $q_D$  با جرم دارای رابطه‌ی  $M^{-1/2}$  می‌باشد که با استفاده از رابطه‌ی (4-31) می‌توان نتیجه گرفت دمای گذار با دمای دبای متناسب است.

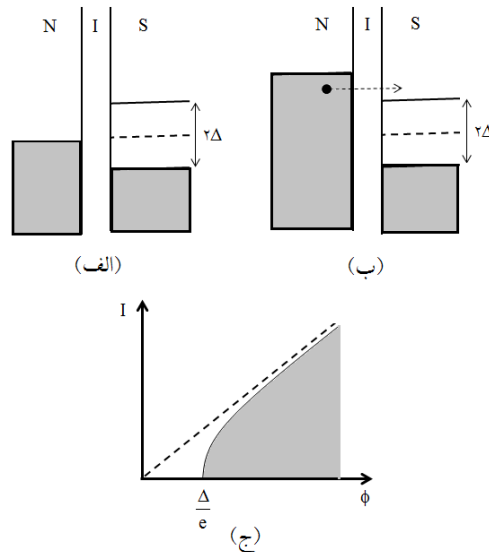
$$T_C \propto q_D \quad (4-32)$$

دمای دبای به ارتعاشات شبکه وابسته می‌باشد. فروهلش<sup>۱</sup> پیشنهاد کرد نوسانات شبکه نقش مهمی در فهمیدن نظریه آبرسانایی بازی می‌کند. با این استدلال فروهلش تلاش نمود تا اثر جرم ایزوتوپی را توضیح دهد ولی نتوانست تفسیر خوبی از گذار فاز آبرسانایی داشته باشد.

۱. Fröhlich

#### 4-5-2 تونل زنی اَبَرساناها

برای اولین بار گیاور در سال 1960 آزمایشی را تعبیه نمود که پدیده تونل زنی اَبَرسانا را مشاهده نمود. در این آزمایش یک عایق اکسیدی به ضخامت 20 انگستروم که بین دو فلز بهنجار (N) و اَبَرسانا (S) قرار گرفته شده است شکل (4-13) الف. با اعمال پتانسیل الکتریکی  $f$  به اتصال (N-I-S) که باعث بالا بردن انرژی فرمی و پر شدن ترازهای انرژی فلز بهنجار تا انرژی فرمی توسط الکترون های بهنجار می شود. الکترون های فلزهای بهنجار به ازای پتانسیل های بیشتر از  $f > D/e$  به سمت قطعه اَبَرسانا تونل می زنند و جریان الکتریکی ایجاد می نمایند. با ترسیم نمودار جریان-ولتاژ می توان مقدار گاف انرژی موجود در اَبَرساناها را به دست آورد.



شکل 4-13 الف) اتصال فلز بهنجار (N) با فلز اَبَرسانا (S) توسط یک عایق اکسیدی (I) بدون اعمال پتانسیل الکتریکی ب) اعمال پتانسیل الکتریکی به فلز بهنجار و ایجاد فرآیند تونل زنی ج) مشخصه جریان-ولتاژ اتصال (N-I-S)

حال اگر به جای فلز بهنجار از فلز اَبَرسانا استفاده شود مطابق شکل (4-13) و اتصال N-I-S را تعبیه نماییم خواهیم دید که نمودار جریان-ولتاژ آن به

صورت شکل (4-13) ج می‌باشد که شروع جریان با مقدار گاف انرژی بستگی دارد.

#### 4-5-3 رفتار ظرفیت گرمایی در آبرسانا

در این بخش قصد داریم انرژی آزاد گیبس فلزی که در معرض یک میدان مغناطیسی واقع است که در دو وضعیت بهنجار و آبرسانا (به ترتیب به‌ازای دمای  $T > T_C$  و به‌ازای  $T < T_C$ ) را محاسبه نماییم. رفتار فیزیکی این فلز توسط انرژی آزاد گیبس مشخص می‌گردد. طبق تعریف انرژی آزاد گیبس یک ماده مغناطیسی در حضور میدان مغناطیسی به صورت زیر تعریف می‌گردد.

$$G = A - TS - m_b MH \quad (33-4)$$

در اینجا  $A$  آنتالپی و  $S$  آنتروپی مجموعه می‌باشند. به سادگی نشان داده می‌شود تغییرات انرژی گیبس برابر خواهد بود<sup>1</sup>:

$$dG = -SdT - m_b M dH \quad (34-4)$$

در صورتی که فلز بهنجار ما مغناطیسی نباشد سهم مغناطیس آن از رابطه‌ی (34-4) حذف می‌گردد.

$$dG_n = -SdT \quad (35-4)$$

به‌ازای  $T < T_C$  فلز بهنجار غیرمغناطیسی به یک آبرسانا کاملاً دیامغناطیس شده با مغناطش  $M = -H$  تبدیل می‌گردد که انرژی گیبس آن به صورت رابطه‌ی (36-4) نوشته می‌شود.

$$dG_s = -S_s dT - m_b (-H)dH \quad (36-4)$$

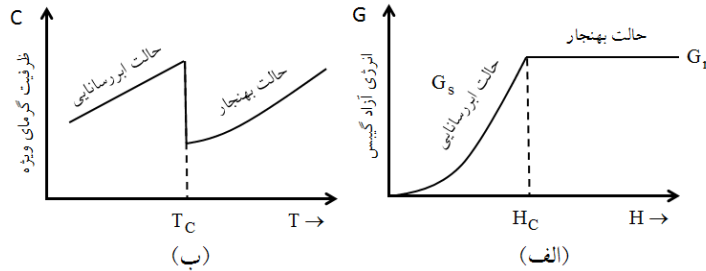
با انتگرال‌گیری از طرفین روابط (35-4) و (36-4) روابط زیر را خواهیم داشت.

$$G_n = - \int S_n dT \quad (37-4)$$

$$G_s = - \int S_s dT + m_b \frac{H^2}{2}$$

1. با استفاده از تعاریف پارامترهای ترمودینامیکی مانند آنتالپی به صورت  $A = U + PV - m_b HM$  و انرژی گیبس به صورت  $G = A - TS$  و با دیفرانسیل گرفتن از هر دو آن‌ها و قرار دادن تغییرات انرژی داخلی به صورت  $dU = dQ - PdV + m_b M dH$  در آن‌ها تغییرات انرژی گیبس در فشار ثابت به صورت  $dG = -SdT - m_b M dH$  نتیجه می‌شود.

شکل (4-14) الف، نمایش انرژی گیبس به ازای دماهای بالا و پایین دمای بحرانی می باشد.



شکل 4-14 الف) انرژی آزاد گیبس در دمای پایین تر از دمای \$T < T\_C\$ در معرض میدان مغناطیسی دو حالت پیدا می کنند: حالت ابررسانایی به ازای میدان های کمتر از میدان های بحرانی \$H < H\_C\$ و حالت بهنجار که به ازای میدان های بیشتر از میدان بحرانی \$H > H\_C\$ ظرفیت گرمای ویژه در یک فلز ابررسانا شونده به ازای دمای های بالاتر از دمای بحرانی \$T > T\_C\$ و پایین تر از دمای \$T < T\_C\$ ابررسانا می شود.

در مرز فضای فاز بین حالت بهنجار و ابررسانا (شکل (4-14))، انرژی گیبس و تغییرات آن پیوسته می باشد.

$$\begin{cases} G_N = G_S \\ dG_N = dG_S \end{cases} \quad (38-4)$$

$$- S_n dT = - S_s dT - m_b (-H) dH \quad (39-4)$$

$$S_s - S_n = m_b(H) \frac{dH}{dT} \quad (40-4)$$

در رابطه ی (41-4) به ازای میدان های بحرانی تغییرات اسپین برابر می شود با:

$$S_s - S_n = \frac{1}{2} m_b \left( \frac{dH^2}{dT} \right)_{T=T_C} \quad (41-4)$$

از این رو اندازه ی این اختلاف بین حالات ابررسانایی و بهنجار در میدان بحرانی برابر \$\frac{1}{2} m\_b (dH^2/dT)\_{T=T\_C}\$ خواهد بود. از طرفی با استفاده از تعریف ظرفیت گرمایی در دمای بحرانی:

$$C = \frac{\partial S}{\partial T} \bigg|_{T=T_C} \quad (42-4)$$

با استفاده از رابطه‌ی (40-4) و مشتق گرفتن از طرفین آن نسبت به دما و قرار دادن آن در رابطه‌ی (42-4)، به اختلاف ظرفیت گرمایی در دمای بحرانی در دو وضعیت بهنجار و آبرسانا خواهیم رسید.

$$DC = C_s - C_n = m_0 T_C \left[ \frac{d^2 H}{dT^2} + \frac{1}{T_C} \left( \frac{dH}{dT} \right)^2 \right]_{T=T_C} \quad (43-4)$$

نکته مهم در این است طبق رابطه‌ی (2-4) (قانون توئن) میدان بحرانی در دمای بحرانی  $H(T_C)$  برابر با صفر می‌باشد. از این رو جمله اول داخل کروشه (4-4) برابر صفر خواهد شد.

$$C_s - C_n = m_0 T_C \left[ \frac{1}{T_C} \left( \frac{dH}{dT} \right)^2 \right]_{T=T_C} \quad (44-4)$$

عبارت (44-4) به فرمول روتگر<sup>۱</sup> شناخته می‌شود. این رابطه نشان دهنده ناپیوستگی ظرفیت در دمای بحرانی می‌باشد.

با توجه به هم‌ارزی شدت میدان مغناطیسی  $H$  با میدان مغناطیسی  $B$  طبق رابطه‌ی  $H = B/m_0$  و به‌کارگیری از رابطه‌ی (2-4) و مشتقگیری از آن:

$$\frac{dH}{dT} = - \frac{2T}{T_C^2} H_{0C} \quad (45-4)$$

که در رابطه‌ی (45-4)  $H_{0C}$  شدت میدان مغناطیسی بحرانی در آبرسانا در دمای صفر می‌باشد. با قرار دادن رابطه‌ی (45-4) در رابطه‌ی (44-4):

$$DC = C_s - C_n = m_0 T_C \left[ \frac{4T^2}{T_C^4} H_{0C}^2 \right]_{T=T_C} \quad (46-4)$$

به‌ازای دمای بحرانی  $T = T_C$  ناپیوستگی ضریب گرمای ویژه را نمایش می‌دهد.

<sup>۱</sup> Rutgers' formula

$$DC = \frac{4m_0 H_{0C}^2}{T_C} \quad (47-4)$$

با توجه به این ناپیوستگی ظرفیت گرمایی در دمای بحرانی و با در نظر گرفتن سهم الکترونی در ظرفیت گرمایی ویژه فلزات بهنجار که قبلاً با آن آشنا شده بوده‌ایم<sup>۱</sup>، می‌توان نسبت تغییرات ظرفیت گرمایی DC به ظرفیت گرمای ویژه الکترون‌های بهنجار  $C_n$  در دمای بحرانی به صورت رابطه‌ی (48-4) نتیجه گرفت.

$$\frac{\partial DC}{\partial T} \bigg|_{T=T_c} = \frac{DC}{gT_C} = \frac{4m_0 H_{0C}^2}{gT_C^2} \quad (48-4)$$

### مسائل:

4-1. نفوذ میدان مغناطیسی در یک ورقه به دست بیاورید. برای این کار می‌توان از معادله نفوذ (رابطه‌ی (4-15)) را به صورت  $\nabla^2 B(x) = \frac{1}{L^2} B(x)$  استفاده نمود. الف) نشان دهید که  $B(x)$  در داخل یک ورقه‌ی آبرسانا که عمود بر محور X و ضخامت آن  $d$  است با رابطه‌ی زیر داده می‌شود.

$$B(x) = B(0) \frac{\cosh(x/L)}{\cosh(d/2L)} \quad (49-4)$$

که در آن  $B(0)$  میدان در خارج ورقه و موازی با آن است؛ در این جا  $x=0$  در مرکز ورقه است.

ب) مغناطش مؤثر  $M(x)$  در این ورقه با  $B(x) - B(0) = m_0 M(x)$  تعریف می‌شود. نشان دهید، برای  $d \ll L$  داریم.

$$m_0 M(x) = -B(0) \frac{1}{8L^2} (d^2 - 4x^2) \quad (50-4)$$

۱. سهم الکترونی در ظرفیت گرمایی ویژه فلزات بهنجارش به صورت  $gT$  و سهم فونونی در ظرفیت گرمایی ویژه به صورت  $CT^3$  می‌باشد.



2-4. عمق‌های نفوذ برای یک قطعه سرب در دمای 3 K و 7/1 K به ترتیب برابر با 396 و 1730 آنگسترم می‌باشند. دمای گذار فاز نسبت به عمق نفوذ در صفر درجه کلوین محاسبه کنید.

3-4. یک قطعه‌ای دارای گذار فاز در دمای 14/5 کلوین می‌باشد در دمای 14 کلوین میدان بحرانی برابر است با  $10^5 \text{ amp} \cdot \text{turns}/\text{metre}$  و در 13 کلوین برابر با  $4/2 \cdot 10^5 \text{ amp} \cdot \text{turns}/\text{metre}$ . میدان بحرانی را در دماهای 4/2 کلوین و صفر کلوین با استفاده از رابطه‌ی (2-4) مشخص کنید.

4-4. با در نظر گرفتن رابطه‌ی (4-48)، در سرب مقدار  $H_{C0}$  برابر است با  $0,0803 \text{ T}$ ، دمای بحرانی  $T_c = 7/19 \text{ K}$  و  $g = 3 \cdot 10^{-3} \text{ J}/\text{mole}/\text{K}^2$ ، ناپیوستگی ظرفیت گرمایی در دمای بحرانی به دست آورید.

5-4. با استفاده از نظریه‌ی آبرسانایی رابطه‌ی زیر را نتیجه بگیرید.

$$\left. \frac{C_s - C_n}{C_n} \right|_{T_c} = 1/43 \quad (51-4)$$

### سؤالات تستی:

1-4. کدام یک از رابطه‌های زیر مقاومت ویژه‌ی یک فلز معمولی نسبت به دما را نشان می‌دهد.

$$r = r_0 + BT^5 \quad (\text{ب}) \quad r = r_0 + BT^3 \quad (\text{الف})$$

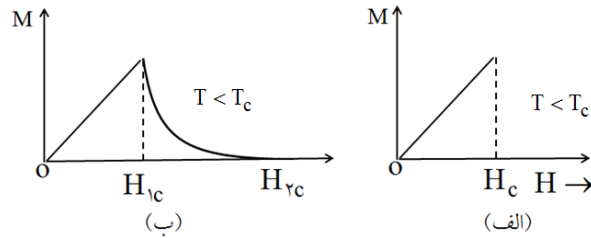
$$r = r_0 + BT \quad (\text{د}) \quad r = r_0 + BT^4 \quad (\text{ج})$$

2-4. کدام یک از عبارات‌های زیر رابطه‌ی میدان مغناطیسی بحرانی با دما، صحیح می‌باشد.

$$B_C(T) = B_{0C} \left( \frac{T}{T_c} \right)^2 \quad (\text{ب}) \quad B_C(T) = B_{0C} \left( \frac{T}{T_c} \right)^2 \quad (\text{الف})$$

$$B_C(T) = B_{0C} \left( \frac{T}{T_c} \right)^{1/2} \quad (\text{د}) \quad B_C(T) = B_{0C} \left( \frac{T}{T_c} \right)^{1/2} \quad (\text{ج})$$

- 3-4. با توجه به شکل (1-4) کدام پاسخ درست می باشد:
- الف): شکل (الف) فلز معمولی، شکل (ب) فلز معمولی با ناخالص مغناطیسی  
 شکل (ج) آبرسانا
- ب): شکل (الف) فلز معمولی با ناخالص مغناطیسی، شکل (ب) فلز معمولی  
 شکل (ج) آبرسانا،
- ج): شکل (الف) آبرسانا، شکل (ب) فلز معمولی شکل (ج) فلز معمولی با  
 ناخالص مغناطیسی،  
 د) هیچ کدام،
- 4-4. با توجه به شکل (4-15) کدام نمودار آبرسانا نوع اول و کدام یک نوع دوم  
 را بیان می کنند.



- الف): شکل (الف) آبرسانا نوع اول و شکل (ب) آبرسانا نوع دوم  
 ب): شکل (الف) آبرسانا نوع اول و شکل (ب) آبرسانا نوع دوم  
 ج): شکل (الف) و (ب) هر دو آبرسانا نوع اول  
 د): شکل (الف) و (ب) هر دو آبرسانا نوع دوم
- 5-4. کدام رابطه زیر در یک آبرسانا صادق می باشد.

$$\frac{d\mathbf{J}_S}{dt} = \frac{ns e^2}{m} \mathbf{E} \quad \text{(الف)}$$

$$\tilde{\mathbf{N}} \cdot \mathbf{J}_S = - \frac{ns e^2}{m e_0 c^2} \mathbf{H} \quad \text{(ب)}$$

$$\mathbf{N}^2 \mathbf{H} = \frac{ns e^2}{m e_0 c^2} \mathbf{H} \quad \text{(ج)}$$

د) هر سه صحیح می باشند.

6-4. که رابطه‌ی زیر نمایش اثرات جرم ایزوتوپی در آبرساناها می‌باشد.

الف)  $T_C \mu M$

ب)  $T_C \mu M^{-2}$

ج)  $T_C \mu M^{1/2}$

د) هر سه صحیح نمی‌باشند.



Fundamental constants		
Bohr radius for hydrogen	$4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_0e^2 =$	$a_H$ 5.292 $\times 10^{-11}$ m
Velocity of light in free space		$c$ 2.9979 $\times 10^8$ m s $^{-1}$
Electronic charge		$e$ 1.6022 $\times 10^{-19}$ C
Gravitational constant		$G$ 6.673 $\times 10^{-11}$ N m $^2$ kg $^{-2}$
Planck's constant		$h$ 6.626 $\times 10^{-34}$ J s
	$h/2\pi =$	$\hbar$ 1.0546 $\times 10^{-34}$ J s
Boltzmann's constant		$k_B$ 1.3807 $\times 10^{-23}$ J K $^{-1}$
Electron rest mass		$m_0$ 9.109 $\times 10^{-31}$ kg
Proton rest mass		$m_p$ 1.6726 $\times 10^{-27}$ kg
Avogadro's number		$N_A$ 6.022 $\times 10^{23}$ mol $^{-1}$
Molar gas constant		$R$ 8.315 J mol $^{-1}$ K $^{-1}$
Rydberg's constant	$\alpha^2 m_0 c / 2h =$	$R_\infty$ 1.0974 $\times 10^7$ m $^{-1}$
Rydberg's constant for hydrogen		$R_H$ 13.606 eV
Standard molar volume		$V_m$ 22.414 $\times 10^{-3}$ m $^3$ mol $^{-1}$
Fine structure constant	$e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c =$	$\alpha$ (137.036) $^{-1}$
Electric permittivity of free space		$\epsilon_0$ 8.854 $\times 10^{-12}$ F m $^{-1}$
Bohr magneton		$\mu_B$ 9.274 $\times 10^{-24}$ A m $^2$ or J T $^{-1}$
Nuclear magneton		$\mu_N$ 5.051 $\times 10^{-27}$ A m $^2$ or J T $^{-1}$
Magnetic flux quantum	$h/2e =$	$\Phi_0$ 2.0678 $\times 10^{-15}$ T m $^2$
Stefan's constant		$\sigma$ 5.671 $\times 10^{-8}$ W m $^{-2}$ K $^{-4}$
Magnetic permeability of free space		$\mu_0$ 4 $\pi$ $\times 10^{-7}$ H m $^{-1}$

Energy equivalents for photons  $E = h\nu = k_B T = \frac{hc}{\lambda}$

$E$		$\nu$	$T$	$\lambda$	$\lambda^{-1}$	
(J)	(eV)	(Hz)	(K)	(m)	(m $^{-1}$ )	(cm $^{-1}$ )
1	6.242 $\times 10^{18}$	1.509 $\times 10^{33}$	7.243 $\times 10^{22}$	1.486 $\times 10^{-25}$	5.034 $\times 10^{24}$	5.034 $\times 10^{22}$
1.602 $\times 10^{-19}$	1	2.418 $\times 10^{14}$	1.160 $\times 10^4$	1.240 $\times 10^{-6}$	8.066 $\times 10^5$	8.066 $\times 10^3$
6.626 $\times 10^{-34}$	4.136 $\times 10^{-15}$	1	4.799 $\times 10^{-11}$	2.998 $\times 10^8$	3.336 $\times 10^{-9}$	3.336 $\times 10^{-11}$
1.381 $\times 10^{-23}$	8.617 $\times 10^{-5}$	2.084 $\times 10^{10}$	1	1.439 $\times 10^{-2}$	69.50	0.6950
1.987 $\times 10^{-25}$	1.240 $\times 10^{-6}$	2.998 $\times 10^8$	1.439 $\times 10^{-2}$	1	1.0	0.01
1.987 $\times 10^{-25}$	1.240 $\times 10^{-6}$	2.998 $\times 10^8$	1.439 $\times 10^{-2}$	1.0	1	0.01
1.987 $\times 10^{-23}$	1.240 $\times 10^{-4}$	2.998 $\times 10^{10}$	1.439	0.01	100	1

## مراجع

۱. *Introduction to Solid State Physics*, **Charles Kittel**, ۱۹۸۳.
۲. *Principles of the theory of solids*, **J.M.Ziman**, second Edition ۱۹۷۲.
۳. *Solid State Physics*, **H. C. Gupta**, ۱۹۹۶.
۴. *Solid State Physics*, **Ashcroft and Mermin**, ۱۹۷۵.
۵. *Magnetism in Condensed Matter*, **Stephen Blundell**, ۲۰۰۱.
۶. *Band Theory and Electronic Properties of Solids*, **John Singleton**, ۲۰۰۱.
۷. *Solid state Physics (Introduction to the theory)*, **J. D. Patterson, B. C. Bailey**, ۲۰۰۵.
۸. *Condensed Matter Physics*, **M.P. Marder**, ۲۰۰۰.
۹. *Solid State Physics*, **G. Grosso and G. Pastori Parravicini**, ۲۰۰۰.
۱۰. *A Quantum Approach to Condensed Matter Physics*, **P.L. Taylor and O. Heinonen**, ۲۰۰۲.
11. فیزیک حالت جامد، تألیف اچ.ام. روزنبرگ، ترجمه‌ی حسین عشقی، دکتر حسن عزیزی، چاپ اول 1376 مرکز نشر دانشگاهی
12. نظریه کوانتومی جامدات، تألیف یون پ. اوریلی، ترجمه دکتر سید اکبر جعفری، دانشگاه صنعتی اصفهان مرکز نشر شهریور 1384.